

K05

粗視化分子動力学法による高分子間界面の相溶性とレオロジー

(九大工) ○ (学) 畠添 拓実・(正) 名嘉山 祥也・(正) 梶原 稔尚*

【緒言】

高分子材料は軽くて丈夫だけでなく低コストで成型加工がしやすいという利点を有しており、現在さまざまな分野で大量に使用されるに至っている。さらに近年、付加価値の高い高機能化、高性能化への要求が高まっている。異種類の高分子を複合するポリマーブレンドは製品特性が調節でき、高機能、高性能高分子材料を生み出す技術として非常に有用である。しかし異種高分子間の界面の状態を知り界面を制御しなければ、通常は界面から破壊する。よって 高分子複合材料の高分子間界面の状態を知ることが重要である。

異種高分子間の相溶性は複合する高分子によって異なる。相溶性が異なると高分子間界面の厚さが変化し、力学応答も異なる。

本研究では、粗視化分子動力学計算により高分子界面のレオロジーと相溶性の関係を分子レベルで解明することを目的とする。

【分子モデル及びポテンシャル】

直鎖高分子を粗視化したビーズスプリングモデルを用いる。ビーズスプリングモデルとは、数モノマーユニットを一つのビーズと見なし、仮想的なバネで結合したものである。異種ポリマー間の相互作用として WCA ポテンシャルを用いる。相溶性は同種ビーズ間及び異種ビーズ間 WCA ポテンシャルのエネルギーの差に依存する。

【シミュレーション】

異種高分子間相互と分子鎖長が相溶性に与える影響を見るために、二成分メルト系の平衡状態における界面厚さを求めた。次に二成分積層メルトの力学応答を把握するために、単純せん断流下のせん断応力を求めた。せん断粘度 η_{yx} とせん断応力 P_{yx} はそれぞれ次式で表される[1]：

$$\eta_{yx} = \frac{P_{yx}}{\dot{\gamma}}, \quad P_{yx} = \frac{1}{V} \sum_n (m v_y v_x + r_y F_x).$$

ここで m, v, r, F はそれぞれビーズの質量、速度、位置、力である。せん断速度および粘度の非一様性と、分子鎖長および相溶性の関係を調べた。

【結果及び考察】

界面厚さと相溶性及び分子鎖長の関係を Fig.1 に示す。どの分子鎖長においても異種高分子間相互作用を大きくすると界面厚さは減少した。また、分子鎖長を長くすると界面厚さは減少した。これは界面における相互作用エネルギーが増加するため、エネルギーが小

さくなるように界面厚さが減少したと考えた。

一成分系のせん断粘度を Fig.2 に示す。どの分子鎖長においても shear-thinning が観測された。分子鎖長が長くなると shear-thinning がより小さい剪断速度で生じている。これは分子鎖長が長くなるほど緩和時間も長くなるので、分子鎖長が長いポリマーほど低剪断速度においても剪断による変形に緩和が追従できないということに起因している[2]。

【結言】

二成分系の平衡状態において異種高分子間相互作用と分子鎖長を変化させることにより、異種高分子間相互作用と分子鎖長が相溶性に与える影響を示した。また、二成分系の比較対象として一成分系での粘度を示した。

講演では二層系の界面の粘度と相溶性の関係について議論する。

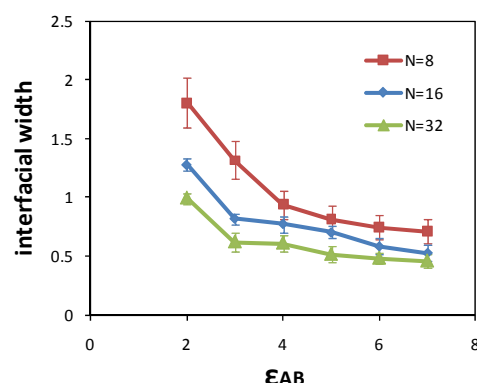


Fig.1. 界面厚さと相溶性及び分子鎖長の関係。

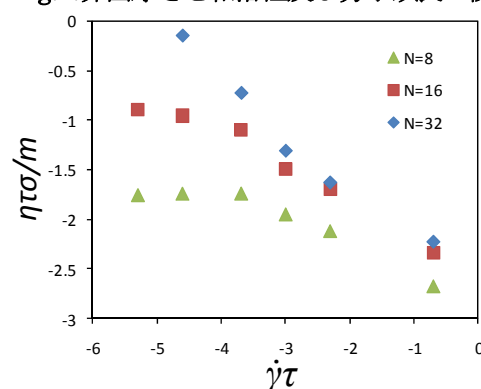


Fig.2. 一成分系のせん断粘度。

参考文献

- [1]例えば 分子シミュレーションー古典系から量子手法までー, 上田顯, 裳華房, 東京, (2003).
- [2]S. Barsky and M.O. Robbins, Phys. Rev. E **65**, 021808 (2002).

* TEL: 092-802-2746 FAX: 092-802-2796

E-mail: kajiwara@chem-eng.kyushu-u.ac.jp