

ゾル-ゲル法におけるシリカ粒子形成モデルの定量的検討

(東北大院工) 長尾 大輔・中林 浩之・石井 治之・○今野 幹男

ゾル-ゲル法は単分散性の酸化物微粒子を合成できる液相法として知られる。特に、シリコンアルコキシドを利用したシリカ生成反応では、極めて単分散性の高いシリカ粒子が容易に得られることから工業的にも広く利用されている。本法では多くの場合、サブミクロンサイズのシリカ粒子が生成するが、セミバッチプロセス等も利用して的確な合成条件を選定すれば $6\ \mu\text{m}$ 程度までの単分散なシリカ粒子をワンポットで合成することも可能である¹⁾。このようなシリカ粒子の生成過程に関しては、これまで様々な検討がなされてきたが、粒子形成機構については統一的な見解が得られていないのが現状である。

これに対し本研究では、反応速度、粒子表面電位、イオン強度などの諸因子を考慮した粒子形成モデルを提唱し²⁾、モデル計算をバッチプロセスとセミバッチプロセスの両者において行った。両プロセスに対応する粒子合成実験は、粒子形成過程での反応速度の変化やイオン強度変化を抑制できるよう pH 緩衝系で行った。粒子合成実験から得られる粒径分布をモデル計算と比較することで、セミバッチプロセスにおいてミクロンサイズの単分散粒子が得られる要因を検討した。

1) H. Nakabayashi, A. Yamada, M. Noba, Y. Kobayashi, M. Konno, D. Nagao, *Langmuir*, **26**, 7512-7515 (2010)

2) D. Nagao, H. Nakabayashi, H. Ishii, M. Konno, *J. Colloid Interface Sci.*, **394** 63-68 (2013).

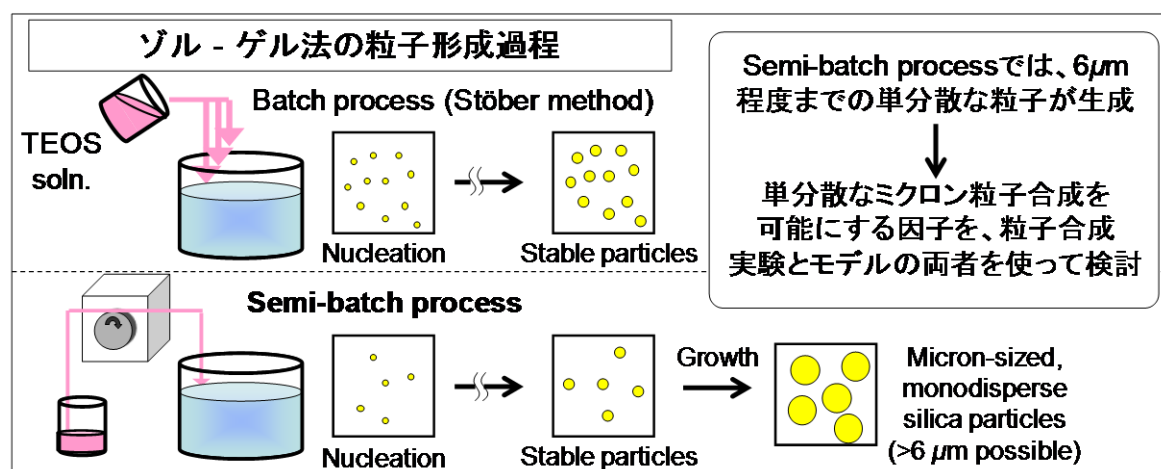


Fig. 1 Schematic image of particle formation in batch and semi-batch processes

A Unified Mechanism to Quantitatively Understand Silica Particle Formation in Sol-Gel Method

D. Nagao, H. Nakabayashi, H. Ishii, M. Konno (Tohoku Univ., konno@mickey.che.tohoku.ac.jp)

Factors for controlling sizes of silica particles formed in the hydrolysis and condensation of silicon alkoxides were examined in batch and semi-batch processes with our proposed model. Comparison of experimental particle sizes with calculated ones showed that the addition of electrolytes slightly decreased surface potential of silica particles in both batch and semi-batch processes, and the surface potential values estimated for the semi-batch process were lower than that for batch process. In simulation of the number of particles formed in the processes, the particle number had strong dependences on surface potential and Debye-Hückel parameter. The simulated number of particles formed in semi-batch process was smaller than that in batch process under the same surface potential and Debye-Hückel parameter. The combination of the low surface potential and the small number of particles revealed that the semi-batch process was suitable for producing a small number of particles, which provides enlargement of size range of silica particles formed in the method.