

i_Rheo について

佐々木 裕

東亜合成株式会社

October 8, 2021

基本となる式

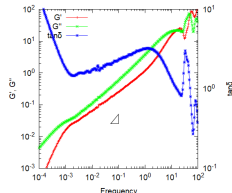
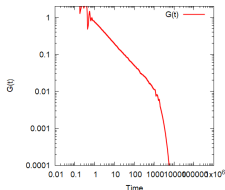
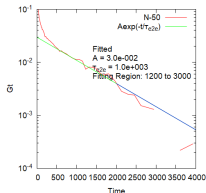
$$G^*(\omega) = G(0) + \{1 - \exp(-i\omega t_1)\} \frac{(G(1) - G(0))}{t_1} \frac{1}{i\omega} + \frac{\dot{G}_\infty \exp(-i\omega t_N)}{i\omega} \\ + \sum_{k=2}^N \left(\frac{G(k) - G(k-1)}{t_k - t_{k-1}} \right) \frac{\{\exp(-i\omega t_{k-1}) - \exp(-i\omega t_k)\}}{i\omega}$$

- 上式において、
 - 第3項は、大抵の場合に 0
 - ネットワークポリマーにおいては、弾性率は定数に収束
- 下式に従い、動的粘弾性スペクトルへ

$$G^*(\omega) = G'(\omega) + iG''(\omega)$$

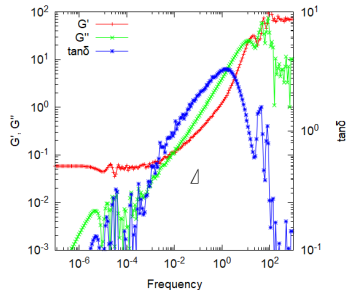
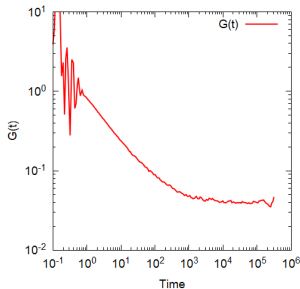
ホモポリマーの結果

- N50, M200 の KG ポリマーを平衡化
- Green-Kubo により、応力緩和関数 $G(t)$ を得る。
- 長時間側を外挿
- 離散データを線形近似で内挿し、i_Rheo で処理
- 動的粘弾性スペクトルへ



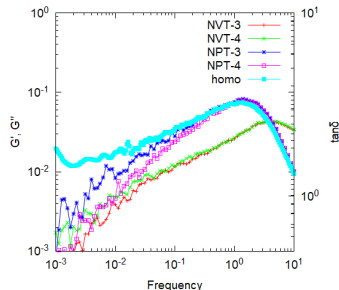
ネットワークポリマーの平衡状態

- N48 で 4 分岐のネットワーク (KG ポリマー)
- Green-Kubo により、応力緩和関数 $G(t)$ を得る。
- 長時間側を外挿はしていない
- 離散データを線形近似で内挿し、i_Rheo で処理
- 動的粘弾性スペクトルへ



緩和状態の比較

- 初期状態の異なるネットワークをホモポリマーと、 $\tan \delta$ により緩和状態を比較
 - NPT での初期化により絡み合いを抑制したほうがホモポリマーに類似
 - NVT の設定条件が良くないと思われ、再度検討予定。
- 3 分岐のほうが、長時間緩和を持っていた。



ステップ変形での応力緩和

- $\lambda = 2$ までステップ変形、そこから応力緩和
- ステップ変形も含めて、離散データ取得
- 長時間側を外挿はしていない
- 離散データを線形近似で内挿し、i_Rheo で処理
- 動的粘弾性スペクトルへ

