

## 非晶質および半結晶ポリマーの機械的性質の決定

DKI（ドイツプラスチック研究所）の研究者は、BIOVIAのAmorphous Cellを使って非晶質および半結晶性ポリマーの力学特性を決定する各種の方法を評価しました。

この研究結果は、新規かつより優れたプラスチックの開発に役立つはずで

この研究の目的は非晶質および半結晶性ポリマーの力学特性を決定する各種方法を評価することでした[1,2]。

周期的なセルに高分子鎖を含み、結合のねじれの確率とバルクの充填条件を考慮するAmorphous Cellを使って、バルク为非晶質ポリマー構造を発生させました。つづいて、発生させたモデルを一連のエネルギーの最小化手順と分子動力学手順によって平衡化させました。さらに、Crystal Cellを使って半結晶性ポリマーの結晶構造を発生させました。非晶質構造と結晶質構造の両方に対して得られたこれらの構造の質を、分子モデルから決定されたX線分散回折図と実験データとを比較して検査しました。

次に、シミュレーションしたバルクの構造を3種類の評価方法、すなわち、Theodorou氏とSuter氏によって開発された静的メソッド[3]、Parinello氏およびRahman氏の揺らぎ法[4]およびBerendsen氏らが最初に導入し[5]、Brown氏およびClarke氏[6]が採用した動的メソッドにかけて、前記構造の力学的挙動を評価しました。静的メソッドでは、各構造に逐次変形を加え、つづいて最小化を再度行い、エネルギー超表面を作り出して弾性率を決定します。動的メソッドは、一定の応力を加えて分子動力学的な考察を行う方法で、材料に荷重を加えて応力-歪み挙動を測定します。この動的メソッドでは、力場と、マンチェスター大学のJ.H.R. Clarke教授のグループが開発したソフトウェアが使用されました[7]。揺らぎ法は、シミュレーションによって得られる統計的集合に適用される揺らぎの式の中に弾性定数が現れるという事実を利用します。図1は、ポリ（エーテルスルホン）の例について、静的メソッドの手順を説明しています。

前記3種類の方法を、数種類の非晶質および結晶性ポリマー（ポリスルホン、ポリエーテルスルホン、ポリプロピレン）を使って検査しました。別のポリマーを使った研究は現在進行中です（PEEK、ポリエチレン）。動的メソッドと揺らぎの方法は、実験測定データとほぼ一致したのに対して、静的メソッドで得られた弾性率は高過ぎで、上限値を与えるだけでした。

半結晶性ポリマーの場合はアイソタクチックポリプロピレンの結晶相と非晶質相を独立してシミュレーションし、そのシミュレーションによって得られる弾性定数をマイクロ機械モデルへの入力として使用することによって処理されました[8]。生成する複合挙動も実験と定性的にほぼ一致することが分かりました。

この研究は、工業研究組合の研究班（AiF）を通して連邦経済省（奨励金交付番号11314Nおよび12980N）と欧州科学基金（ESF）のSUPERNETプログラムから奨励金の交付を受けて行われました。

## Organization

Deutsches Kunststoff - Institut Darmstadt

## Products

BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell

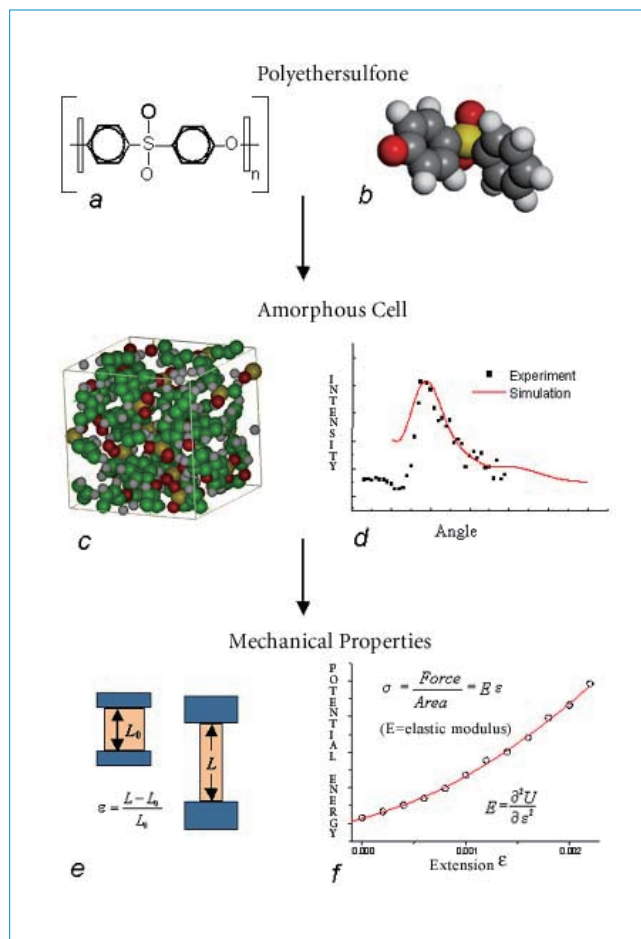


図1 非晶質ポリ(エーテルスルホン)の力学特性のシミュレーションに使用された手順の概要: (a) 化学式; (b) エネルギーを最小にしたモノマーの分子モデル; (c) ポリエーテルスルホン鎖の非晶質セル; (d) 非晶質セルから決定されたX線の散乱強度と実験データとの比較; (e) 力学的試験の原理; (f) 力学特性のシミュレーションから得られたポテンシャルエネルギー;

## 参考文献

1. I. Alig, M. Krohn, R. Hentschke, and M. Soliman, "Molekulares Modellieren in der Polymerforschung", Spektrum der Wissenschaft, 6 (1996) 106.
2. I. Alig, M. Krohn, and R. Hentschke, "Molekulares Modellieren in Polymersystemen", Spektrum der Wissenschaft Digest, 1 (2000) 78.
3. D.N. Theodorou, U.W. Suter; Macromolecules, 19 (1986) 139.
4. M. Parrinello, A. Rahman; J. Chem. Phys., 76 (1982) 2662.
5. H.J.C. Berendsen et al.; J. Chem. Phys., 81 (1984) 3684.
6. D. Brown, J.H.R. Clarke; Macromolecules, 24 (1991) 2075.
7. M. Krohn, J.H.R. Clarke, ESF Research Report, June 2000.
8. J.C. Halpin, J.L. Kardos; J. Appl. Phys., 43 (1972), 2235.