

高分子網目における結合率と弾性率の関係性

(東大物性研) 西 健吾、野口 博司、柴山 充弘 (東大院工) 酒井 崇匡

【はじめに】

パーコレーション理論はゲル形成過程における網目構造のモデルとして用いられ、ここから予測されるゲル化過程に関する種々の物性値が現実とよく一致することが知られている。しかしながら、この理論では網目構造を解析的に扱う手段がないため、種々の物性の絶対値を求めることができず、コンピューターによる計算が欠点であった。そこで本研究では格子上のランダムな網目における弾性率を近似的に算出する一般的な手続きを示す。

【結果と考察】

格子において格子点間をランダムに結合率 p で結合させていくことを考える。正方格子の例を図 1 に示す。この結合率が低い場合系を覆う無限大クラスターは存在しない(図 1(a))が、結合率が高くなると無限大クラスターが出現し(図 1(b))、最後には全ての格子点間が結合する(図 1(d))。このような一連の過程をボンドパーコレーションと呼び、ゲル化過程における網目構造のモデルとして用いられる。本発表では、この網目の弾性率を求めるために、Kirkpatrick¹やFeng²、Sahimi³らの伝導網に関する議論を高分子網目へと適用する。その詳細については当日発表にて行う。

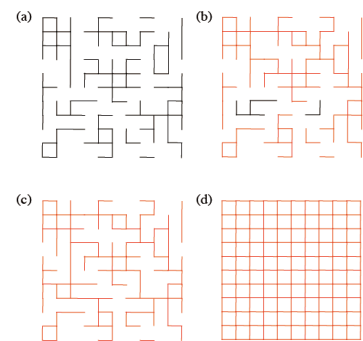


図 1. 各結合率における正方格子

【シミュレーション方法】

今回は結合確率 p で格子点間を WLC(Worm-Like-Chain) で結んだ三角格子と立方格子を作成した。格子状に WLC を並べた初期網目では力の分布が偏っている。そこで全体のエネルギーが小さくなるように、網目の構造を最もエネルギー的に安定な状態へと構造最適化させた(図 2)。変形に際しても歪みに伴って安定状態が変化するので構造最適化を行いながら変形を進めた。

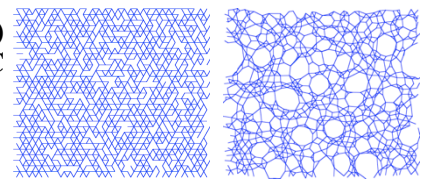


図 2 三角格子の構造最適化。左が最適化前、右が最適化後。

【結果と考察】

図 3 にダイヤモンド格子のシミュレーション結果と本理論の結果を示す。図 3 より全結合率領域において本理論とシミュレーション結果が一致していることがわかる。また inset にゲル化点付近の弾性率の挙動を図示したが、本理論では $G \sim |p - p_c|^{1.58}$ 、シミュレーションでは $G \sim |p - p_c|^{1.6}$ で振る舞っており、これは de Gennes らが予想している $G \sim |p - p_c|^{1.7-1.9}$ に十分近い。ここからシミュレーションと本理論が妥当であることがわかる。また本理論は 2D の正方格子に対しても全く同様に適用できることが確認できているが、その詳細については当日の発表にて言及する。

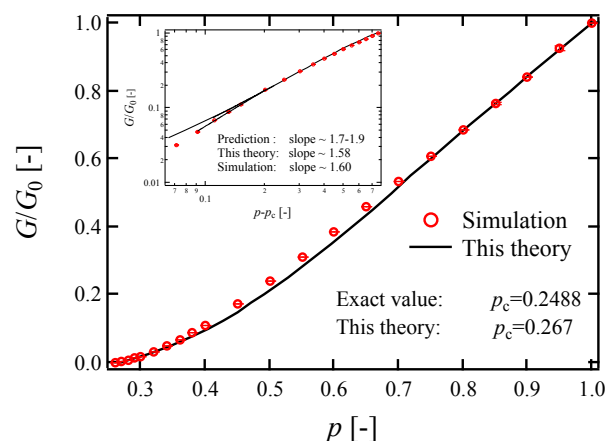


図 3 立方格子の初期弾性率

【参考文献】

- (1) Kirkpatrick, S., Rev. Mod. Phys., 1973, 45, (4), 574-588.
- (2) Feng, S.; Thorpe, M. F.; Garboczi, E., Phys. Rev. B, 1985, 31, (1), 276-280.
- (3) Sahimi, M.; Hughes, B. D.; Scriven, L. E.; Davis, H. T., Phys. Rev. B, 1983, 28, (1), 307-311.