

溶液蒸発過程における π 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 π 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 トリクロロエチレン溶媒で満たし、周期的境界条件を適用した計算セルに、D–A型 π 共役系高分子 PDPP-DTTの無限鎖高分子モデルを主鎖が一軸に配向した状態で配置した。GROMACSによるMD計算を行い、時間とともに溶媒を削除することで擬似的に溶液蒸発過程を再現した。

結果 溶液濃度が低い場合、高分子は一定の距離を保った分散状態となっていたが、濃度が増加するに従って、一部の高分子が束状に集合して凝集化することを確認した。このような凝集効果は、PDPP-DTTのD–A相互作用に基づく分子間引力によるものと考えられる。このPDPP-DTTの凝集体は、放射光X線散乱測定により、実際に高濃度溶液中に存在することが明らかになった。

利用した計算機 OCTOPUS

ノード時間	230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

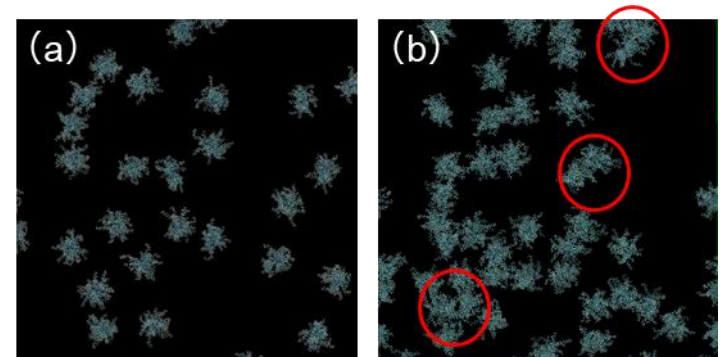


図 濃度変化によって凝集化するPDPP-DTT
(a) 低濃度, (b) 高濃度