

■キーワード

分散 エントロピー 画像解析

分散を数値化する！
エントロピーを参考にした「分散」の評価法

■研究の概要

高分子複合材料は基材となる高分子に充填材(フィラー)混ぜることで性能向上した材料です。フィラーの種類だけではなく、フィラーの分散状態でも、性能が変化することが知られています。そのため、分散状態を制御して性能を最大化するという研究が多く行われます。しかしながら、分散状態を比較するのは、極めて難しいです。

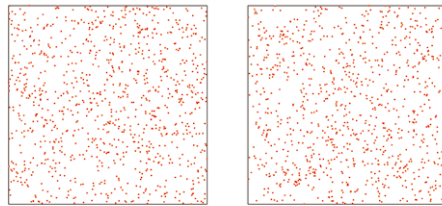


図2. QUIZ: どちらの方が「分散」しているか?

【粒子分散系のエントロピーの定義】

$$S = k_B \ln W$$

W: 配置の場合の数

各画像を右図のように区切って、各ボックスにカウントされる粒子数を N_1, N_2, \dots, N_n 個とすると場合の数 W は

$$W(N_1, N_2, \dots, N_n) = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_n!}$$

となります。Wは値が大きすぎて計算が難しいです。しかしながら対数なら計算できます。

$$S = k_B \ln W = k_B [\ln N! - \ln N_1! - \ln N_2! - \dots - \ln N_n!]$$

$$= k_B \left[\left(\sum_{i=1}^N \ln i \right) - \left(\sum_{i=1}^{N_1} \ln i \right) - \left(\sum_{i=1}^{N_2} \ln i \right) - \dots - \left(\sum_{i=1}^{N_n} \ln i \right) \right]$$

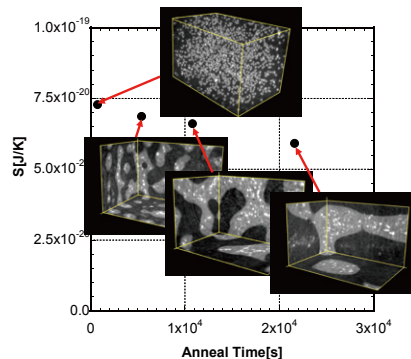


図4.



図1. 充填材(フィラー)の「分散」を制御することで性能向上を図る

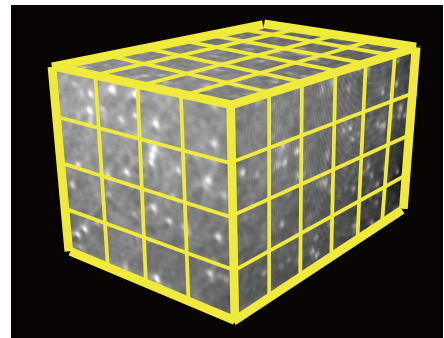


図3.

熱力学によれば粒子の自然な分散はエントロピーの増大によってもたらされます。⇒エントロピーを算出することで、均一分散なのか決定できるはずですが。

シリカ微粒子を高分子に混合し、モデル系を作成しました。混合条件 (anneal time) を変化させて、シリカ微粒子の分散状態を変化させました。X線CTで三次元画像を観察し、系中のシリカ微粒子の位置を決定しました。シリカ微粒子の位置を用いてエントロピーを計算したところ、分散状態の違いをエントロピーの変化として計測することができました。

■セールスポイント

エントロピーの定義は、実験データの素性や観察対象の特徴に応じて自由に変えられます。