

外場下におけるゲル化による異方性ネットワーク構造のモンテカルロシミュレーション

徳島大工

森篤史、湯浅元明、増内孝祐、井上哲夫

Monte Carlo simulation of anisotropic network in gelation under external field

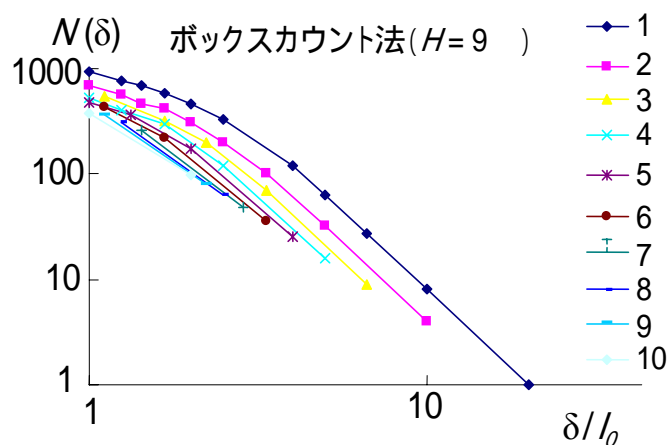
Fac. Eng., Univ. Tokushima

A. Mori, M. Yuasa, T. Kaito, and T. Inoue

磁場等の存在下でゲル化させるとゲルは異方性を有する。我々は、異方性を制御したゲルを用いた結晶成長を進行中である。特にナノ結晶粒育成に有効で、無磁場下で育成したゲルを用いた場合はナノ結晶粒は配向しないが、磁場中で育成したゲルを用いるとナノ結晶粒が配向することを見出している。

文献1)のモデルに外場との相互作用を導入したものを用いて、外場がネットワーク構造に及ぼす影響を調べる。粒子間の相互作用は、ラジカルとアクティブなサイト間にはレナードジョーンズ(LJ)型、ボンドは調和バネ、それ以外の分子間には -12 乗の斥力である。ボンドの相互作用には、ボンド開裂エネルギーを加味した。外場との相互作用は、外場の向きとボンドの向きのなす角 θ の余弦の二乗に外場の大きさ H を乗じ、負号をつけたもの $(-H \cos^2 \theta)$ を用いた。

前回は、スナップショットに基づいて、ネットワークの異方性および網目の大きさに対する外場の影響について議論した。図は、ボックスの形を異方的にしたボックスカウンティング法の結果である。ボックスは外場方向(縦)に長い直方体を用いたが、縦横比を図中に示してある。 δ は横方向のボックスのサイズ、 l_0 はLJポテンシャルの最小を与える距離で、最小値が $-\varepsilon$ である。結果は、ネットワークの異方性を反映している。



1) M. Nosaka, M. Takasu, and K. Katoh, J. Chem. Phys. **115** (2001) 11333.