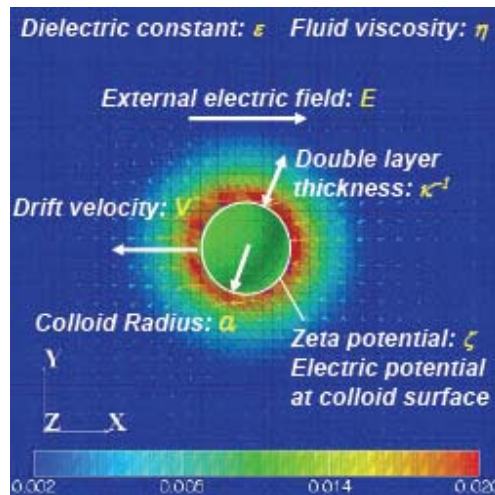


ディビジョン番号	15
ディビジョン名	コロイド・界面化学

大項目	2. 微粒子分散系
中項目	2-4. 界面電気現象
小項目	2-4-2. 電気泳動のシミュレーション

概要（200字以内）

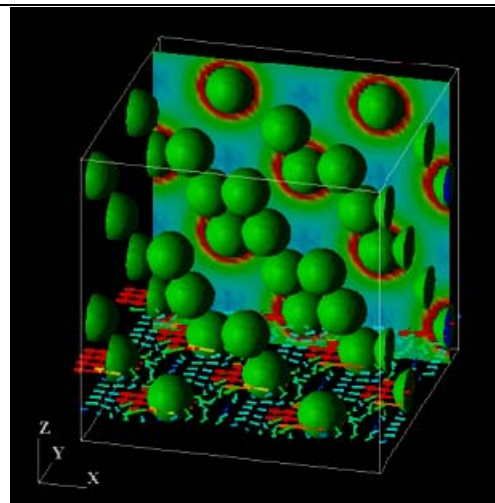
電気泳動にはメソスケールシミュレーションが有効であり、多くの問題に対して適応可能である。しかしこの方法で解決が難しい問題も多い。代表的な例はイオンや水の微視的性質が重要なケースであり、何らかの形で微視的効果を取り込まざるを得ない。これらの問題に有効な方法として、ミクロ階層・メソ階層・マクロ階層が物理的に矛盾なく相互に影響し合う、全く新しいマルチスケールシミュレーションの開発が期待を集めている。



現状と最前線

電気泳動に対する理論的アプローチは歴史が深く、コロイド粒子（変形しない固体の球）が無限希釈の場合で、外部電場に対し線形応答する領域での定常泳動速度については70年代のO' Brien-Whiteの仕事によってほぼ満足のいく結果が得られている。しかし、粒子の形状が非球形のケース、外部電場が強くと泳動速度が非線形に反応する領域、あるいは外部電場が時間的に変動する場合の反応については理論的に完全に決着している訳ではない。

荷電コロイド粒子の周りにはコロイドとは反対符号の電荷を帯びたイオンが静電的に引き寄せられつつ、同時に熱ゆらぎによる拡散を受けて電気二重層が形成される。理論的に難しいのは、この電気二重層の分布を得る際に、流体力学とカップルした方程式を解く必要が生じるからである。コロイド粒子の体積分率が上昇して各粒子の電気二重層が重なりはじめると、状況はさらに困難になる。これらの場合、何らかの近似を導入したモデルで理論的に扱うか、シミュレーションで数値計算を行うかの選択がある。前者の方針で研究を行っている世界的第一人者が



この電気二重層の分布を得る際に、流体力学とカップルした方程式を解く必要が生じるからである。コロイド粒子の体積分率が上昇して各粒子の電気二重層が重なりはじめると、状況はさらに困難になる。これらの場合、何らかの近似を導入したモデルで理論的に扱うか、シミュレーションで数値計算を行うかの選択がある。前者の方針で研究を行っている世界的第一人者が

大島広之氏であり、その集大成として最近英語の著書が出版されている。後者の方針で研究を行っているグループは世界にいくつかあるが、全てをマイクロに扱う微視的シミュレーションと流体力学などの粗視化された連続体の変数を扱うメソスケールシミュレーションに大別することができる。荷電コロイド分散系の場合、溶媒やイオンのサイズ/時間スケールとコロイド粒子のそれらには大きな解離があり、少なくともこれから数十年の間は微視的シミュレーションで意味のある結果を得ることは難しい。メソスケールシミュレーションは、筆者らの他、田中肇氏やドイツの Max-Planck のグループが行っている。

メソシミュレーションは、先に挙げた問題の多くに対して有効である。実際に、粒子の形状が非球形のケース、外部電場が強く泳動速度が非線形に応答する領域、外部電場が時間的に変動する場合の応答、さらにはコロイド粒子濃厚系（添付図）への応用が行われている。しかしながら、この方法で解決が難しい問題も数多く存在する。代表的な例は、コロイド表面とイオンや水の化学的作用による微視的效果（シュテルン層や疎水・親水相互作用）であり、このような場合は何らかの形で溶媒やイオンの微視的な性質を取り込まざるを得ない。さらに大きな問題がイオン強結合領域の理論的解明であり、世界中の理論家がチャレンジして10年以上何の成果も得られていない難問中の難問である。この効果によって例えば同符号コロイド粒子間に本来働くはずのない引力が発生しうると言われている。この場合もイオンを連続対として扱うメソシミュレーションは適切とは言い難く、何らかの形で微視的な性質を取り込むことが期待されている。

これらの問題の解決に有効な方法として、マイクロ階層（原子・分子レベル）・メソ階層（濃度分布や界面など）・マクロ階層（材料の形や製造プロセスなど）が物理的に矛盾なく相互に影響し合うマルチスケールシミュレーションの開発が期待を集めている。一例として、筆者らが取り組んでいる JST-CREST 研究「ソフトマターの多階層/相互接続シミュレーション」がある。

将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

過渡応答や振動電場下の挙動などの動的な問題

非球形粒子の電気泳動

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

コロイド表面とイオンや水の化学的作用による微視的效果（シュテルン層や疎水・親水相互作用）の解明

イオン強結合領域の理論的解明（同符号コロイド粒子間に働く引力の起源など）

キーワード

電気泳動、コロイド、イオン強結合、メソスケールシミュレーション、マルチスケールシミュレーション

（執筆者：山本量一、東谷公）