

## 論文の内容の要旨

論文題目：自己組織化を利用したコロイド粒子の配列過程に関する研究

氏名 西川 弘之

本論文は、自己組織化によるコロイド粒子の配列過程を計算機シミュレーション・実験の両面から検討したものである。特に、学術・産業の両面で注目されているコロイド粒子の二次元配列膜（単粒子膜）についての検討を行った。コロイド粒子の二次元配列膜についてはこれまでに様々な作製方法が提案されているが、本研究では作製プロセスが簡便で生産面で有利な液膜法に着目した。目的の構造を得るためには、粒子の配列ダイナミクスを明らかにすることが欠かせない。しかし、コロイド粒子のサイズはマイクロメートル以下と小さいため、直接ダイナミクスを観察することは困難である。そこで、配列過程の詳細を検討するために、個々の粒子を追跡できる離散要素法を適用して計算機シミュレーションを行った。シミュレーションコードについては共同研究者の指導の下で自ら開発した。開発したコードを用いて、まず様々な粒子濃度で計算を行い、計算結果が実験で得られている粒子群の配列構造と定性的に一致することを示している。続いて、規則的な二次元配列膜が得られる可能性のある粒子濃度において、様々なプロセスと構造の関係を明らかにしている。それらの結果より、規則的な粒子配列膜を得るための指針を提案している。本論文は全6章から構成されており、各章の内容は以下のように要約できる。

第1章では、本研究の背景と既往の研究について述べ、本研究の目的および本論文の構成を述べている。

第2章では、液相中コロイド粒子にはたらく様々な力に関して、その理論を述べている。力の表式については、背景と表式の導出を含めて詳細に述べている。

第3章では、本研究で適用した離散要素法、ならびに解析手法について述べている。

第4章では、様々な粒子濃度の条件で計算を行い、計算結果が実験で得られた粒子配列構造と定性的に一致することを示している。また、配列過程において粒子構造がどのように変化して終状態に至るかを議論している。

第5章では、規則的な二次元配列膜に焦点を絞り、様々なプロセスにおいて計算を行い各因子の影響について詳細に述べている。まず、ブラウン揺動力と基板摩擦力に着目し、得られた配列構造との関係を定量的に述べている。続いて、液膜法による粒子配列膜作製実験を行い、計算結果との比較することで、粒子径が10nm程度の場合、水和斥力の存在が配列形成を阻害する可能性を示唆している。それらの結果を基に、規則的な二次元配列膜を得るための指針を提案している。

第6章では、本研究で得られた結果を総括している。