

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 森田 裕史

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

右図のように粗視化モデルとして作成した動的架橋エラストマーの分子動力学シミュレーションにより、動的架橋点配置の依存性について検討した。

結果

今回のシミュレーションにより、動的架橋エラストマーの架橋点配置を変えることで、架橋形態が変化し、有効な架橋点の数が変わることから弾性率にも影響することが示された。

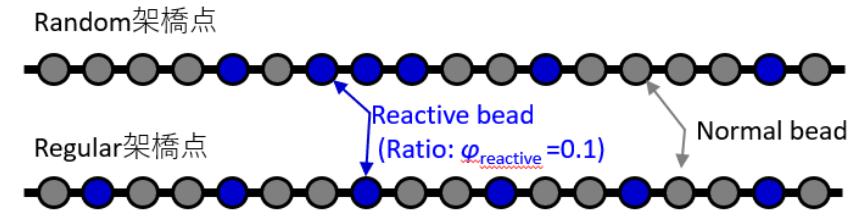


図 シミュレーション対象の分子構造モデル

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群

ノード時間 23278 ノード時間

1ノード (OCTA/COGNAC) 8ノード 並列(LAMMPS)