J03129

ポリカーボネート変形および破壊の粗視化分子動力学解析： 分子量および絡み合い効果の検討

Coarse-grained molecular dynamics simulation of deformation and fracture in polycarbonate: effect of molar mass and entanglement

○正 久保 淳^{*1}, Tatchaphon LEELAPRACHAKUL^{*1}, 梅野 宜崇^{*1}
Atsushi KUBO^{*1}, Tatchaphon LEELAPRACHAKUL^{*1}, Yoshitaka UMENO^{*1}

^{*1} 東京大学 The University of Tokyo

Key Words : Structural polymer, Molecular dynamics, Entanglement, Strength

ポリカーボネートは非晶性ポリマーの一種であり、高強度、高靱性、耐衝撃性などの優れた機械的特性を有することから、構造材料として広く用いられている。一般に、高分子材料における機械的特性は原子・分子レベルの構造の影響を強く受けることが知られているが、理論的には十分に解明されていない点が多く、ポリカーボネートにおける優れた機械的特性の発現メカニズムの詳細の解明が求められている。特に、ポリカーボネートの靱性に対しては、分子量や絡み合いといった高分子特有の効果が大きく関与していることが指摘されている⁽¹⁾。本研究では、粗視化分子動力学 (Coarse-Grained Molecular Dynamics; CGMD) 法に基づく原子レベル変形解析を実施することにより、分子量および絡み合いがポリカーボネートの変形・破壊特性に及ぼす影響について検討する。

本グループにてこれまでに構築した粗視化モデル⁽²⁾を用いて、ポリカーボネートの変形の CGMD 解析を実施した。変形・破壊特性に対する分子量の影響を検討するため、4種類の異なる分子量の構造モデルに対して、ひずみ速度一定の条件で変形を加え応力ひずみ関係を取得した。異なる分子量の構造モデルにて得られた応力ひずみ関係を図1に示す。降伏後の変形において顕著な分子量依存性が確認された。特に、分子量が小さい場合には降伏応力を超える荷重を保持しえないのに対して、分子量が大きい場合には降伏後に降伏点よりも十分に大きな応力に耐えることが確認された。前者では降伏時に発生したボイドの周辺にて変形が局所的に進行することにより脆性的に振舞うが、後者では変形領域が局在化せずに周囲に拡大することで延性的に振舞うことが示唆され、分子量に起因する脆性-延性転移を良く説明することができる。

Fig.1 Stress-strain relationship for different molar mass, M_n , in the strain range of (a) $\varepsilon = 0 - 10$ and (b) $\varepsilon = 0 - 1.0$.

文 献

- (1) Pitman, G.L., Ward, I.M., “Effect of molecular weight on craze shape and fracture toughness in polycarbonate”, *Polymer*, Vol. 20, No. 7 (1979), pp.895-902.
- (2) Kubo, A., Albina, J.-M., Umeno, Y., “Construction of master yield stress curves for polycarbonate: A coarse-grained molecular dynamics study”, *Polymer*, Vol. 177, No. 26 (2019), pp.84-90.