

# 高分子溶融体における壁面スリップ現象のシミュレーションによる解析 絡み合いの影響

[背景]  
高分子溶融の高速流動下での不安定流動の発生

↓  
スリップもその要因?

↓  
非絡み合い系では壁面付近で分子の回転運動が発生

↓  
スリップ現象の絡み合い(重合度)依存性は?

[計算方法] 運動方程式(ランジュバン方程式)

$$m\ddot{r}_i = - \frac{U_{ij}}{\text{分子の相互作用}} - \frac{(\dot{r}_i - v_a(r_i))}{\text{摩擦による影響}} + \frac{W_i(t)}{\text{ランダム力}}$$

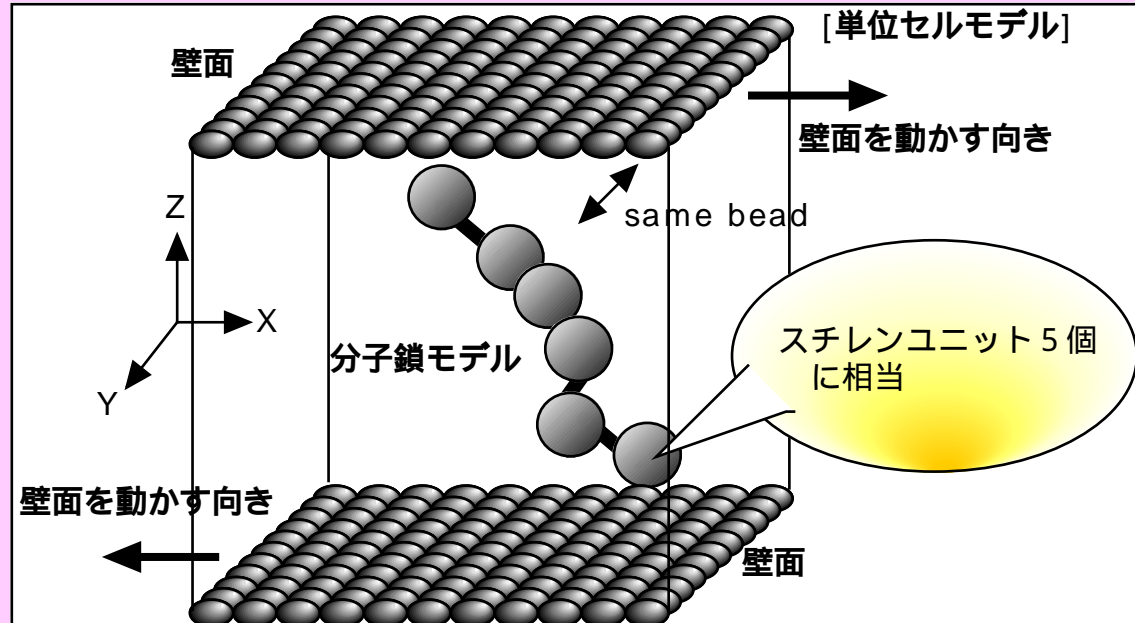
[計算条件]

重合度(N)  
N=100, 30

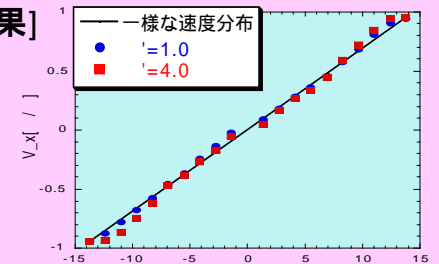
吸着力  
 $\epsilon=1.0$  ,  $\epsilon=4.0$

密度  
0.85

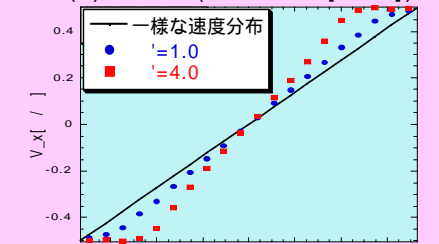
分子鎖数  
N=100 60本    N=30 200本



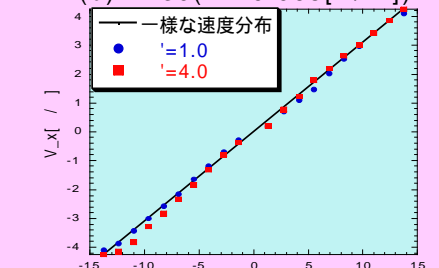
[結果]



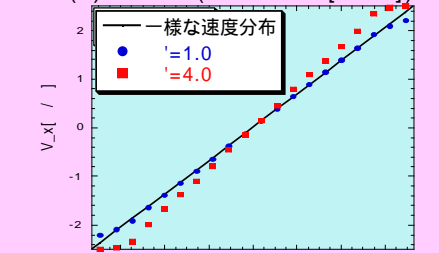
(a) N=100 ( $\dot{\gamma} = 0.068 [1/\tau]$ )



(b) N=30 ( $\dot{\gamma} = 0.068 [1/\tau]$ )



(c) N=100 ( $\dot{\gamma} = 0.308 [1/\tau]$ )



(d) N=30 ( $\dot{\gamma} = 0.308 [1/\tau]$ )

図1 壁面間の速度プロファイル

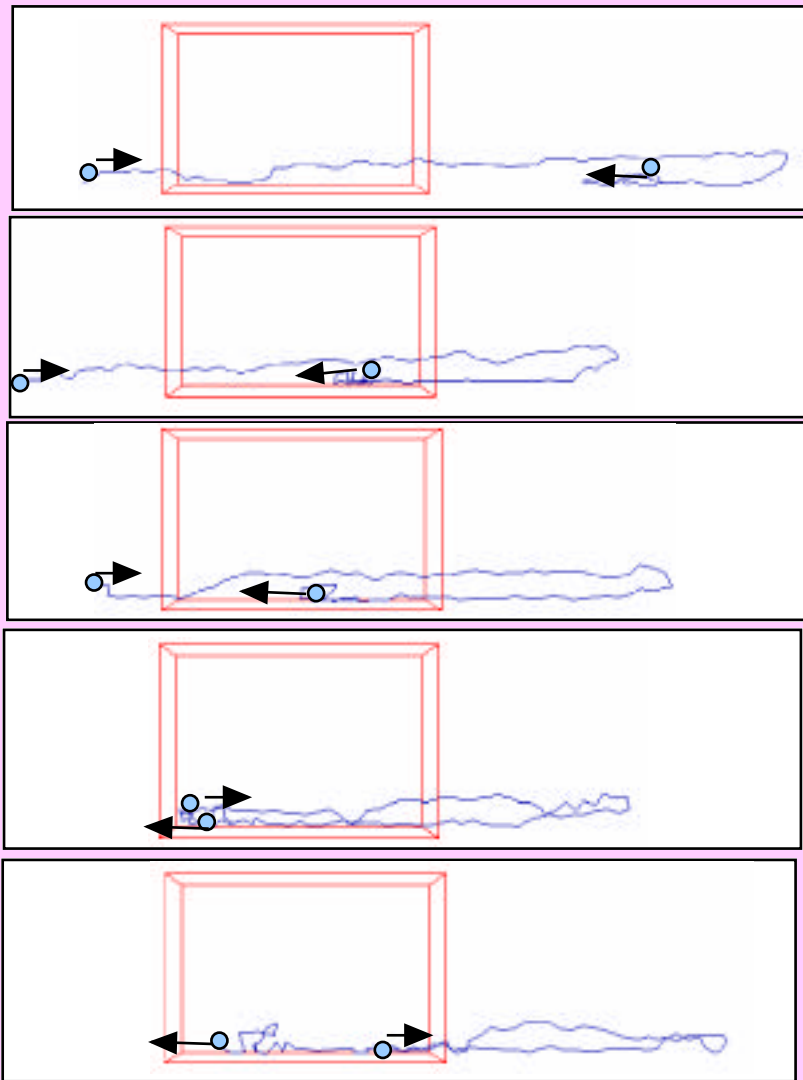


図3 絡み合いのある系での壁面の分子の運動の様子を表すスナップショット(  $\lambda = 1.0$  ,  $\beta = 0.606$  )

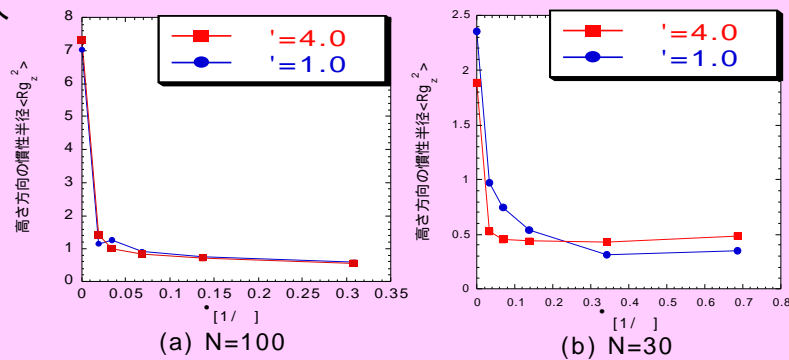


図2 Z軸方向の慣性半径とせん断速度の関係

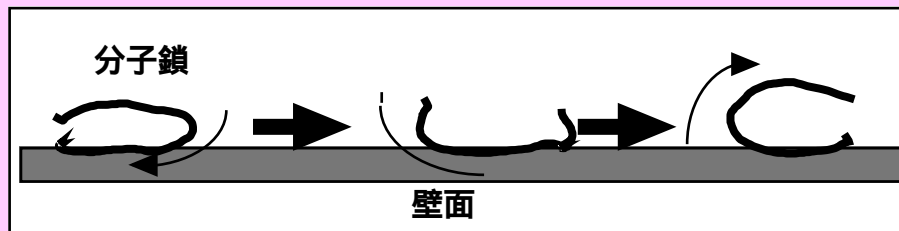


図5 回転運動のメカニズム

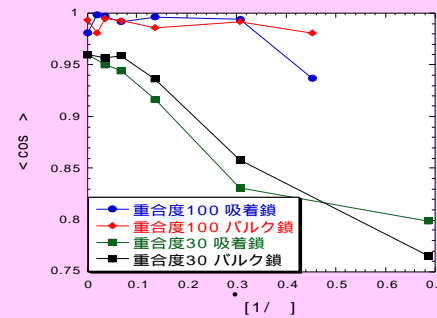


図4 時間 $t$ と $10$  後の分子鎖の末端間ベクトルのなす角とせん断速度の関係(  $\lambda = 1.0$  )

[結論]

N = 30と比較した  
N=100の特徴

- > 低せん断での流動配向が促進
- > 回転運動がゆっくり
- > 壁面スリップ減少