

空間不均一な易動度を持つポリマーブレンドの相分離シミュレーション

(東亜合成) 飯田優羽、佐々木裕

【はじめに】 高分子ブレンド系の力学、光学応答はその混合状態に大きく影響される。そのため、高分子ブレンド系の混合状態を予測することは重要な課題である。静的な構造は密度汎関数理論により高い精度で予測することができるが、動的な構造は粘弾性相分離[1]など、単純な拡散では説明のつかない現象が報告されている。本研究では、このような動的構造を予測するモデルの一つとして、物質の拡散しやすさを表す易動度が局所的な体積分率に強く依存するモデルを提案する。

【モデル】 本研究では自由エネルギーモデルとして Flory-Huggins-de Gennes モデルを用い、動力学には時間依存 Ginzburg-Landau 方程式[2]を用いた。

$$\frac{\partial \phi_K(r,t)}{\partial t} = \nabla \cdot L_K(r) \left[\phi_K(r,t) \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi_K} \right]$$

ここで、 $L_K(r)$ は位置 r におけるポリマー種 K の易動度である。この易動度が体積分率に強く依存するような現象としてガラス化や絡み合いなどがある。例えばガラス化するような高分子は、ある程度低分子を加えるとガラス化しない(可塑化する)ことが知られている。そこで局所セグメント数 $N(r)$ があるセグメント数閾値 N_c を超えるか否かで、その場所における易動度 $L_K(r)$ を設定することとした。ただし、局所セグメント数は $N(r) \equiv \sum_K \phi_K(r) N_K$ 、セグメント数閾値に達した位置の易動度は $L_K(r) = \gamma L_K^0$ とし、 L_K^0 は閾値に達していないポリマー種 K の易動度、 γ は 1 より小さな定数である。

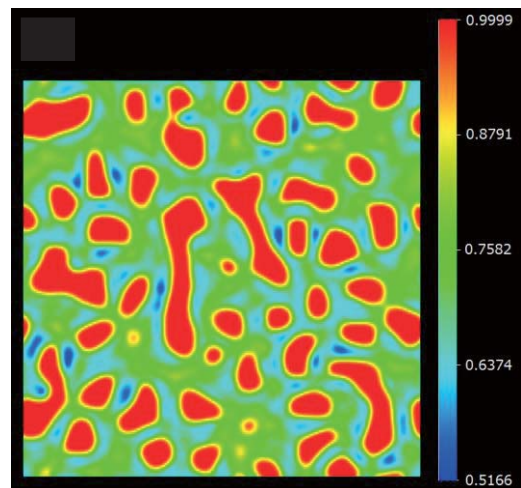
【結果と考察】 A,B,2 成分ポリマーブレンド系に対して上記モデルを適用した。以下に主要なパラメータを示す。

$$\bar{\phi}_A = 0.8, \bar{\phi}_B = 0.2, N_A = 10, N_B = 20, L_A^0 = L_B^0 = 1.0, \\ \chi_{AB} = 1.0, N_c = \sum_K \bar{\phi}_K N_K, \gamma = 1/1024. \text{ 初期状態は、}$$

一様混合状態からわずかにガウスノイズを与えて作成した。通常モデルであれば、少量成分が島を形成するが、このモデルでは粘弾性相分離同様に最初に大量成分が島を形成(図 1)し、十分な時間を経て通常相分離構造へと変化する。当日は、詳細な議論や流体力学効果の影響について発表する予定。

【参考文献】

- (1) Tanaka, H.; Araki, T. *Phys.Rev.Lett.* **1997**, *78*, 4966-4969.
- (2) 太田隆夫: “界面ダイナミクスの数理”, 日本評論社(1997)



【図 1】 本モデルで得られた相分離構造。色は A 成分の体積分率を表す。