

高分子溶液の相分離に関する大規模なシミュレーション

Large-Scale Simulations for Polymer Phase Separation

京都大学 学際融合教育研究推進センター 吉元 健治

研究成果概要

昨年度に引き続き、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、下排水処理に用いられる高分子分離膜の形成シミュレーションに取り組んだ。本年度は、対象系を二次元から三次元に拡張し、三成分(高分子、溶媒、水)の相分離シミュレーションを行った。

シミュレーション結果の一例として、三次元バルク系(128×128×128 グリッド)から得られる相分離構造を Fig. 1 に示す。高分子と溶媒と水の初期組成は、Fig. 1(a)に示すようにスピノーダル領域内に設定した。時間経過とともに相分離は進行し、高分子濃厚相と水濃厚相のドメインが系内に形成されていく様子が確認された。Fig. 1(b-d) に、相分離が十分に進んだ時点での高分子ドメイン(赤橙色)の空間分布を表す。高分子のせん断弾性率($\tilde{G}_0$)が比較的小さい場合、複数の高分子ドメインが界面張力によって大きく変形し、一つのドメインを合一した[Fig. 1(b)]。一方、 $\tilde{G}_0$ が大きくなると、より微細で複雑に連結した高分子ドメインが形成された[Fig. 1(c), (d)]。これは、界面張力により高分子ドメインが変形する際、 $\tilde{G}_0$ が大きいほど弾性応力が増加し、その変形が抑制されるためである。

今後は、高分子分離膜の代表的な製法である NIPS(非溶媒誘起相分離)法を想定した系で三次元シミュレーションを行い、詳細な膜構造の形成メカニズムの解明する予定である。

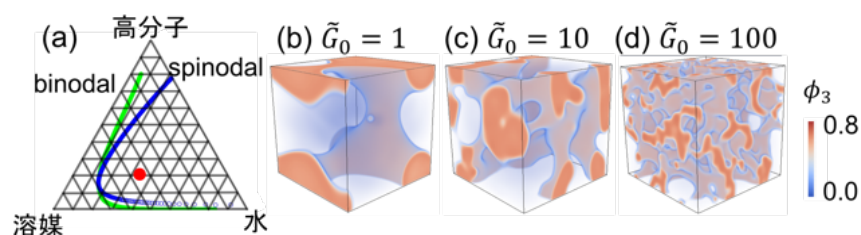


Fig. 1 高分子/溶媒/水の三成分混合溶液のバルク系での三次元シミュレーション: (a) 三角相図上での初期組成、(b-d) 相分離した高分子ドメインのモルフォロジ。

発表論文:なし(現在執筆中)