

12. 2元系高濃度コロイドの凝集

中部大学工業物理学科

宮島 佐介、 田中 友安、 長谷川 豊

P. Meakin (du Pont)

Kolb and Herrmann の提案した高濃度コロイドのモデルを簡単に説明し、さらにその発展について述べる。以下では、便宜上正方格子にて考えるが、一般の場合への発展はまったく同様である。原子または分子はこの正方格子の全ての最小単位 of 正方形に1つずつ占有しているとする。

分子間には少し隙間があり分子は微小振動(jittering)している。この jittering の際に隣と接触した時、この2つの分子は結合しクラスターを構成する。このような過程が無限に繰り返されることにより、大きな凝集体が作られることになる。

我々の目的は、この系の kinetics を調べることと、2元系への拡張を試みることである。ここでは後者の preliminary な結果を報告する。以下に、上述のモデルを2元系(A分子+B分子)に拡張したモデルの計算機シミュレーションの手順を述べる。

(1) 与えられたAとBの濃度比になるように格子上に分子をランダムに配置する。

(2) ランダムに1分子を選択し、拡散係数と1様乱数と比較して jittering するかどうか決定する。ここに拡散係数は、 M をクラスターサイズとしたとき、 M^α であるとする。

(3) jittering する方向をランダムに選ぶ。

(4) jittering する分子と jittering した方向の隣の分子が結合するかどうかを check する。

(5) クラスターの記録を取り(2)に戻る。

結合法則としては、同分子(A-A、B-B)は結合するが、異分子(A-B)では結合しないとするモデル I と、この逆つまり異分子は結合するが同分子では結合しないとするモデル II について調べた。

我々はA、B の濃度をいろいろ変化させると同時に、拡散係数のべき α の影響も調べた。現在得られている結果の1部が図1に示されている。 α (AとBの濃度比 r にも依存するがこれは別の機会に述べる。)によりパターンが異なることがはっきりと見られる。ここで空白の正方形及びのある正方形がそれぞれAおよびBを表している。以下には $r = 0.5$ の場合のみ示してある。図1(a)と(b)には、モデルIの $\alpha = -2$ 及び2の場合が示されている。前者の場合、クラスターサイ

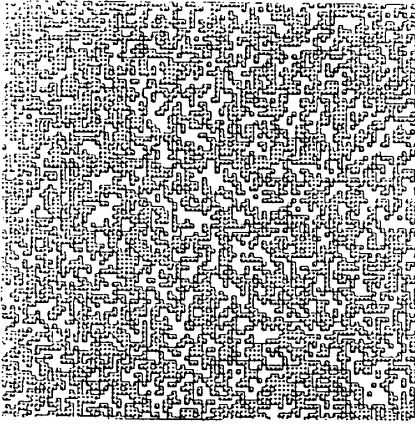


Fig.1(a)

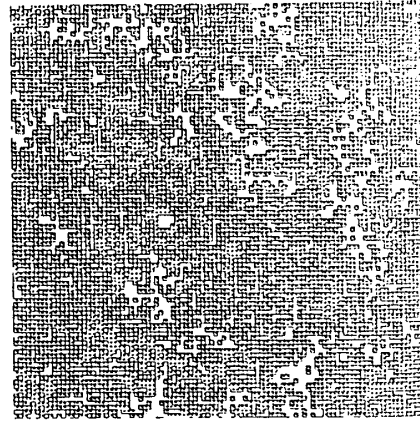


Fig.1(b)

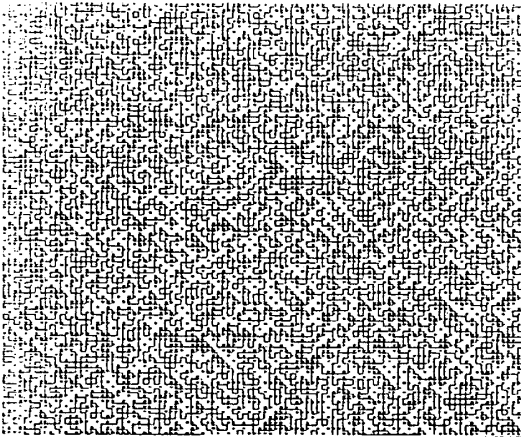


Fig.1(c)

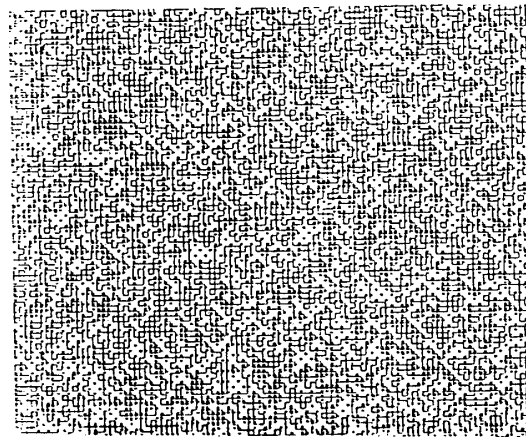


Fig.1(d)

ズの分布は広がっているが、後者では、大きなクラスターが目立ち、その他の大部分は1個の分子にままだいるのが目につく。一方、モデル II では始めにAとBをランダムにばらまくが、それに強く依存するらしく α による差は余り見られない(図1(c), (d))。しかし、図2に見るように成長の時間依存性は異なっている。このシミュレーションにおける時間は、全てのクラスターが1通り jittering する間隔を1単位としている。従って、1クラスターが jittering する度に $1/n$ だけ時間を進めている。ここで n はその時刻におけるクラスター数である。図2(a)、(b)には横軸を時間ととり、モデル I、つまり同種の分子が結合する場合の最大クラスターのクラスターサイズが示されている。(a)は $\alpha = -2$ で、(b)は $\alpha = 1$ である。前者のスロープは0.5であり、後者は1である。一方、図2(c), (d)にはモデル II の $\alpha = -2$ 、および $\alpha = 1$ の場合がそれぞれ示されている。前者のスロープは0.5で、後者ののは1である。図2から α が正のとき $S_{\max} = t$ であり、 α が負の時は $S_{\max} = t^{0.5}$ と言えそうである。また、これらのフラクタル次元などによる解析はこれから行われる。

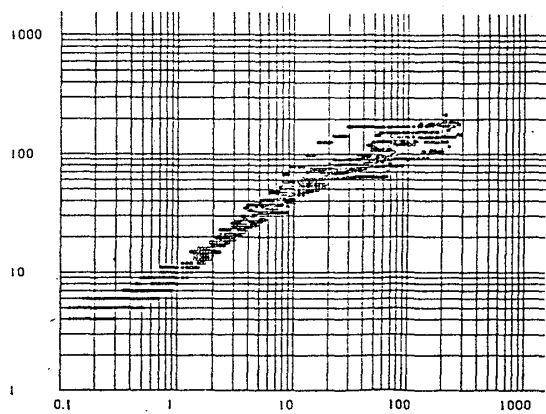


Fig.2(a)

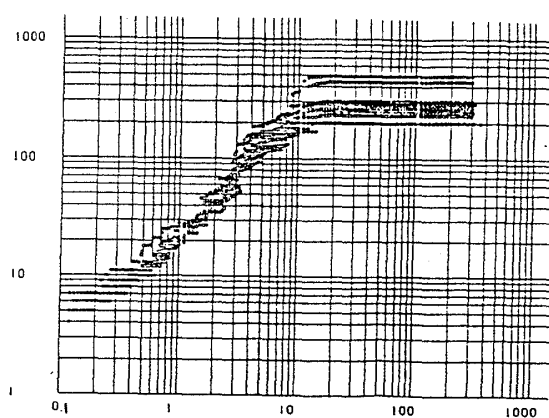


Fig.2(b)

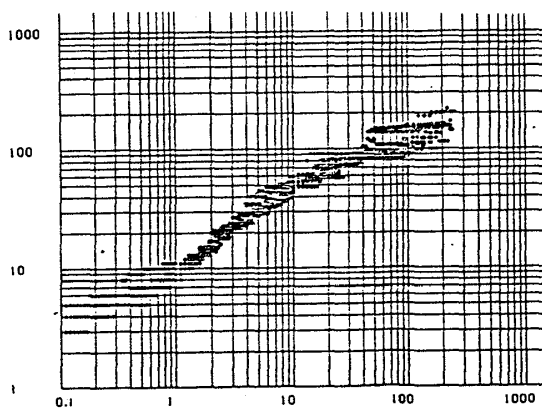


Fig.2(c)

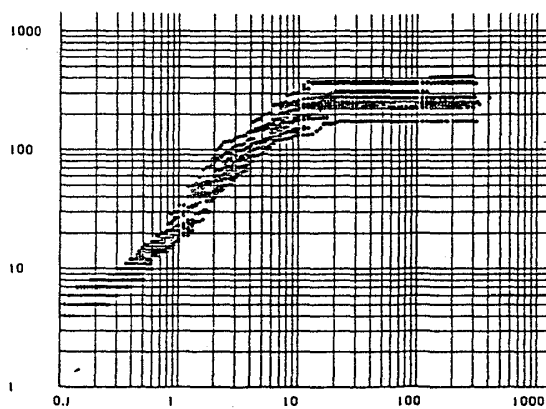


Fig.2(d)