

# 海洋分解性ポリマーの分子動力学シミュレーション

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 保田 侑亮

## 目的

近年マイクロプラスチックなど高分子材料の環境負荷が大きな問題となっており、優れた物性を持つだけでなく自然条件下で分解されることが重要な要請となりつつある。本研究では分解性の材料の一種として注目を集める解離型動的架橋エラストマーの粗視化モデルを作成し、そのダイナミクス、物性の計算を行った。

## 内容

右図のようにばねビーズモデルを用いて動的架橋エラストマーの粗視化モデルを作成し、分子動力学シミュレーションによりダイナミクス測定並びにサイクル変形試験を行った。

## 結果

今回作成した粗視化モデルは実験的にみられるヒステリシスと緩和による応力回復特性を再現した。そのほか、解離ダイナミクスは会合ポテンシャルの形状に依存するアレニウス式に支配され、自己修復特性、強靭性、易分解性に影響することを示した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群  
ノード時間 18383 時間並列化  
1ノード (OCTA/COGNAC) 8ノード 並列(LAMMPS)

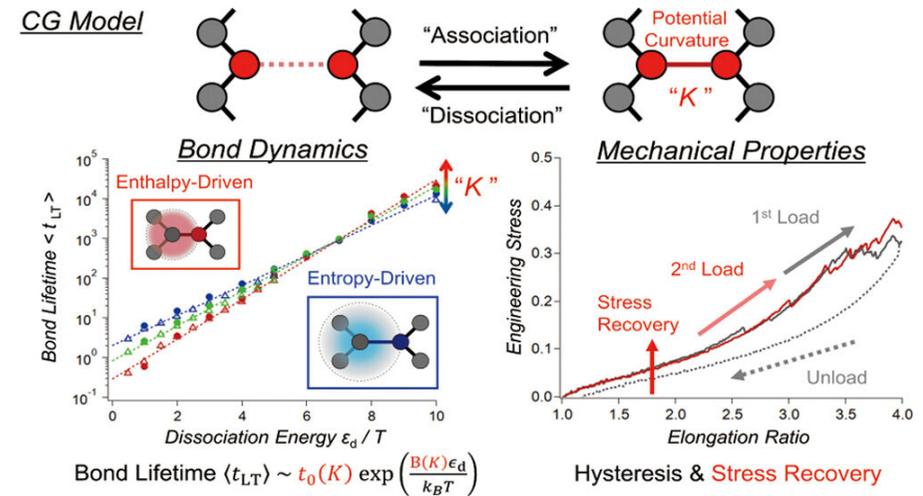


図 (シミュレーション結果)

Reprinted with permission from  
*Macromolecules* 2023, 56, 18, 7432–7444.  
Copyright 2023 American Chemical Society.