

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

Tobacco Science Research Center

久保田啓之

RRP Development Center

松葉凌太

大阪大学大学院

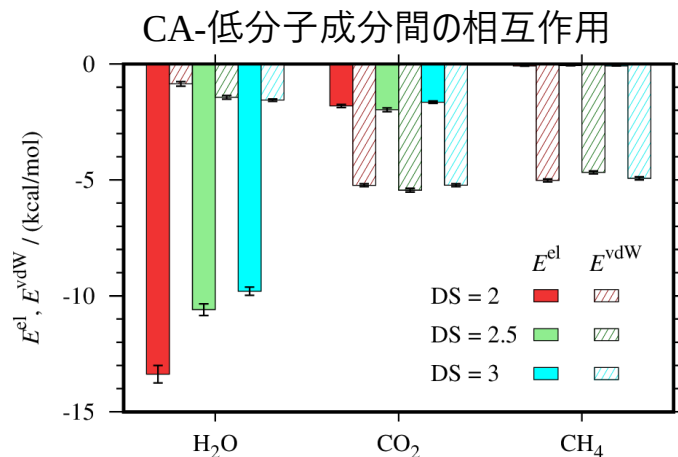
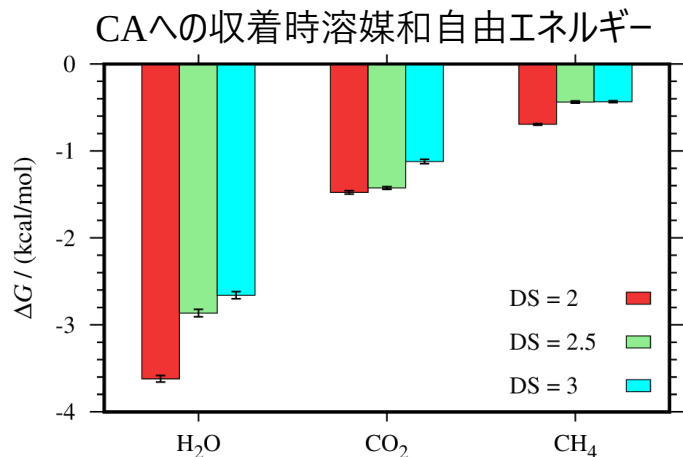
基礎工学研究科

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 (H_2O , CO_2 , CH_4) が収着する際の自由エネルギー (ΔG) を計算した。また、低分子成分とCAの間に働く静電相互作用 (E^{el})、van der Waals相互作用 (E^{vdW}) を個別に解析し、収着性に寄与する分子間相互作用を検証した。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：左下に各成分の ΔG を、右下に分子間相互作用(E^{el} , E^{vdW})を示す。 ΔG は $\text{H}_2\text{O} > \text{CO}_2 > \text{CH}_4$ であり、極性分子が収着しやすいことが示された。また、DSが増加すると各成分において ΔG が減少する傾向がみられた。分子間相互作用解析から、CAへの H_2O 収着は E^{el} が支配因子であることが明らかとなった。非極性分子 (CO_2 , CH_4) を比較すると E^{el} に差異がみられた。 CO_2 の四重極による影響と推察され、 ΔG が異なる要因が明らかとなった。



利用した計算機：OCTOPUS
使用ソフト：GROMACS, ERmod