

## 弱電解質拡散場中の高分子電解質ドメインのダイナミクス

名古屋市立大学 奥蘭 透、豊玉彰子、山中淳平

**【はじめに】** 電解質濃度の勾配がある系におけるコロイド粒子の運動については、既に多くの研究があるが、それらのほとんどは強電解質の系が仮定されている。また、貧溶媒系の高分子電解質のダイナミクスに関する研究も多くはない。このような電解質の系は複雑であり、古くから研究されているにもかかわらず、理論的にも、実験的にも不明な点が多い。

本研究では、弱電解質の濃度勾配下における高分子電解質の相分離ドメインのダイナミクスを記述するモデルを構築し、数値シミュレーションを行う。モデルは、高分子濃度、電解質濃度、および正、負のイオン濃度に関する時間発展方程式によって構成される。自由エネルギーには、フローリー・ハギンス型の自由エネルギー密度に加え、高分子と電解質の相互作用を取り入れる。これは、小貫ら (1,2) によって提案されている自由エネルギーとほぼ等価である。ただし、弱電解質の効果は時間発展方程式の反応項として取り入れる。さらに、静電相互作用および流体力学的相互作用も考慮する。

**【結果と考察】** 相分離ドメインが存在するような状況において、電解質のリザーバーに接触した系を設定し、2次元の系で数値シミュレーションを行った結果、電解質の一方向拡散に伴う相分離ドメインの移動が認められた。移動の方向は、相分離ダイナミクスによる拡散的な効果と流体力学的な効果の両方が関与しており、それらの効果のバランスによって決まっていることがわかった。

### 【参考文献】

- (1) A. Onuki and R. Okamoto, J. Phys. Chem. B **113**, 3988 (2009).
- (2) T. Araki and A. Onuki, J. Phys. Condens. Matter **21**, 424116 (2009).