

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、結晶ポリマーが分解せず残存していることが問題になってきている。本研究では課題となっている結晶性ポリ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

結晶性高分子が形成可能なラメラ構造のモデルを構築し、粗視化分子動力学シミュレーションを実施し、結晶構造に対する熱特性についてシミュレーションを用いて解析した。

結果

結晶ラメラ構造を適切にモデル化するための条件を決定し、さらにその条件のもとで、ラメラ構造の融解シミュレーションを実施し、結晶部と非晶部の微細な変化を精密に構造解析しながら追跡することに成功した。

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/CIOGNAC) 8ノード 並列(LAMMPS)

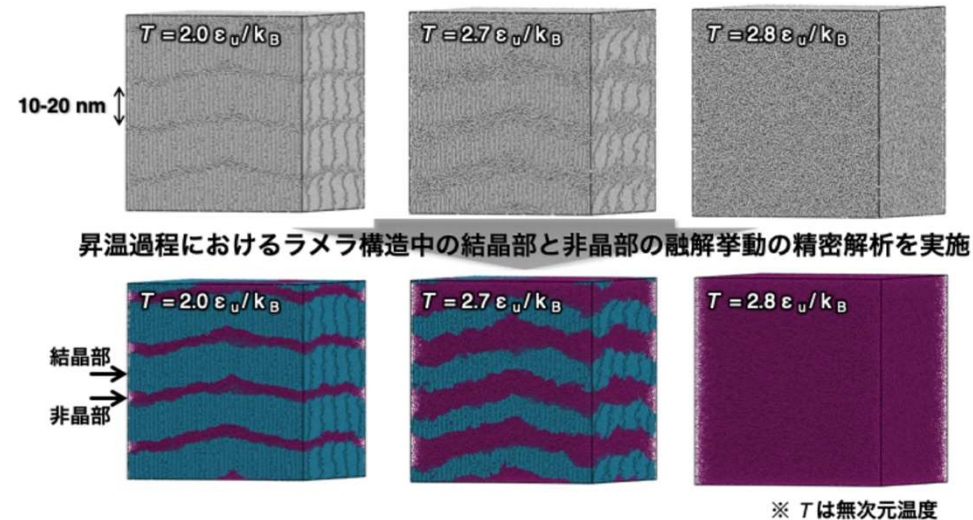


図 (シミュレーション結果)

Fumiki Takano, Masaki Hiratsuka, Kazuaki Z. Takahashi, "Finite-Size Effects on Lamellar Morphology and Crystallinity in a Crystallizable FENE-LJ Polymer Model", Scientific Reports, 2026(in press).