

ミクロ相分離構造の構造転移に現れる中間構造

広島大学大学院理学研究科 山田 耕太郎、野々村 真規子
京都大学基礎物理学研究所 太田 隆夫

1 はじめに

AB型ブロック共重合体では、Lamellar、Hexagonal、BCC、Gyroidといったようなミクロ相分離構造が安定に存在することが知られている。これらの構造についてはさまざまな研究により、実験的にも理論的にもかなりのことが理解されてきている。しかし、ある構造から他の構造への転移がどのように進むのかということについてはいくつかの研究が行われているものの、まだよく分かっていないことが多い。そこで、われわれは数値シミュレーションによってこれらの構造間転移がどのようにおこるのかを調べた [1]。その結果、Perforated Layer 構造と Fddd の対称性を持つ構造が中間構造として現れるという結果が得られた。ここでは、この2つの中間構造について述べる。

2 数値シミュレーションについて

AB型ブロック共重合体のキネティクスは次の方程式に従うことが知られている [2, 3]。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla^2 [-\nabla^2 \phi - \tau \phi + g \phi^3] - \alpha (\phi - \bar{\phi}) \quad (1)$$

ここで、 ϕ は A と B の体積分率の差であり、 $\bar{\phi}$ は ϕ の空間平均、 τ 、 g 、 α は正の定数パラメータである。われわれはこの方程式を直接数値的に解くのではなく、two-mode approximation という方法を用いて ϕ をこれまでに知られている Lamellar や Gyroid、Hexagonal、BCC といった構造を表すために必要なだけのフーリエモードに展開し、それらの振幅に対する時間発展方程式を導いて、それらを数値的に解くという方法を用いた。

3 得られた中間構造

上述の two-mode approximation という方法を用いることにより、それぞれのミクロ相分離構造間の転移の数値シミュレーションを行うことができた。その中で、Perforated Layer 構造を Fddd の対称性を持つ構造の2つの構造が中間構造として得られた。これらの構造を図1に示しておく。図1において、左側の図が Perforated layer 構造であり右側の図が Fddd 構造である。

まず Perforated layer 構造であるが、この構造は Lamellar から Hexagonal への構造間転移のときに見られ、Qiらによる数値シミュレーション [4] においても同様に現れている。また、この構造は振幅方程式の平衡解として得られる構造ではない。この Perforated layer 構造は、Lamellar の minority layer に穴が開いた構造をとっているが、この穴の位置は Lamellar 面に垂直方向から

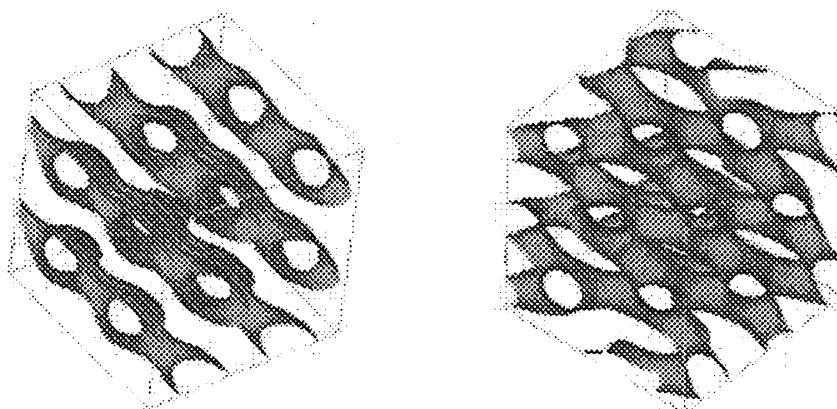


図 1: (左) Perforated layer 構造 (右) Fddd 構造

見たとき、歪んだような六角形になっている。また、2周期ごとに同じ位置に穴がくることも分かっている。

次に Fddd 構造であるが、この構造は上述の Perforated layer 構造とは異なり、振幅方程式を解いたときに平衡解として得られる構造の1つである。実験的には、AB型ブロック共重合体で見られたという例は今のところないが、ABC型ブロック共重合体では、PI-PS-PEOのブロック共重合体で安定に存在することが発見されている [5]。また、(1)式を直接数値的に解いたときにもこの構造が見られている [6]。

また、ごく最近、われわれはこれら中間構造以外の構造もみつけている。それについては当日発表する。

参考文献

- [1] Yamada, K.; Nonomura, M.; Ohta, T. *Macromolecules*, To be published
- [2] Ohta, T.; Kawasaki, K. *Macromolecules* **1986**, *19*, 2621
- [3] Bahiana, M.; Oono, Y. *Phys. Rev. A* **1990**, *41*, 6763
- [4] Qi, S.; Wang, Z. G. *Phys. Rev. E* **1997**, *55*, 1682
- [5] Bailey, T. S.; Hardy, C. M.; Epps, T. H., III; Bates, F. S. *Macromolecules* **2002**, *35*, 7007
- [6] Nonomura, M.; Ohta, T. *J. Phys.: Condens. Matter* **2001**, *13*, 9089