

レーザー光散乱パターン下におけるナノ粒子挙動のシミュレーション

Simulation of Motion of Nanoparticles Under Scattered Laser Light Pattern

○横井 直倫¹、相津 佳永² (1. 旭川高専、2. 室蘭工大院)

○Naomichi Yokoi¹, Yoshihisa Aizu² (1.Asahikawa Nat. Col. Tech., 2.Muroran Inst. Tech.)

E-mail: yokoi@asahikawa-nct.ac.jp

1. はじめに

レーザー光の集光により形成されるスポットあるいは光拡散性物体によるレーザー散乱光のランダムな干渉により形成されるスペックルパターンは、レイリー散乱粒子に対して光学力を及ぼすため、これらに基づくブラウン運動下のナノ粒子挙動制御に関する検討^{1,2)}が従来からなされてきた。今回は、レーザー光散乱パターン下のナノ粒子移動経路をスポットやスペックルのサイズおよび光学力をパラメータとしてシミュレーションし、粒子の捕捉に到る時間等を解析したので報告する。

2. 測定原理

レーザー光により形成されるスポットあるいはスペックルパターンをナノ粒子懸濁液に投影する場合、個々の粒子はレーザーパターンによる光学力の影響を受けたブラウン運動を示し、それらの挙動はLangevin方程式¹⁾の解として得られる以下の速度ベクトル $\dot{\mathbf{r}}$,

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{n_m^2 \varepsilon_0 R^2}{6\eta} \cdot \frac{n_p^2 - n_m^2}{n_p^2 + n_m^2} \cdot \nabla I(\mathbf{r}) + \sqrt{\frac{k_B T}{3\pi\eta R}} \cdot \mathbf{W}, \quad (1)$$

に従う。ここで、 $\mathbf{r}$ は粒子の位置ベクトル、 n_m と n_p はそれぞれ周囲媒質と粒子の屈折率、 ε_0 は真空中の誘電率、 R は粒子の半径、 η は周囲媒質の粘度、 $\nabla I(\mathbf{r})$ はレーザーパターンの位置 $\mathbf{r}$ における強度勾配、 k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度、また $\mathbf{W}$ は白色雑音ベクトルを表す。さらに、粒子の運動の大きさを表す統計処理指標の一つである平均二乗変位量(Mean Square Displacement: MSD)は、出発点を基準とした時刻 t における水平、垂直方向の粒子位置座標を各々 $x_{pos}(t)$, $y_{pos}(t)$ として、

$$MSD = \langle \{x_{pos}(t)\}^2 + \{y_{pos}(t)\}^2 \rangle, \quad (2)$$

と与えられ、これにより粒子の捕捉に到る時間を定量評価することができる。

3. 数値計算結果

Figs.1(a), (b)は、20[μm]×20[μm]の正方領域に疑似ランダムパターンでモデリングした平均スペックル径が各々 $d=1.7[\mu\text{m}]$, $d=3.6[\mu\text{m}]$ であるスペックルパターンによりポリスチレン粒子懸濁液を照明した場合の、粒子の10[s]間の移動経路をマッピングした結果である。なお、粒子の初期位置は正方領域の中心すなわち原点とその周囲の計9ヶ所とし、計算においては $k_B=1.38 \times 10^{-23}[\text{J/K}]$, $T=300[\text{K}]$, $n_m=1.334$, $n_p=1.59$, $\varepsilon_0=8.85 \times 10^{-12}[\text{F/m}]$, $R=200[\text{nm}]$, $\eta=0.001[\text{Pa}\cdot\text{s}]$ とした。また、白色雑音ベクトル $\mathbf{W}$ については、疑似正規乱数により近似した。Fig.1の結果から、(a)と(b)の両方において、9ヶ所の初期位置から出発した粒子が全て10[s]以内に正方領域内のスペックルのいずれかに捕捉されていることがわかる。一方、Figs.2(a), (b)は各々、粒子の初期位置座標が(-5,0), (0,0), (5,0) (単位は[μm])である場合について、Figs.1(a), (b)に示した移動経路から求めたMSDを移動時間に対してプロットした結果である。Figs.2(a), (b)のいずれにおいても、ある移動時間を経過した後MSDが一定値に収束しており、粒子がスペックルに捕捉されていることがわかる。これより、粒子の捕捉に到る時間は3ヶ所の初期位置座標の各々について、 $d=1.7[\mu\text{m}]$ の場合で0.02[s], 0.14[s], 0.07[s], また $d=3.6[\mu\text{m}]$ の場合で0.09[s], 0.23[s], 0.39[s]と得られた。

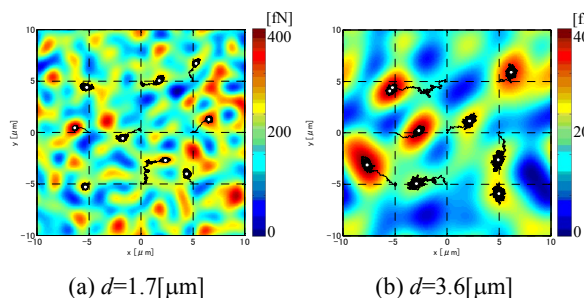


Fig.1 Examples of particle trajectories in the speckle pattern models with speckle diameter d of (a) 1.7 and (b) 3.6[μm], respectively.

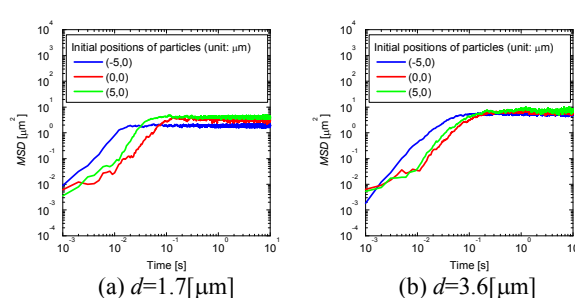


Fig.2 MSD versus time relations for particle trajectories corresponding to the three initial positions with speckle diameter d of (a) 1.7 and (b) 3.6[μm], respectively.

参考文献: 1) G. Volpe, G. Volpe, and S. Gigan, Sci. Rep. Vol. 4, 3936 (2014).

2)横井直倫, 相津佳永, 第62回応用物理学会春季学術講演会講演予稿集(CD-ROM), No.12a-P4-1 (2015).