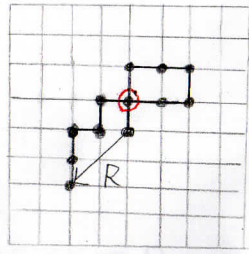


# 排除体積効果とツータ状態

☆ 酔歩鎖とガウス鎖で無視していること

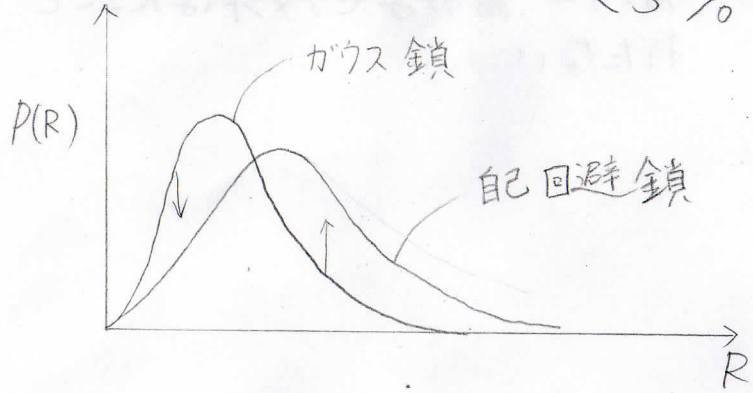


モノマーに大きさがあると、  
ループ構造はとれない  
分子内排除体積効果  
(長距離の相互作用)

排除体積効果を考慮した鎖 → 自己回避鎖

ガウス鎖より  $\langle R^2 \rangle$ ,  $\langle S^2 \rangle$  は大きくなる

半径膨張因子  $\alpha_s = \frac{\langle S^2 \rangle^{1/2}}{\langle S^2 \rangle_0^{1/2}}$

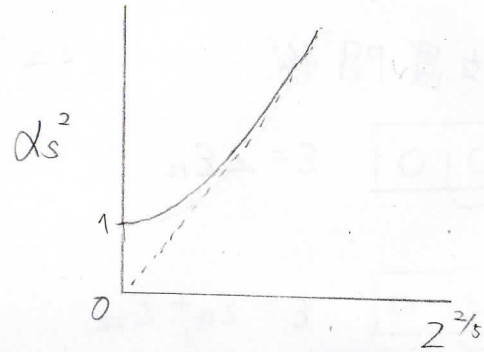


排除体積効果がある屈曲性高分子

$\langle S^2 \rangle = \alpha_s^2 \infty n b^2 \propto n^{1.2}$

# ☆ 2体クラスター積分

排除体積パラメータ  $z \equiv \left(\frac{3}{2\pi b_s^2}\right)^{3/2} \beta_s n_s^{1/2}$



シミュレーションからしか  
関数形を求められていない

z が小さければガウス鎖とみなせる。

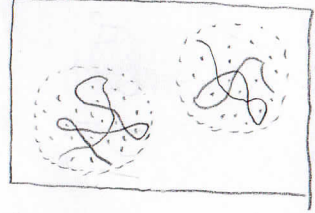
→ 排除体積効果による斥力を  
引力によって打ち消したとき

$\beta_s$ : 斥力と引力のバランスを示すパラメータ

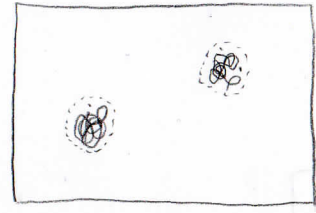
2体クラスター積分

# ☆ 良溶媒と貧溶媒

良溶媒



貧溶媒



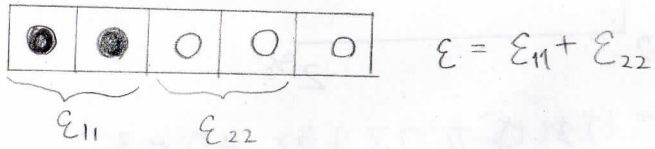
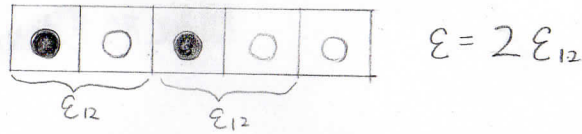
貧溶媒では溶媒と触れないように縮んだ構造をとる

縮もうとする力 → 引力

● : 高分子のセグメント (小さな構成単位), 1

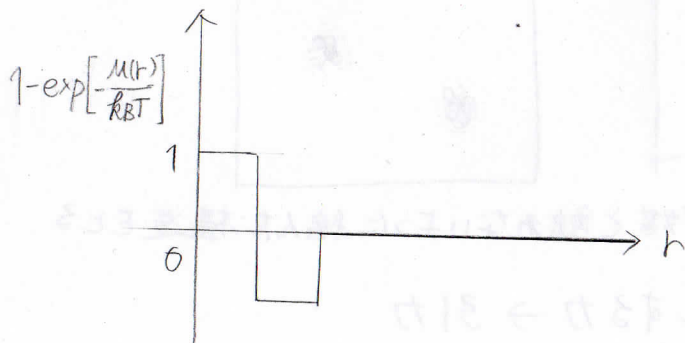
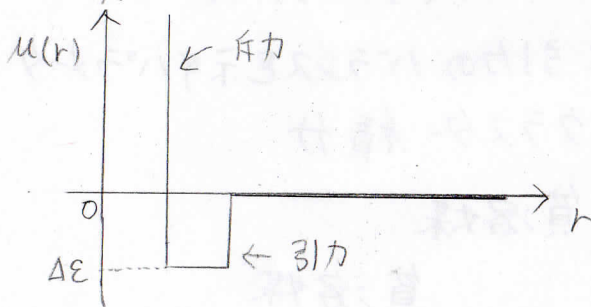
○ : 溶媒分子, 2

2つの●の位置関係



$$\Delta\epsilon = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} - 2\epsilon_{12}$$

負に大きいほど引力大



$$\beta_s \equiv \int_0^\infty \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{u(r)}{kBT}\right] \right\} dr$$

良溶媒  $\beta_s$  大

貧溶媒  $\beta_s$  小

☆ ツータ状態

斥力と引力が釣り合い、 $\beta_s = 0$  の状態

例) ポリスチレンのツクロヘキサン溶液 (34.5°C)

$\langle S^2 \rangle \propto n$  ガウス鎖

見かけ上、高分子セグメントは大きさを  
持たない