

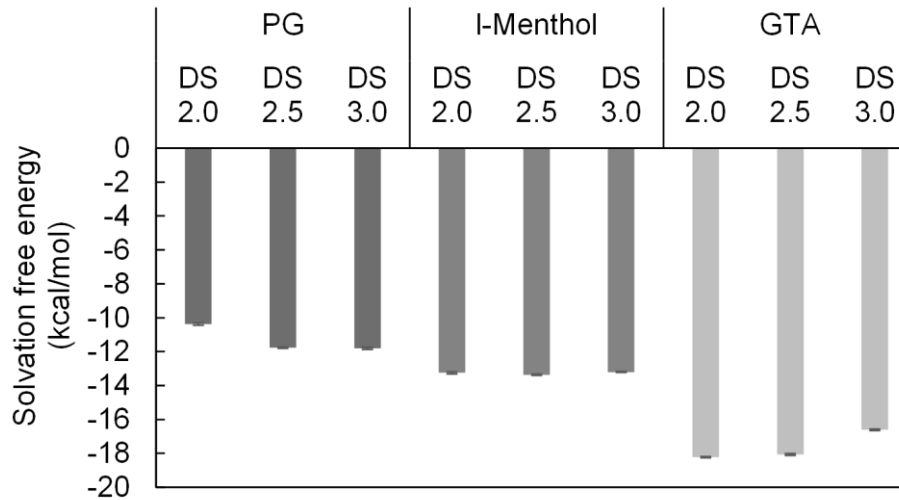
全原子モデル自由エネルギー解析に基づく ポリマー材料への成分収着動態の解明

日本たばこ産業株式会社 たばこ中央研究所 久保田啓之、松葉凌太
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化合物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融合させた手法により、セルロースアセテート(CA)に低分子成分 (Propylene glycol (PG), l-Menthol, Glycerol triacetate (GTA)) が収着する際の溶媒和自由エネルギー ($\Delta\mu$) を計算した。CAはアセチル置換度 (DS) の異なる3水準 (2.0, 2.5, 3.0) を対象とした。

結果：各成分の収着時の溶媒和自由エネルギー ($\Delta\mu$) を示す。GTAは他の化合物より $\Delta\mu$ が低値であり、収着しやすいことが示された。また、PGはDSの増大に従って $\Delta\mu$ が低値になる傾向がみられた。一方、GTAはDSの増大に従って $\Delta\mu$ が高値になる傾向がみられ、各DSにおける各化合物の収着性が定量的に示された。



CAへの収着時溶媒和自由エネルギー

利用した計算機 OCTOPUS
使用ソフト GROMACS, ERmod