

34. DPD シミュレーションによる動的ネットワークの緩和挙動の検討

東亜合成 ° 佐々木裕

近大理工 荒井規允

Tel: 052-611-9923, e-mail: hiroshi_sasaki@mail.toagosei.co.jp

1 はじめに

近年、ソフトマター研究 [1] の深化に伴い、ソフトマターの内部自由度の高さを利用した階層的な構造設計の検討が進んでおり [2]、ソフトマターの特徴である柔らかさに加えて各種の新規機能を付加した材料の開発が活発に行われている。力学的な機能を検討する場合には、系全体の流動を抑制した固体的な特性が要求され、ネットワーク構造が必要となる場合が多い。これらのネットワークポリマーの材料設計においては、フィラー同士の相互作用のような比較的大きなスケールの構造の寄与も大きい [3] が、ネットワーク構造の均一性もマクロな特性に大きな影響を与え [4]、単純な化学架橋で形成されるネットワーク構造には空間的な不均一（架橋密度揺らぎ）が生じてしまうことが知られている。構造の明確なネットワークの形成方法の一つとして、水素結合、疎水性相互作用、静電相互作用などの、共有結合よりも乖離障壁の低い「繋ぎ替え可能な非共有結合」を介して自己組織化した超分子ネットワークが報告されている [5, 6]。

超分子ネットワークの特徴的な構造をモデル化することを考えよう。このとき、相互作用する化学種をセグメントとして粗視化し、それらのセグメント間に適正な相互作用パラメタ（引力あるいは斥力を表現）を設定することで、偏析したクラスタを解したネットワークモデルを得ることができる。このようなモデルとして、もっとも簡単なものが、ポリマー鎖の両末端に偏析するセグメントを配したテレケリックポリマーである。

我々は、粗視化した超分子ネットワークのモデルとしてテレケリックポリマーを採用し、動的なネットワークの緩和挙動に注目して検討を行った。ここでは、応力の自己相関から求めた応力緩和関数 $G(t)$ から算出した緩和時間と、末端ビーズ間の End to End ベクトルの自己相関からの緩和時間とを比較した結果について報告を行う。

2 シミュレーション

本研究では散逸粒子動力学 (DPD) 法 [7] を使用した粗視化シミュレーションを行った。DPD 法では複数の粒子を一つの粒子として粗視化して扱い、各粒子間に働く力は下式で与えられる。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R) \quad (1)$$

$\mathbf{F}_{ij}^C, \mathbf{F}_{ij}^D, \mathbf{F}_{ij}^R$ はそれぞれ i 粒子と j 粒子の間に働く保存力、散逸力、ランダム力を表す。

今回、テレケリックポリマーの計算モデルとして、20 個のビーズから成る A1B18A1 トリブロックポリマーを採用した。計算条件は、密度 $\rho = 3$ とし、A1B18A1 トリブロックポリマー 1200 本、総ビーズ数は 24,000 個とした。

以下の式で表される保存力 \mathbf{F}_{ij}^C に含まれる相互作用パラメタ a_{ij} によって、粒子 i と j 間に働く斥力の大きさが相対位置ベクトル $\mathbf{r}_{ij}(= \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ に依存して決定される。

$$\mathbf{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij} w^C(|\mathbf{r}_{ij}|) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} & (|\mathbf{r}_{ij}| < r_c) \\ 0 & (|\mathbf{r}_{ij}| \geq r_c) \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 $w^C(|\mathbf{r}_{ij}|)$ は粒子間距離に応じて作用を減少させる重み関数であり、 r_c はカットオフ距離を表す。

密度 $\rho = 3$ の場合は、非圧縮条件を満たすために、同種ビーズ間の a_{ii} は 25 と設定される。

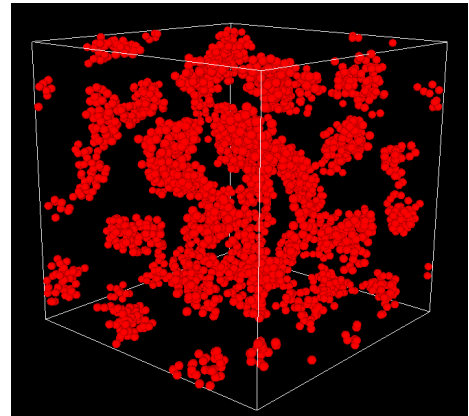


Fig.1 Snapshot of the Model Network using A1B18A1 Triblock Polymer ($a_{AB} = 80$).

a_{AB}	τ_{e2e}	τ_{gt}
25	48	25
40	68	30
50	170	63
60	650	250
70	2200	910
80	8200	2500