

粗視化シミュレーションによる溶液中の高分子電解質凝集体の構造解析

Structure analysis of polyelectrolyte aggregates in solution by coarse-grained molecular dynamics simulation

豊田中研¹ ○美馬 俊喜¹, 金城 友之¹, 山川 俊輔¹, 旭 良司¹

Toyota Central R&D Labs., Inc.¹,

○Toshiki Mima¹, Tomoyuki Kinjo¹, Shunsuke Yamakawa¹, Ryoji Asahi¹

E-mail: e1697@mosk.tytlabs.co.jp

【はじめに】 固体高分子形燃料電池の電極触媒層はスラリーを製膜することで得られる。膜の構造はスラリー中の高分子電解質凝集体の構造に依存すると考えられるので、マイクロスケールの高分子電解質の構造を調べる必要がある。本研究では、Kremer-Grest モデル^[1]を用いる粗視化分子動力学シミュレーションによって、溶液中の高分子電解質の剛性と高分子電解質凝集体の構造の関係を調べる。

【方法】 高分子電解質は Kremer-Grest モデルで表す。モノマーは 6 個の粗視化粒子で構成され、4 個が主鎖を、2 個が側鎖を構成する。側鎖の末端の粗視化粒子は $-e$ の電荷を持ち、末端の粗視化粒子の数と同数のカウンターイオンが存在する。粗視化粒子は Lennard-Jones ポテンシャルで相互作用し、粗視化粒子間に斥力が働き、主鎖の粒子間には引力も働く。主鎖の剛性を表すためにボンド結合角の $\cos$ の関数としてポテンシャルを付加する。

【結果】 主鎖の剛性が強くなると、凝集体は globule 状から数本の高分子電解質で構成される bundle 状へ変化する。さらに剛性が強くなると Fig. 1 に見られるゲル状の network 構造を示す。Fig. 2 に network 構造の静的構造因子を示す。 $k = 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ に見られる変曲点と $k > 0.2 \text{ \AA}^{-1}$ の波数依存性は X 線小角散乱計測^[2]の結果と矛盾しない。高分子電解質は円柱状に凝集するという従来の示唆^[3]に対して、本研究は高分子電解質が network 構造を採る可能性を示している。

【文献】

- [1] Grest, G. S.; Kremer, K.; Phys. Rev. A, **33**, 3628 (1986)
- [2] Yamaguchi, M; Matsunaga, T.; et al.; J. Phys. Chem. B, **118**, 14922 (2014)
- [3] Kim, Y. S.; Welch, C. F.; et al.; Macromolec. **48**, 2161 (2015)

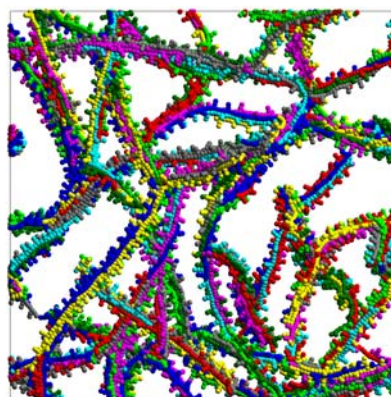


Fig. 1 Snapshot of conformation of polyelectrolytes. Eight colors are allocated to the polyelectrolytes for easy identification.

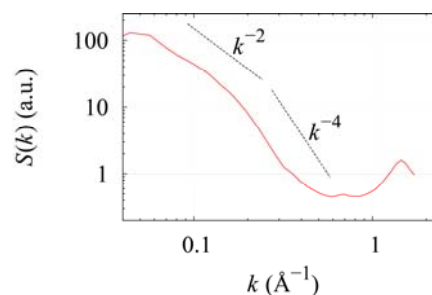


Fig. 2 Static structure factor of network conformation.