

先端化学技術部会
コンピュータケミストリー分科会

高分子ワークショップ
「第3期ソフトマテリアル統合シミュレータOCTAの活用研究」
報告書

2010年3月

社団法人 新化学発展協会

ASPRONC

The Association for the Progress of New Chemistry

目次

1. はじめに.....	3
2. グループ A の総括.....	4
3. グループ B の総括.....	6
4. 各テーマの報告.....	7
KremerGrest モデルの検証.....	8
架橋高分子モデルの一軸伸長時の応力解析.....	10
ビーズ・スプリング・モデルによるアルカリ現像レジストの溶解シミュレーション.....	12
フィルターを含んだ高分子メルトのせん断(伸張)挙動.....	14
SBS 系の一軸伸張計算に関する基礎検討.....	16
ABA トリブロック共重合体と直鎖ホモポリマーとの接着・剥離計算.....	18
分岐ポリマーブレンド系の伸長特性.....	20
粗視化ポテンシャルの検証と全原子 MD へのリバースマップ.....	22
粗視化モデルによるポリカーボネートの密度の評価.....	24
COGNAC を用いた FC 電解質膜の機械強度解析.....	26
全原子モデルを用いたフェノール樹脂架橋構造のモデリングと一軸伸長計算.....	28
架橋イソプレンゴム中の気体分子の拡散.....	30
SLLOD 法を用いた低分子化合物の粘度推算.....	32
ジブロックポリマー系のマイクロ相分離の相図.....	34
ジブロックポリマー/ホモポリマー系の相図.....	36
高分子溶融体中の2つのナノ粒子間に働く力.....	38
5. Appendix.....	40
Flory-Huggins-deGennes モデルによる界面厚さの計算.....	41
SCF 計算での空間刻み幅 dx と鎖長の刻み幅 ds の適切な選び方.....	44
ブロックポリマー系のドメイン周期に関する Strong Segregation Theory (SST).....	47
SUSHI における界面過剰自由エネルギーの算出に関するノート.....	55
ブロックポリマー/ホモポリマー・ブレンド系の相図作成のためのメモ.....	64
ブロックポリマー混合系における一様状態の自由エネルギーの算出に関するノート.....	71

1. はじめに

小沢 拓、佐々木 裕

第3期となる高分子ワークショップ「ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA の活用研究」は、山形大学の滝本淳一教授、東北大学の川勝年洋教授に顧問をして頂き、2008年4月から2010年3月まで活動を行った。本報告書はその間の活動の成果を集めたものである。

2002年に「ソフトマテリアル統合シミュレータ OCTA」がリリースされて以降、着実に利用者は広がってきたが、未だ実問題への適用方法については手探りの状態である。さらに、表面的なソフトウェアの使用では成果を出すことができず、理論背景の理解が欠かせないことも認識されてきている。今期のワークショップではこれらのニーズに応えるための活動を目指した。加えて、2008年度には高分子シミュレーション基礎講座を8回実施し、理論背景を系統的に学習できる場を設けた。基礎講座にはワークショップ参加者以外にも毎回数十人の参加者があり、この分野への関心の高さが再認識できた。

ワークショップの実施体制としては2つのグループに分けて、グループAでは主にCOGNACを中心に(粗視化)分子動力学を用いたテーマへの取り組みを実施した。グループBでは主にSUSHIを用いて平均場法による高分子混合系の挙動に関するテーマに取り組んだ。また、ワークショップ開始時には、前回からの継続参加者によるユーザー視点での基本的な使い方の紹介、重要論文の勉強および基本を習得するためのグループテーマなどを実施した。その後は、各人が関心を持っている個別テーマを中心に議論を進めた。

参加人数の推移としては、当初は50名を超える登録があったものの、様々な要因もあり、後半は各回15~20名の参加者によって各テーマの議論がなされた。また、両年とも11月には合宿が企画され、各企業でのシミュレーション活用状況の紹介と議論がなされた。2009年の合宿では名古屋大学の岡崎進教授による分子動力学法の講義も行われた。

以下の章で紹介するように、最終的には複数テーマに関する報告がまとめられ、OCTAの適用事例の共有、シミュレーション実施時に注意すべき点などの議論がなされた。一方で、さらにOCTAの適用範囲を広げていくためには、より基本理論に立ち返った議論が重要であることが再認識された。2010年からの第4期ワークショップでは、理論習得を目指した活動を行っていく予定である。