

利用事例紹介 9

高分子の一軸伸長による弾性率の計算

計算化学では分子動力学法を用いることで、高分子を一方向に伸長させた際に生じる応力とひずみをシミュレーションすることができます。本事例では、アクリル系ポリマーの応力とひずみの関係から弾性率を計算しました。

計算フローチャート

モデルの主な設定項目

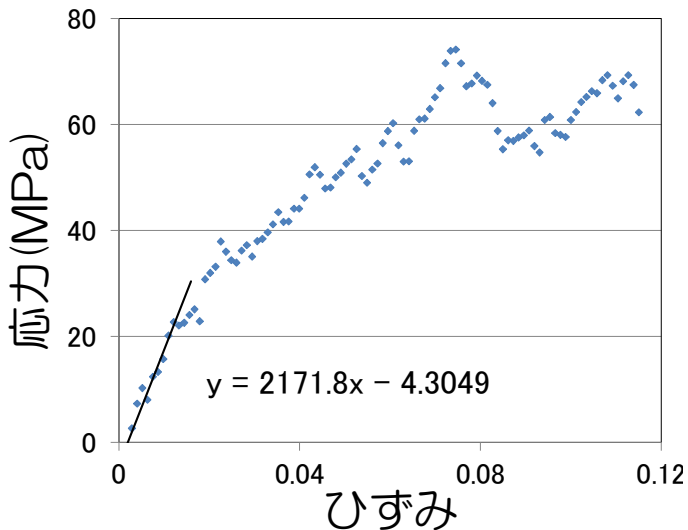
モデル作成

モノマーモデル、ポリマーモデル（今回使用）
全原子モデル、50分子、力場：PCFF → 粗視化

初期配置作製 → 緩和後、圧縮（温度：300K）

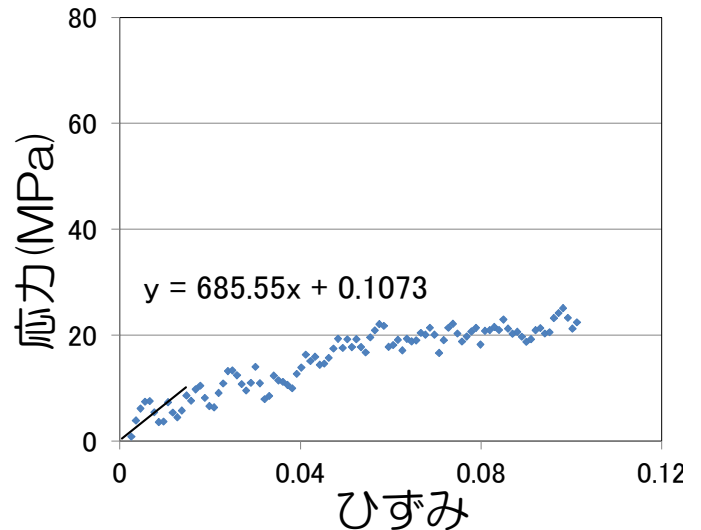
一軸伸長（変形速度：150mm/min）

計算結果



PMMA

弾性率：2.2(GPa)



PBMA

弾性率：0.7(GPa)

PMMA(ポリメチルメタクリレート)について主要な弾性率の値(1.8~3.3GPa)に収まる結果になりました。

引張の弾性率測定が困難なPBMA(ポリブチルメタクリレート)についても値を求めることができます。