

コロイド粒子系の秩序形成に関するモンテカルロ・シミュレーション

(岐阜大・工) ○寺尾 貴道

剛体微粒子系や荷電微粒子系における構造形成の問題、例えばコロイド結晶の物理的性質を明らかにするうえで、計算機シミュレーションは有力な役割を果たしてきた。従来の研究において、コロイド結晶に関する相図および融解相転移の問題に関する計算機シミュレーションは数多く行われている。しかし、その多くはシミュレーションの中で扱っている粒子の個数が高々数千個から一万個前後である事例が数多い。この点に関して、一般に微粒子系の融解相転移現象を計算機シミュレーションで明らかにする上では、特に相転移点近傍において系の有限サイズ効果(シミュレーション研究において、計算機性能の限界などの理由で扱える粒子の個数が限られる場合があり、その結果十分大規模な計算が困難である事から生ずる影響)が強く関与するため、計算結果の取り扱いには注意が必要である事が以前から指摘されていた。しかし、この点について系統的に検討した事例はあまりない。相転移点近傍における計算結果の信頼性を明らかにする上では、系の粒子数を例えば数倍程度変化させて確認するだけではなく、粒子数を何桁も変えてその影響を調べる事が望まれる。本研究ではこの問題に関して、大規模並列コンピュータに適したモンテカルロ・シミュレーション手法を採用する事により、微粒子系の秩序形成の問題について定量的に明らかにした[1,2]。

Fig. 1 に、微粒子系の秩序形成の様子を特徴付ける物理量である、オーダー・パラメータの計算結果の一例について示した。具体的には平行平面内に閉じ込められた微粒子系に関して、オーダー・パラメータの粒子濃度依存性を、系の粒子数 N を何通りも変えながら計算を行った。図より明らかに、粒子数が数千個程度の計算においては結果が未だ十分に収束していない様子がわかる。すなわち、上記の問題に関して正確な解析結果を得るためには、従来の研究事例よりも大規模な計算機シミュレーション解析を行う事が不可欠である、という結果が得られた。

[1] T. Terao, *Soft materials* **8**, 63 (2010).

[2] T. Terao and Y. Oguri, *Mol. Sim.* **38**, 928 (2012).

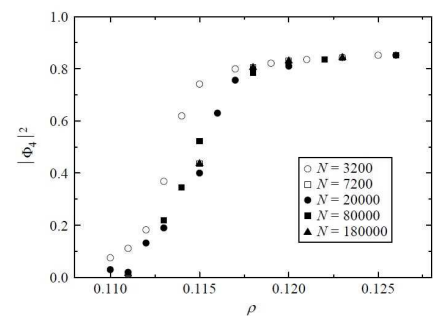


Fig. 1 Squared bond-orientational order parameter of the system (N : the number of particles)

Multicolour domain decomposition Monte Carlo simulation of colloidal suspensions

T. TERAOK (Gifu Univ., terao@gifu-u.ac.jp)

Self-assembled crystallization of nanoparticles is a fundamental topic in colloid and interface science. In this study, the melting transition of colloidal particles under confinement was investigated by the multicolour domain decomposition Monte Carlo method. The order parameters and the bond-orientational correlation function of the system near the melting transition were calculated numerically. These results suggest the existence of a two-stage melting transition and the intermediate state called tetratic phase in these systems. The structural formation of polymer-nanoparticle composites (polymer spherical brushes) was also investigated. Based on an osmotic model, the solid-liquid transition of these systems was studied numerically.