

2B14

新規ポテンシャルモデルを用いた、
非晶高分子の衝撃破壊シミュレーション

○藤本和士¹, 服部智成¹, Rajdeep Singh Payal¹,
浅野裕太¹, 中垣雅之², 榊 茂好², 篠田 渉¹, 岡崎 進¹
¹名大院工, ²京大福井セ
k-fuji@apchem.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

高分子の破壊機構を分子レベルから取り扱った研究例は、知りうる限りあまり行われておらず、分子のズレや化学結合の切断といった高分子破壊メカニズムの詳細について明らかになっていない。しかしながら、高分子破壊メカニズムの理解は、タフな高分子材料を設計する上で必要となってくる。そこで、我々は全原子分子動力学 (MD) 計算を行い、高分子の破壊機構を原子・分子レベルから明らかにしようとしている。

破壊の MD 計算を行うためには、ポテンシャル関数に化学結合の切断を取り込まなければならないが、通常のポテンシャル関数では化学結合切断を取り扱うことはできない。そのため、化学結合切断を取り扱うことができるポテンシャル関数の開発が必要不可欠となってくる。これまで、我々は Polyethylene(PE)および PolyMethyl Methacrylate (PMMA)の新規ポテンシャルを開発してきた。本討論会では、アモルファス状態の PE および PMMA の破断 MD シミュレーションについて報告する。また新規ポテンシャルモデルの開発については、当討論会ポスター「高分子破壊シミュレーションに向けた、新規ポテンシャルモデルの開発」で発表を行う。

2. シミュレーション手法

破断のシミュレーションを行うために、C-C 結合のポテンシャルとして、

$$V_{\text{C-C bond}} = \left\{ D - V_{\text{C-C angle}}(\theta) \right\} \left[1 - \exp \left\{ -a(r - r_0) - b(r - r_0)^2 \right\} \right]^2$$
$$V_{\text{C-C angle}}(\theta) = k_1(\theta_1 - \theta_0)^2 + k_2(\theta_2 - \theta_0)^2 + k_3(\theta_3 - \theta_0)^2 + k_4(\theta_4 - \theta_0)^2$$

を用いた。Lennard-Jones 相互作用、Coulomb 相互作用などの C-C 結合以外のポテンシャルには OPLS-AA を用いた。これらの MD 計算は MODYLAS[1]を用いて行った。

3. シミュレーション結果

新しく開発したポテンシャルを用いて、Z 軸方向にポリエチレンを一定速度で延伸した場合、高分子が伸びていくことにより、まず、クレーズのような構造が現れた。さらに延伸していくと、化学結合の切断が始まり、次々と化学結合が切れていくことが明らかとなった。当日は PMMA の結果と合わせて、詳細を報告する。

参考文献

[1] Andoh, Y. *et al.* MODYLAS: A Highly Parallelized General-Purpose Molecular Dynamics Simulation Program for Large-Scale Systems with Long-Range Forces Calculated by Fast Multipole Method (FMM) and Highly Scalable Fine-Grained New Parallel Processing Algorithms. *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 32013209 (2013)