

ギャップ, Geometry のデータをほぼ無理なく説明することができる。

このように VCDWモデルは, trigonal Se, Teの格子変形とバンド構造の重要な特徴を, よく再現していることがわかった。

## 5. ポリプロピレンのノジュール構造

小 川 哲 也

ガラスから結晶化させたポリプロピレンの薄膜を電子顕微鏡で観察すると, 直径数十~数百 Åの粒状構造が見られた。このような構造は他の高分子 (PE, PET, PMMA等) でも見られノジュール構造と呼ばれているが, 現在のところ, その実体については, まだ充分研究されていない。そこで我々は, このポリプロピレンのノジュールの大きさの分布を調べ, 下のようなノジュールの発生, 成長のモデルと比べた。

すなわち, ガラス転移点において, ランダムな場所に同時に発生した結晶核が成長し, 隣り合うもの同士がぶつかり合う。この時, 1つのノジュールは, その核と周りのノジュールの核とを結ぶ線分の垂直二等分線で囲まれた多角形のうち最小のもの (ボロノイ多角形) となる。次に温度が上がると, 小さいものは, 熱的に不安定になって融けて, 周りのより大きいノジュールに食いつぶされる。この時, 新しい境界は, へこみを持つようなノジュール (不安定である。) を作らないとすれば, ノジュールは, ある大きさ ( $D_c$ ) 以下のボロノイ多角形を作らないよう核の配置に制限をつけた場合のボロノイ多角形となるが,  $D_c$ がその時のボロノイ多角形の平均直径に比べ充分小さければ, その大きさの分布は, 核の配置をランダムにした場合のそれで近似できる。そこで核の配置をランダムとしてコンピューターシミュレーションをした結果と, 実際のノジュールの大きさの分布を比べたものが右図で, 両者はよく一致しており, 上のモデルと矛盾しない結果が得られた。

