

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

下排水処理に用いられる高分子分離膜の内部には微細な孔(穴)が多数存在し、そのサイズや形状等で分離性能が決定する。我々の研究目的は、分離膜内の細孔構造をシミュレーションで予測することである。我々は高分子溶液の粘弾性を考慮した新しい相分離モデルを開発し、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て分離膜の形成シミュレーションに取り組んでいる。

その結果の一例を Fig.1, 2 に示す。Fig.1 は高分子、溶媒、水の三成分が一様混合状態からスピノーダル分解を経て、相分離した際の計算結果である。従来モデル同様に高分子溶液の粘性のみを考慮した Fig.1(a)では、相分離後円形のドメインが形成された。これは界面張力が支配的なためである。一方で我々の提案する粘弾性を考慮した Fig.1(b)においては、高分子鎖の絡み合いにより弾性が生じるため、界面張力による変形が起こり難くなり、高分子のネットワーク構造が形成された。また、Fig.2 は NIPS(非溶媒誘起相分離)法を想定し、初期状態として高分子溶液と水との接触を与えた際の相分離結果である。高分子溶液の粘性のみを考慮した Fig.2(a)においては、界面張力の影響を受けて円形の細孔が形成された。一方で粘弾性を考慮した Fig.2(b)においては、弾性の影響により細孔が円形になるのを抑制された。その結果、実際の膜に見られるネットワーク構造が形成されやすくなった。

今後は NIPS 法における詳細な膜構造の形成メカニズムの解明に向けて、より詳細に検討を進めるとともに、二次元から三次元シミュレーションへの拡張を進める予定である。

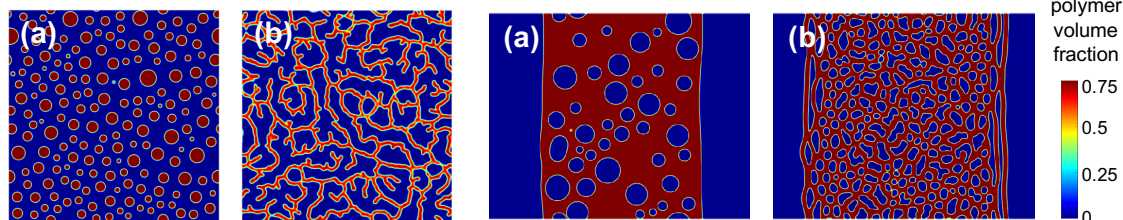


Fig.1 Phase separation in Bulk conditions:
(a) viscous and (b) viscoelastic solution

Fig.2 Phase separation in NIPS:
(a) viscous and (b) viscoelastic solution

発表論文:なし