

マイクロエマルジョンの相変化を記述する動力学モデル

九州共立大学 工学部 長井 達三¹佐賀医科大学 末崎 幸生²

1 序論

3成分系（例えば、界面活性剤/水/油）マイクロエマルジョンは多彩な相を形成する。この系では濃度、温度等の制御変数に依存して、ドロプレット相、バイコンティニユアス相、ラメラ相、ヘキサゴナル相が観測されている。SDOleS/W/n-decane系において、ドロプレット相からラメラ相へのゆっくりした相変化がX線小角散乱の実験で観測された[1]。

このような系の動的モデルとしてTDGL型モデルがある[2]。これは系を、2成分液体の濃度場、界面活性剤分子の密度及びディレクタ場で記述し、それらの従う運動方程式を導出した。このモデルは静的極限でHelfrichモデルに一致し、流体力学的相互作用も含む十分一般性を備えた動的モデルであるが、その具体的取り扱いはずしも容易でない。本研究の目的は、よりシンプルなモデルでこの系の多彩な相変化を記述することである。

2 モデル

2次元の界面活性剤/水(W)/油(O)系を考える。界面を微小部分に分割し各微小部分を代表点で表す。各代表点は属性（位置 $\mathbf{r}_i$ 、ディレクタ $\hat{\mathbf{p}}_i$ 、曲率 c_i 、サイズ a_i ）を持つものとする。即ち界面を折れ線で表す。代表点は熱力学的力で駆動され、完全に散逸的な運動方程式に従うものと仮定する。そうすると、代表点 i の速度 $\mathbf{v}_i$ は次の連立方程式の解として得られる：

$$\sum_{\nu=\pm 1} \eta_{i+\nu} \bullet (\mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \mathbf{v}_{i+\nu}) = -\nabla_i (F_{ben} + F_{int} + F_{con}) \quad (1)$$

$$F_{ben} = \frac{\kappa}{2} \sum_i a_i (c_i - c_0)^2 \quad (2)$$

$$F_{int} = \frac{\lambda^2}{2} \sum_{ij} a_i a_j u_{ij} \quad (3)$$

$$F_{con} = \rho_B \sum_{\alpha} (L_{\alpha} - L_{\alpha}^0)^2 + \rho_W \sum_{\alpha} (S_{\alpha} - S_{\alpha}^0)^2 \quad (4)$$

$$\eta_{i+\nu} = \frac{\eta_0}{3} r_{i+\nu} \mathbf{n}_{i+\nu} \mathbf{n}_{i+\nu} \quad (5)$$

ここで $i+\nu$ ($\nu = \pm 1$) は代表点 i の最隣接代表点を表し、 $\mathbf{n}_{i+\nu}$ は界面 $\langle i+\nu, i \rangle$ の単位法線ベクトルである。

¹E-mail: tnagai@kyukyo-u.ac.jp

²E-mail: suezaki@post.saga-med.ac.jp

式(2)は曲げ弾性エネルギー (κ 弾性定数) を表す。 a_i 及び c_i は代表点 i がもつサイズと曲率で次式により定義する: $a_i = \frac{1}{2} \sum_{\nu} r_{i+\nu}$, $c_i = \frac{2}{r_{i+1i-1}} [\hat{\mathbf{k}} \bullet (\hat{\mathbf{r}}_{i+1i} \times \hat{\mathbf{r}}_{i-1i})]$ 。 c_i は i と $i \pm 1$ がつくる三角形の外接円の曲率、 c_0 は自発曲率である。

式(3)は代表点間の相互作用を表す。 λ は界面活性剤分子の線密度、 u_{ij} は界面活性剤分子の極性を考慮して次式を仮定する: $u_{ij} = u_0(\hat{\mathbf{p}}_i \bullet \hat{\mathbf{p}}_j) e^{-r_{ij}/\xi}$ 。ここで、 ξ は相互作用の到達距離、 $\hat{\mathbf{p}}_i$ は、その点 $\mathbf{r}_i$ における曲率円の中心 (W 領域) を向く単位ベクトルである。

式(4)は W 領域 α の境界長 L_α と面積 S_α の保存を表す。それらの平衡値を L_α^0 及び S_α^0 とした。係数 ρ_B と ρ_W は正定数である。

式(5)は摩擦テンソル (η_0 摩擦係数) である。

更に、トポロジーの変化を与える「つなぎ替え過程」を次のように導入する。2つの代表点が微小距離 b だけ近づくと図1に示す合体と分裂を起こすものとする。

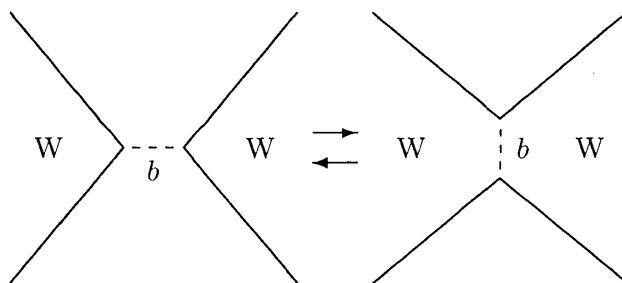


図 1: W 領域の合体と分裂

3 まとめ

3成分マイクロエマルジョンの相変化を記述する2次元動力学モデルを提出した。界面を離散化して代表点で表し、代表点は属性(座標、サイズ、曲率、ディレクタ)を持つとした。代表点間の相互作用は界面の極性を考慮した指数関数型を採用した。代表点は熱力学的な力と摩擦力の釣り合いを表す、散逸方程式に従って運動するものとした。更に、界面の接触による領域の合体と分裂過程を取り入れた。研究会では予備的なシミュレーションの結果を報告する。

参考文献

- [1] 一柳尚毅, 名古屋工業大学大学院 修士論文 (岡林研究室)(1999).
- [2] K. Kawasaki and T. Kawakatsu, Physica **A164**(1990), 549.