

水・界面活性剤混合系におけるメソスコピック構造

(阿南高専¹・首都大院理工²・名市大薬³) O山田耕太郎¹・安野
恵実子¹・川端庸平²・奥蘭 透³・加藤 直²

界面活性剤のような両親媒性分子と水との混合系では、ミセル構造やラメラ構造などをはじめ、様々なメソスコピック構造が現れることが知られており、最近では実験だけでなくD PDのような数値シミュレーションによる研究も増えてきている。しかしながら、いまだ理論研究としては未解明な部分も多いのも事実である。そこで我々は、密度汎関数法を用いることにより、水・界面活性剤混合系におけるメソスコピック構造について研究を進めてきた。

本研究では、(1) A分子とB分子からなる両親媒性分子が溶媒分子(C分子)よりもかなり長く、(2) A分子とB分子の親和性はB分子とC分子の親和性よりもはるかに高い、という条件のもとで、数値計算を行った。まずはこの系でよく見られる5つのメソスコピック構造(ラメラ、ヘキサゴナルシリンダー、キュービック(ジャイロイド)、BCC、FCC)の自由エネルギーを比較することにより、界面活性剤濃度と相互作用パラメータを変化させた際の安定性を調べた。その結果を図1(a)に示す。この相図は実験で得られている相図ともほぼ合っていると考えられる。また、実験ではこれらの周期構造だけではなく、ミセルのような非周期構造が現れることもよく知られているが、今回用いたモデルでは図1(b)に示しているような非周期構造も存在することを数値的に確認している。

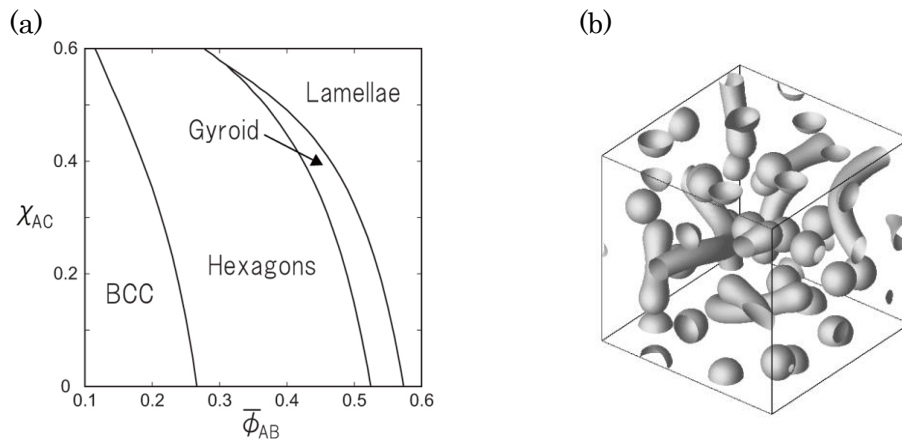


Fig. 1 (a) Phase diagram obtained by numerical calculation, (b) Snapshot of rodlike micelles.

Mesoscopic Simulation of Phase Behaviors and Structures in an Amphiphile/Solvent System

K. YAMADA¹, E. YASUNO¹, Y. KAWABATA², T. OKUZONO³, T. Kato² (Anan National College of Technology¹, Tokyo Metropolitan Univ.², Nagoya City Univ.³, kyamada@anan-nct.ac.jp)

We have performed a three-dimensional simulation of mesoscopic structures in a mixture of AB diblock copolymer and C solvent by employing the density functional theory under the conditions that (1) the size of the AB is much larger than C and (2) the affinity between A and B is much larger than the affinity between B and C. First, we have calculated the free energy of well-known five periodic structures. In addition to these periodic structures, it has been shown that non-periodic structures such as spherical and rodlike micelles can be obtained although they might be metastable phase.