

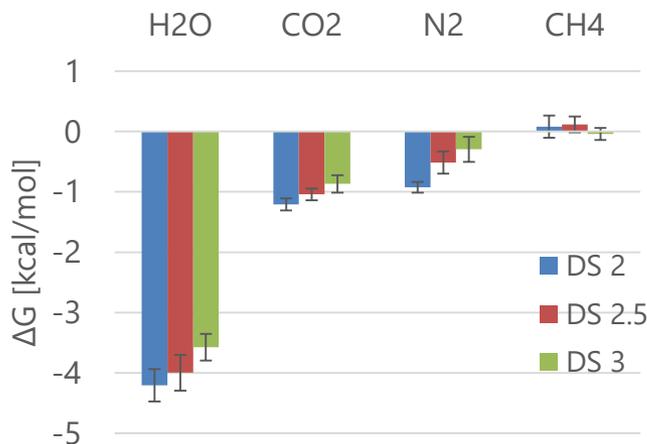
全原子モデル自由エネルギー解析に基づく ポリマー材料への成分収着動態の解明

日本たばこ産業株式会社 たばこ中央研究所 松葉凌太、久保田啓之
大阪大学大学院 基礎工学研究科 松林伸幸

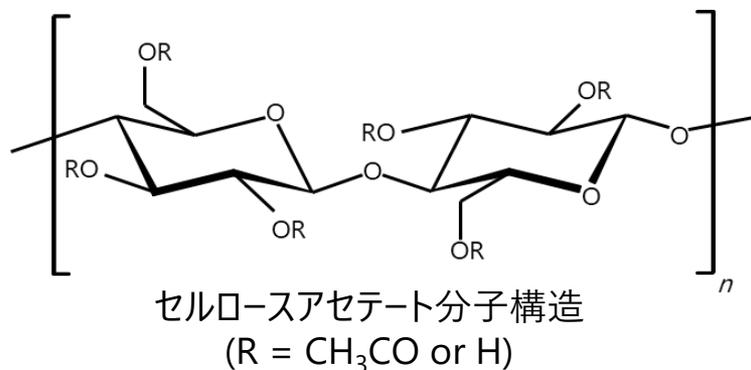
目的：ポリマー材料への低分子成分の収着性を全原子モデルで解析する

内容：分子動力学(MD)シミュレーションとエネルギー表示溶液理論を用い、セルロースアセテートに低分子成分(H₂O、CO₂、N₂、CH₄)が収着する際の自由エネルギーを計算した。セルロースアセテートはアセチル置換度の異なる3水準を対象とした。

結果：左下に低分子成分の収着自由エネルギー変化 (ΔG) を示す。H₂Oは他成分より ΔG が大きく、極性分子が収着しやすいことが示された。CH₄の ΔG はおおよそ0であり、セルロースアセテートへ収着しにくいと考えられる。また、アセチル置換度が増加すると各成分において ΔG は減少しており、置換度2が最も低分子成分を吸収しやすいことが示された。



セルロースアセテートへの収着自由エネルギー
(DS：アセチル置換度)



利用した計算機	OCTOPUS
ノード時間	29210時間
使用ソフト	GROMACS, ERmod