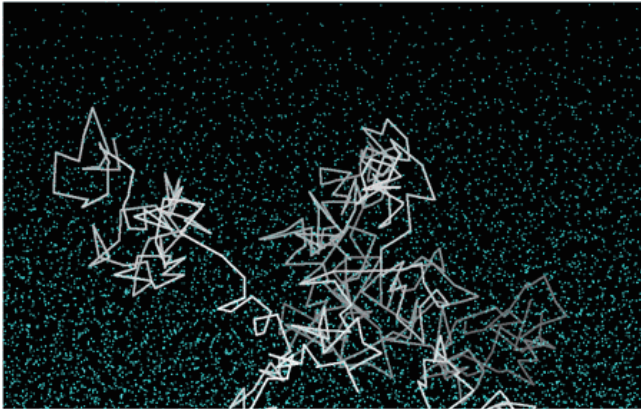


ポリマー溶液レオロジー

溶液中のポリマーの配座およびレオロジーを研究するために、ウェイン州立大学ではDPD法を応用しています。



溶液中のポリマーは、洗剤および食品から塗料および被覆剤までの膨大な数の現代製品の基礎原料になります。ブラウン運動、ならびに剪断および流れを併有する相分離は、複雑な構造および特性を有する材料を生じさせるので、上に挙げた各系には、熱力学的ならびに流体力学的な力が重要です。

単純な溶液中のポリマーであっても、分子量、溶媒の質および剪断方式などの因子に依存して、複雑な粘度対剪断速度「流れ曲線」を示すことがあります。それにもかかわらず、コポリマー（界面活性剤）、懸濁粒子および複数の溶媒を含むより複雑な系に進む前に、良好な妥当性検査演習としての役割を果たす理論的アプローチから、この特定の系については十分に知られています。

ウェイン州立大学では、Chuck Manke教授および大学院生のKai Zang氏は、散逸粒子力学（Dissipative Particle Dynamics：DPD）法についてのこの妥当性検証作業に着手しました。DPDは、溶媒を明示する粒子に基づく新しいシミュレーションです。そのため、DPDは、近似流体力学テンソルによってその効果をモデリングする必要がなく、ナビエ・ストークス流体力学を直接組み込みます。従って、粒子-粒子相互作用による熱力学（およびブラウン運動）も組み込まれます。ポリマー分子および懸濁粒子を含む複雑な材料を容易に取り扱うことができ、剪断の付加が簡単です。そのため物理化学者または化学技術者にとって非常に一般的なモデリングツールになることが見込まれています。

配座

シミュレーションでは、ポリマーの回転半径 R_g および末端相互間緩和時間 t_1 をポリマー分子量（または重合度 N ）の関数として測定し、スケーリング関係を検査しようと試みました。加えて、この研究では、溶媒の質の影響、ならびにポリマー球懸濁液を観察することを検討しました。

典型的な結果を次の表に示します。

ξ	ν	α	α/ν
-0.3	0.61	2.0	3.3
-0.2	0.58	2.0	3.3
-0.1	0.59	2.0	3.3
0.0	0.52 [2]	0.58 [1]	1.7 [2]
	1.8 [1]	3.2 [2]	3.1 [1]
0.05	0.40	1.3	3.1
0.1	0.30	0.9	3.0

Organization

Wayne State University

Products

BIOVIA Materials Studio DPD

溶媒の質は、良好な溶媒の-0.3から不良な溶媒の0.1まで変化するパラメータ ξ によって測定し、スケーリング指数は、 $R_g \sim (N - 1)^\nu$ と $\tau_1 \sim N^\alpha$ との関係によって決定します。

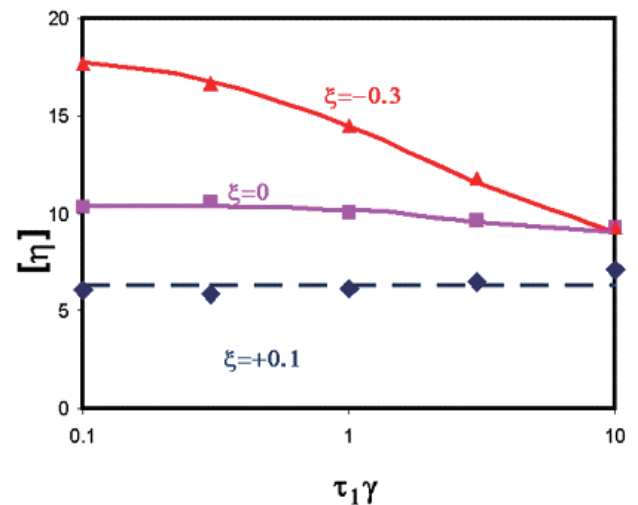
これらの結果から生じる主要因子は、二つの部分から成り立ちます。

1) 良好な溶媒の場合の指数が、許容され得るフローリー値0.59に近似することは、PDP法が排除体積の影響を正しく再現することの確認となる。

2) 指数が3に近似することは、ポリマー溶液に十分な流体力学的相互作用が存在することの確認となる。

レオロジー

異なる溶体量についての流れ曲線を下の図に示します。



特性ずれ揺変挙動は、溶媒の質、主として掛けられる剪断に対応するポリマー配座の能力、による影響を強く受けるように見えます。従って、 $x = 0.1$ における最も破壊されたポリマーは、本質的に剛体球であり、その粘度は一定です。

参考文献

1. K. Zang and C.W. Manke, to appear in Molecular Simulation.