

Theory of Liquid Crystalline Micelles, A. Matsuyama, J. Chem. Phys.138, 034902 (2013).

高分子(A)と側鎖型液晶高分子(B)を共有結合でつなげたAB型のブロックポリマーで作られるミセル溶液(図1)の理論的研究を行なった。濃度や温度に依存した球状のミセルの大きさ、ネマチック-等方相転移、臨界ミセル濃度、相分離について計算した。ここでは、溶媒分子は側鎖型液晶高分子に対しては貧溶媒である場合を考える。したがって、図1に示すような側鎖型液晶高分子をコアに持つ様々なサイズの球状ミセルがつくられる。会合平衡の統計力学的理論を基礎として、溶液の自由エネルギーを計算した。

図2は様々なサイズ(r)のミセルのコア内における液晶分子の配向秩序パラメーター(S_r)と温度の関係を示す。サイズの大きなミセル(例えば、 $r=10^8$)ではネマチック-等方相転移はバルクと同じ1次相転移であるが、会合数が少ない小さいミセルでは連続的にネマチック相から等方相に変わっていく。これは、側鎖の液晶分子のミセル内への閉じ込めの効果によるものである。この結果は実験と定性的に一致している。

その他、臨界ミセル曲線、相分離について計算をおこなった。

棒状ミセルやラメラ相形成などは今後の課題である。

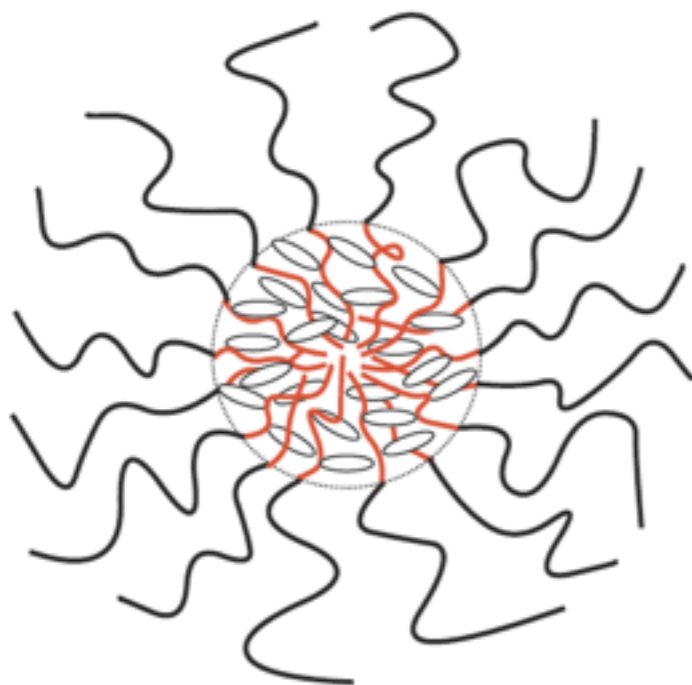


FIG. 1. Liquid crystalline micelle (r -cluster) of AB diblock copolymers, consisted of homopolymers (A) and side-chain liquid crystalline polymers (B), where r is the number of the AB copolymer in the spherical micelle. The core of the micelle has side-chain liquid crystalline polymers (B).

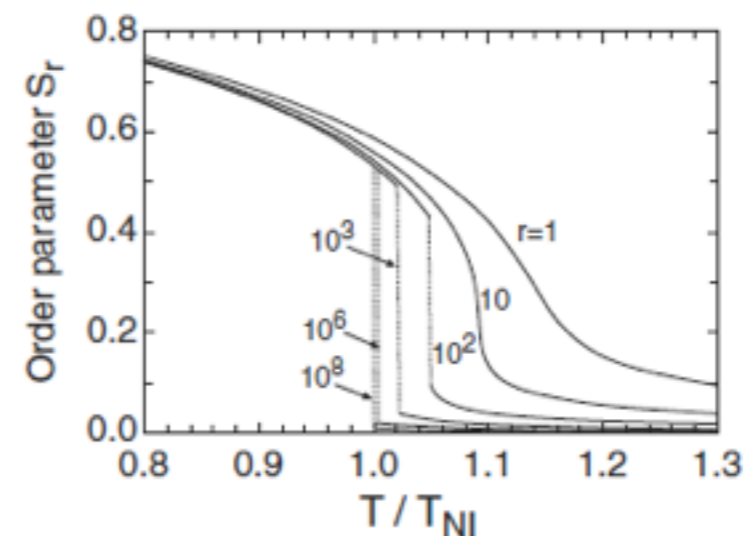


FIG. 2. Orientation order parameter S_r of the inner core of the r -cluster as a function of temperature. The temperature T_{NI} is the NIT temperature of the mesogens in the bulk state ($r = \infty$).