

論文の内容の要旨

論文題目 Study of Particle Distributions in Long Range Electromagnetic Interaction

(長距離電磁相互作用下の粒子分布の研究)

氏名 關 秀嗣

高分子ブラシは溶液中のコロイド粒子の凝集・沈殿を防ぐ効果がある。電荷を持った高分子電解質ブラシは、中性の場合と比べコロイドの凝集を防ぐのに、より有効な手段であり、純理論的な興味と共に応用への興味から大変注目されている。

本論文では、高分子電解質の自己無撞着場理論を、塩が加わっていない場合に、平面へ植え付けられた高分子電解質ブラシへ適用した。研究の目的は、ブラシの厚さのスケーリング則を調べ、この系に対して以前から知られているスケーリング理論からの予測と比較すること、対イオンおよびモノマーの電荷分布から対イオン層の厚さおよび高分子電解質ブラシの持つ有効電荷を調べること、および、植付け平面近傍でのモノマーおよび対イオンの分布を植付け平面の効果境界条件に取り入れることで、正確に調べることであり、自己無撞着場方程式系を数値的に解くことで以下の結果を得た。

ブラシの厚さのスケーリング則を調べ、電荷の割合が大きい場合、スケーリング理論が予測する osmotic regime に対応する結果を得た。また、ブラシの厚さがモノマーの植付け密度に弱く依存することを確かめた。この結果は近年スケーリング理論で研究されている nonlinear osmotic regime の結果と定性的に一致する。また、電荷の割合が大きい場合、ブラシの厚さ h が電荷の割合 f に対して、 $h \propto f^\alpha$, $\alpha \simeq 0.4$ と依存することを確かめた。この結果は Zhulina らのスケーリング指数 $\alpha = 2/5$ に近い。電荷の割合が大きい場合、高分子鎖の弾性エネルギーによる復元力を Pincus の非線形な復元力によって評価しなければならない程度まで高分子鎖が大きく伸張するという結論を得た。

次に、高分子電解質ブラシの全電荷分布を調べることで、植付け平面近傍に電気二重層が出現することを見出した。また、電荷の割合を増加させることで、この電気二重層の電荷量が増大し、モノマーの密度が最大になる位置が植付け平面近傍に引き寄せられることを見出した。

最後に、対イオンの分布を Gouy-Chapman 解でフィットすることにより、植付け平面から十分遠方の電荷分布を帯電した仮想的な平面が持つ電荷分布で置き換えて、仮想平面の位置と電荷密度を評価した。これらの値から、対イオンによる遮蔽効果を考慮した上で、高分子電解質ブラシが実質的に持つことができる有効電荷量を見積もった。その結果、この有効電荷には上限値が存在し、電荷の割合が一定以上になると、電荷の割合によらずほとんど一定になることを見出した。単一の高分子電解質鎖が一定以上の電荷密度を持とうとすると、対イオン凝縮が起きてそれを妨げるのと同様に、高分子電解質ブラシの場合にも、電荷の割合が一定以上になると対イオンが高分子鎖周辺に凝縮し、高分子鎖の有効電荷の値がこの上限値以上になることを妨げると解釈した。高分子電解質ブラシの有効電荷は、二つのブラシの相互作用の強さを特徴付ける。有効電荷に上限値があることから、高分子電解質ブラシ間の静電反発力の強さには制限があり、高分子電解質ブラシが持つコロイド粒子を凝集から安定化させる効果は制限されるという結論を得た。