

高分子濃厚系の構造形成と粘弾性

(東北大・院理) 川勝 年洋、佐藤 勝彦、戸田 昌利、大矢 豊大
(日本ゼオン) 本田 隆、(東亜合成) 飯田 優羽、(お茶大・理) 出口 哲生
(Univ. Central Lancashire) A.V. Zvelindovsky、D.Q. Ly
(Manchester Univ.) X.F. Yuan、(Salerno Univ.) G. Milano

【はじめに】

高分子濃厚系における構造形成の動力学と粘弾性特性は、メソスケールのドメインの運動とミクロスケールの高分子鎖の動力学という異なるスケールの運動が共存する複雑な現象である。この問題を、粗視化分子モデルと流体力学や密度汎関数理論のような連続体モデルとを組み合わせることにより様々な方向からのモデル化と解析を行った。

我々が対象とする系は、ブロック共重合体のマイクロ相分離構造、絡み合い高分子系、紐状ミセル系、膜系などメソスケールの自己組織化構造である。これらの自己組織構造を種々の外場（流動場、電場、反応場、空間的拘束）の影響下に置いたときに生じる構造相転移や粘弾性特性を解明することのできる理論的な枠組みの構築が研究の目的である。高分子鎖の空間分布と配位のエントロピーを計算するための手法としては、自己無撞着場(SCF)理論と粗視化分子動力学法をメインに用いた。

【結果と考察】

空間的な拘束条件下では高分子鎖の構造やマイクロ相分離構造の動力学に特異な性質が現れる。我々は、ナノスケールの近接平板間に閉じ込められたブロック共重合体の穴あきラメラ構造に電場を掛けたときに生じる構造相転移の過程を動的 SCF 理論を用いてシミュレートし、相転移の動的経路を明らかにした。また、ソフトな空間拘束の例として、弾性板モデルで記述される球状ベシクル中に閉じ込められた高分子鎖の構造を SCF 理論を用いて計算し、高分子の配位の影響による膜の形状変化を示した[1]。

次に、ミクロな鎖の動力学とメソスケール構造の関係を調べるために、粗視化分子シミュレーションと連続場を結合させたハイブリッドシミュレーション法を開発した[2]。このようなハイブリッド手法を用いて、リン脂質分子の化学的な分子構造を取り入れた生体膜の粗視化シミュレーションや紐状ミセル系の粘弾性特性のシミュレーションに成功した。

さらに大規模な構造としては、粘弾性流動の現象論的な流体方程式を基礎として、ずり流動下で生じる不均一構造（シアバンド）に関する熱力学と類似の定式化を行い、シアバンド構造の安定性を明らかにした[3]。

【参考文献】

- (1) D.Q.Ly, T.Honda, T.Kawakatsu, and A.V.Zvelindovsky, *Soft Matter*, **5** (2009) 4814; Y.Oya, K.Sato and T.Kawakatsu, submitted.
- (2) G.Milano and T.Kawakatsu, *J. Chem. Phys.*, **130** (2009) 214106, *ibid.* in press; M.Toda and T.Kawakatsu, in preparation.
- (3) K.Sato, X.F.Yuan and T.Kawakatsu, *Eur. Phys. J. E*, **31** (2010) 135.