

# 溶液蒸発過程における $\pi$ 共役系高分子の凝集および分子配向ダイナミクスの解明

大阪大学 工学研究科 氏名 藪内 湧太

**目的** ドナー-アクセプタ (D-A) 型の $\pi$ 共役系高分子が蒸発過程で生じる凝集形態を調べ、分子配向現象との関係を明らかにする

**内容** Gaussianを用いてD-A型 $\pi$ 共役系高分子 PDPP-DTTの電子状態からRESP電荷を計算し、周期的境界条件を介した無限鎖高分子モデルを作成した (図1)  
主鎖が一軸に配向した状態で計算セルに複数配置し、トリクロロエチレン分子で満たしてMD計算を行った

**結果** 高分子の濃度が十分に高い状態となったとき、分散した初期構造 (図2a) の状態から1 ns程で高分子が棒状に凝集化することを確認した (図2b)  
高分子は分子間のD-A相互作用によって凝集化しているものと考えられる  
今後は溶媒蒸発がもたらす動的な濃度変化が凝集形態に与える影響について調べていく予定である

## 利用した計算機 OCTOPUS

ノード時間	200時間 (GPUノード)
使用メモリ	500 GB
使用ソフト	Gaussian16
	GROMACS 2016.5
並列化	2並列

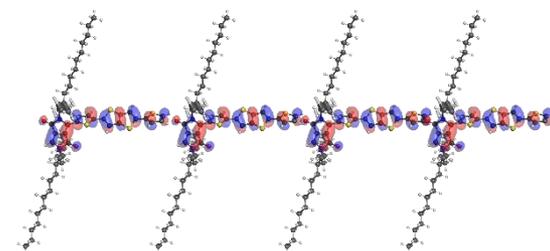


図1 計算したPDPP-DTTの電子軌道

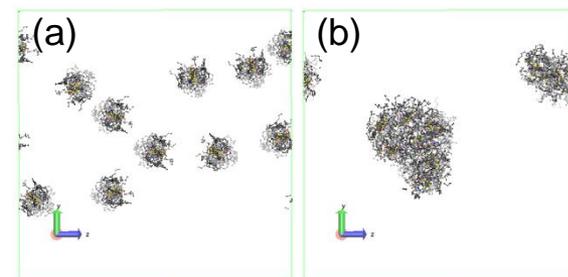


図2 (a) 初期構造と(b) 凝集化構造  
主鎖は紙面に垂直方向  
溶媒分子は非表示