



Title	高分子混合系における秩序形成
Author(s)	伊藤, 綾; 西浦, 廉政
Citation	電子科学研究, 4, 117-118
Issue Date	1997-02
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/24393
Type	departmental bulletin paper
File Information	4_P117-118.pdf



高分子混合系における秩序形成

情報数理研究分野 伊藤 綾, 西浦 廉政

高分子混合系の秩序形成とそのダイナミクスについての、計算機シミュレーションを中心とした研究の報告を行った。高分子混合系における相分離とそれに伴う秩序形成では、高分子ブレンドのマクロ相分離と高分子共重合体のミクロ相分離の二つが代表的な現象として知られ、調べられている。これらのほか、ホモポリマーと高分子共重合体の混合系などの構造形成とその過程について、研究結果の紹介を行った。

異なる種類の高分子を混ぜ合わせたものは、高温ではよく混ざり合っているが、温度を下げると、各成分は集まり相分離する。一次相転移では、系の温度を変えると、もとの状態は不安定、あるいは準安定となり、新しい相が形成され、それが時間と共に系全体に広がっていく。この新しい相がどのように形成されていくかを調べるのが、相転移のダイナミクスと秩序形成の問題である^[1]。高分子混合系の相分離はこの問題の典型的なものである。

また、最近、複雑液体^[2]という言葉が聞かれるようになった。

複雑液体とは、高分子、液晶、コロイド粒子、ミセルなどを含む液体で、10-1000 nm 程度の長さスケールの空間構造（メゾフェイズ）を形成しうるものを指す。複雑液体における問題としては、まず、どのような空間造が、どのように形成されるのか、そしてこのメゾ

スケールの空間的な秩序をもつために、外場（流動場、変形、電磁場等）に対して複雑な応答を示すのでこれを調べる、ということがある。高分子系はプラスチック、ゴムや繊維などの材料、動植物などの生体を構成するものとして多くの研究があるが、最近では、複雑液体の仲間という立場からも、その形成される空間構造や物性に興味を持たれている。

このような背景のもと、高分子の混合系の秩序形成

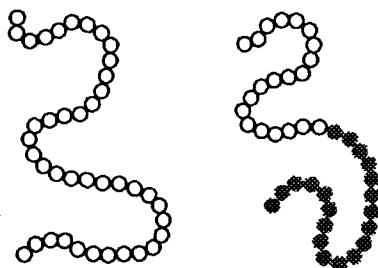


図1 左がホモポリマーで、同種のモノマーが重合してできている。右が高分子共重合体(ブロックコポリマー)。二種類の高分子鎖が繋がってできている。

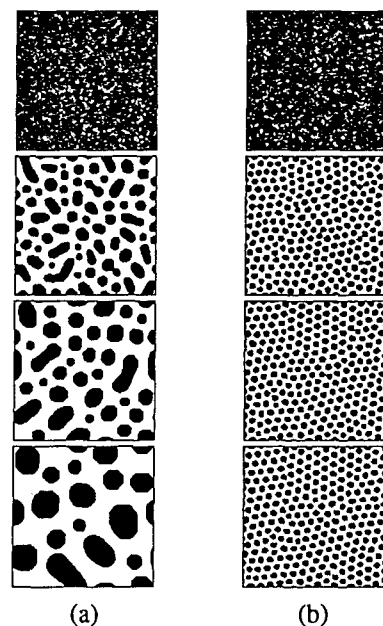


図2 マクロ相分離とミクロ相分離におけるドメイン形成の様子。(a)マクロ相分離、(b)ミクロ相分離。各、上から $t=0, 2000, 8000, 32000$ のときのドメインパターン。黒・白はそれぞれ高分子の各成分が集まったところを表す。

とそのダイナミクス, すなわち, どのような空間構造がどのように形成されるか, について, 計算機シミュレーションを中心とした研究を行った。

高分子系における相分離とそれに伴う秩序形成では, 二種類の非相溶性高分子 (ホモポリマー) の混合系にみられるマクロ相分離と高分子共重合体におけるマイクロ相分離の二つが, 代表的な現象として知られ, 調べられている。

ホモポリマーの混合系では, 急冷後, 各々の種類のホモポリマーが集まったドメインが形成され, これが時間と共に成長する。この様子は巨視的な現象として観察される。これに対し, 高分子共重合体では, 異なる種類の高分子鎖がつながっているため, 高分子鎖の

広がり程度の大きさのドメインが形成される。

これらの現象を数理的な立場で考えていくと, それぞれの相分離過程は, 系の状態を示す秩序変数 ϕ を導入すると, 次のようなモデルで表すことができる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 [-D \nabla^2 \phi + f(\phi)] \quad (1)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 [-D \nabla^2 \phi + f(\phi)] - (\phi - \bar{\phi}) \quad (2)$$

(1)式がマクロ相分離, (2)式がマイクロ相分離のモデルである。図2はこれらを数値計算したものである^[3]。

本講演では, これらのほか, ホモポリマーと高分子共重合体の混合系, 高分子共重合体の混合系などの構造形成とその過程について, 研究の結果を報告する。

【参考文献】

[1] D. J. Gunton, M. S. Miguel and P. S. Sahni, "Phase Transition and Critical Phenomena" 8, 267, Academic Press (1983).

[2] 固体物理 29, No.4, "複雑液体の物理" 特集号 (1994).

[3] Y. Oono and S. Puri, Phys. Rev. Lett. A58, 1542 (1988); M. Bahiana and Y. Oono, Phys. Rev. A41, 6763 (1990).