

# Colloidal Dispersion Analyzer

## (微粒子分散系解析ソフト)

### 概要:

分散液中の2個の微粒子間の相互作用を計算するソフト

球形粒子、円柱形粒子、板状粒子(円板状)に対応

静電相互作用と立体相互作用に分けて計算

それぞれに van der Waals 相互作用を加えたトータルの相互作用エネルギーを表示

### 計算方法:

#### Van der Waals 相互作用

球形粒子  $V(\text{vdW}) = A r_1 r_2 / \{ 6 (r_1 + r_2) d \}$

円柱形粒子  $V(\text{vdW}) = L (A / 24 d^{3/2}) \sqrt{2 r_1 r_2 / (r_1 + r_2)}$

板状粒子  $V(\text{vdW}) = \pi r^2 (A / 12 \pi) \{ 1 / d^2 + 1 / (d + 2 L)^2 - 2 / (d + L)^2 \}$

ここで、

A: Hamaker 定数、 $r_1, r_2, r$ : 粒子の半径、 $L$ : 粒子の長さ、 $d$ : 粒子表面間距離

#### 静電相互作用

球形粒子  $V(\text{el}) = (64 \gamma_1 \gamma_2 n_0 k T / \kappa^2) \{ 2 \pi r_1 r_2 / (r_1 + r_2) \} \exp(-\kappa d)$

円柱形粒子  $V(\text{el}) = L (64 \gamma_1 \gamma_2 n_0 k T / \kappa^{3/2}) \sqrt{2 \pi r_1 r_2 / (r_1 + r_2)} \exp(-\kappa d)$

板状粒子  $V(\text{el}) = \pi r^2 (64 \gamma_1 \gamma_2 n_0 k T / \kappa) \exp(-\kappa d)$

ここで、

$$\gamma_i = \{ \exp(Z_i e \phi_\xi / 2 k T) - 1 \} / \{ \exp(Z_i e \phi_\xi / 2 k T) + 1 \}$$

$$\kappa = \sqrt{(\sum n_0 Z_i^2 e^2 / \epsilon_0 \epsilon_r k T)}$$

$n_0$ : イオン濃度、 $Z_i$ : イオン価数、 $k$ : ボルツマン定数、 $T$ : 温度、 $e$ : 電気素量

$\epsilon_0$ : 真空の誘電率、 $\epsilon_r$ : 比誘電率

#### 立体相互作用

$$V(\text{st}) = v_d N_0 k T \{ (m_1 - n m_2) \ln(\phi_1 \phi_2) - 2 m_1 \ln \phi_1 + 2 m_2 \ln 2 - 2 \chi \phi_2^2 (m_1 + n m_2) \}$$

ここで、 $N_0$ : アボガドロ数、 $\chi$ : 溶媒と分散剤の相互作用係数

その他は分散剤吸着層に関するパラメーターで、分散剤吸着層中の

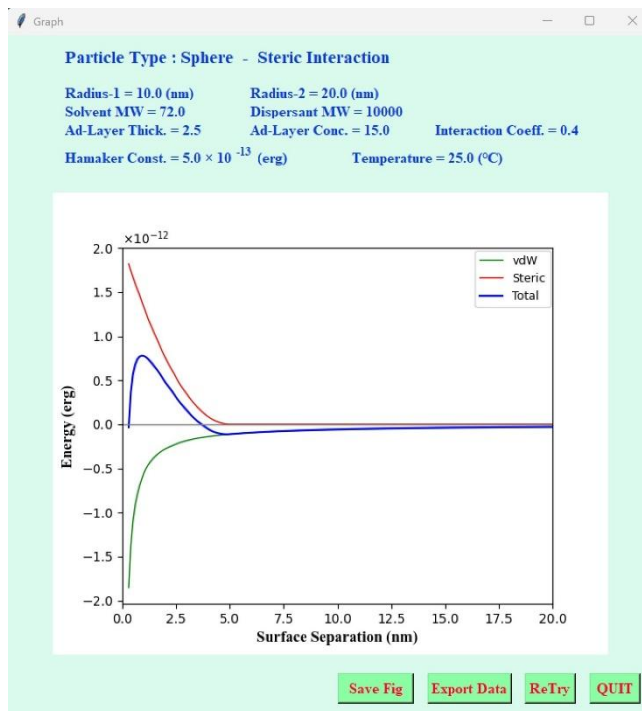
$\phi_1$ : 溶媒比率、 $\phi_2$ : 分散剤比率、 $m_1$ : 溶媒のモル濃度、 $m_2$ : 分散剤のモル濃度

$v_d$ : 2個の粒子の分散剤吸着層が重なった部分の体積(粒子形状によって異なる)

## 使用方法:

- 1 粒子形状の選択画面が表示されるので、ラジオボタンで選択して“OK?”をクリック  
Sphere: 球形、Cylinder: 円柱形、Plate: 板状  
図示されるように、Cylinder は横並び、Plate は縦並びで計算する  
Cylinder を選択した状態で半径に対して長さを短く設定することで板状粒子の横並び状態、また Plate を選択した状態で半径に対して長さを大きく設定することで円柱状粒子の縦並び状態の計算も可能
- 2 粒子形状に応じて粒子サイズを入力(半径、または半径と長さ)  
球形粒子と円柱形粒子に関しては、半径は2個の粒子それぞれで個別に設定可能
- 3 相互作用の種類(静電相互作用、または立体相互作用)を選択
- 4 エネルギーの単位を選択(erg、または kT)して、“OK?”をクリック
- 5 各種パラメーターを入力 (デフォルト値が設定されている)  
静電相互作用に関する入力項目  
Electrolyte Conc.(電解質濃度) : モル濃度  
Cation Valence, Anion Valence(正イオン, 負イオンの価数) : 整数値  
Dielectric Const.(誘電率) : 溶媒の比誘電率  
 $\zeta$ -Potential( $\zeta$  電位) : mV 単位  
立体相互作用に関する入力項目  
Solvent MW, Dispersant MW(溶媒, 分散剤の分子量) :  
Ad-Layer Thick.(分散剤吸着層の厚さ) : nm 単位  
Ad-Layer Conc.(分散剤吸着層中の分散剤濃度) : %  
Interaction Coeff.(相互作用係数) : 溶媒と分散剤の相互作用係数  
共通の入力項目  
Hamaker Const.(Hamaker 定数) :  $10^{-13}$  erg 単位  
Temperature(温度) : 分散系の温度(°C)  
Data Range(データ範囲) : 計算する粒子表面間距離の範囲  
Step(増分) : 粒子表面間距離のデータ間隔

6 “RUN”をクリックすると計算が開始され、結果のグラフが表示される



緑線: van der Waals 相互作用

赤線: 静電, または立体相互作用

青線: トータルの相互作用

プラスが反発力、マイナスが引力

“Save Fig”ボタン : グラフの保存(png, jpg 等)

“Export Data”ボタン : データの出力(csv 形式)

“ReTry”ボタン : プログラム再実行

“QUIT”ボタン : プログラム終了