

円筒への閉じ込めによるポリプロピレン1本鎖のらせん構造形成の可能性検討

京工織大¹・防衛大² 中村 智宏¹・藤原 進¹・萩田 克美²

1. はじめに

近年、イソタクチックポリプロピレン(iPP)とカーボン材料との複合材料が、工業的な応用だけでなく、高分子結晶化の観点からも興味を持たれている[1-4]。カーボン材料としては、グラファイトやカーボンナノチューブ(CNT)等が扱われており、カーボン材料との界面におけるiPPの分子論的挙動解明が重要と考えられる。我々は、iPP-CNT界面におけるiPPの挙動を効率良く調べるため、CNTの内側に閉じ込めたiPP1本鎖の分子動力学シミュレーションを行い、CNTへのiPPの吸着結晶化の様子を観察した。

2. シミュレーション

重合度120のiPPを、ユナイテッドアトム(UA)モデルで扱った。ソルバーとしてLAMMPS[5,6]を用い、力場はTraPPE-UAを基にタクティシティを保つように修正した力場[7]を用いた。ここでは、CHユニットのHを陽に配置した粒子として扱い、全側鎖に調和振動型のImproper Torsionポテンシャルを与えた。CH結合長はSHAKE法[8]により固定し、数値積分はRESPA法[9]を用いた。三次元周期境界条件を適用し、NVTアンサンブル(粒子数 N 、体積 V 、温度 T 一定)を用いた。時間刻みは5fsとした。CNTとして、カイラル指数 $(m, n)=(24, 0)$, $(32, 0)$, $(40, 0)$, $(18, 18)$, $(24, 12)$ を扱った。CNTの運動は凍結しているとし、CNTの両端は周期境界条件により連結させた。まず、主鎖の両端に外力を加えて延伸したiPPをCNT内に挿入した。続いて、500Kから100Kまで、100K/nsあるいは10K/nsの冷却速度で段階的に冷却した。各温度においてMD計算を100,000ステップ実行し、分子鎖の構造変化の観察を行った。

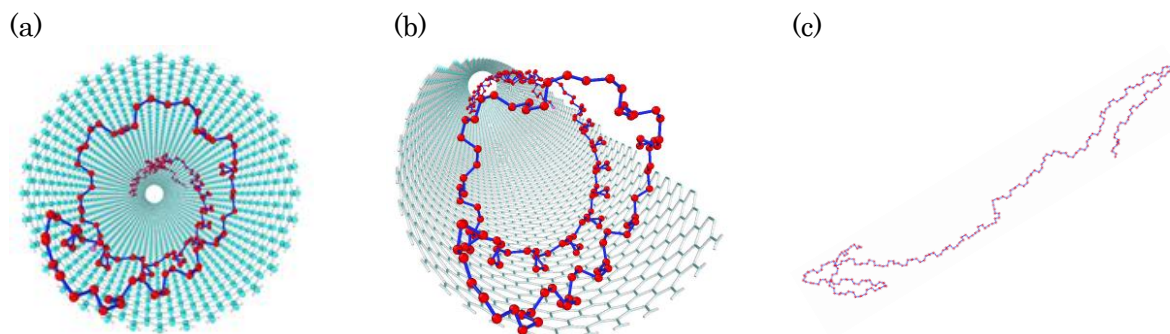


Fig.1 Snapshots of iPP with $n=120$ in CNT with $(m,n)=(32,0)$ at 350K. (a)top view, (b)side view without a part of CNT carbons, and (c) side view without CNT carbons.

3. 結果・考察

カイラル指数 $(m, n)=(32, 0)$ のCNTの場合について、350Kにおける分子鎖の様子をFig. 1に示す。この図から、iPPは、CNTに吸着しつつ、部分的に折りたたみCNTの軸に対してやや傾いた構造となることが分かる。発表では、CNTのカイラル指数とiPPの折りたたみ方向の関係やらせん構造の右/左巻きの選択性についての解析結果の報告も行う予定である。

【参考文献】

- 1) K. Lu, N. Grossiord, C. E. Koning, H. E. Miltner, B. van Mele, J. Loos, Carbon Nanotube/Isotactic Polypropylene Composites Prepared by Latex Technology: Morphology Analysis of CNT-Induced Nucleation. *Macromolecules* **2008**, 41, 8081.
- 2) L. Li, B. Li, M. A. Hood, C. Y. Li, Carbon nanotube induced polymer crystallization: The formation of nanohybrid shish-kebabs. *Polymer* **2009**, 50, 953.
- 3) J. R. Potts, D. R. Dreyer, C. W. Bielawski, R. S. Ruoff, Graphene-based polymer nanocomposites.

Polymer **2011**, 52, 5.

- 4) Y. Tong, Y. Lin, S. Wang, M. Song, A study of crystallisation of poly (ethylene oxide) and polypropylene on graphene surface. *Polymer* **2015**, 73, 52.
- 5) <https://lammmps.sandia.gov/>.
- 6) S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comp. Phys.* **1995**, 117, 1.
- 7) K. Hagita, S. Fujiwara, Structural formation of a quenched single isotactic-polypropylene chain through united atom molecular dynamics simulations. Submitted to *Polymer*.
- 8) J.-P. Ryckaert, G. Ciccotti, H. J. C. Berendsen, Numerical integration of the cartesian equations of motion of a system with constraints: molecular dynamics of *n*-alkanes. *J. Comp. Phys.* **1977**, 23, 327.
- 9) M. Tuckerman, B. J. Berne, G. J. Martyna, Reversible multiple time scale molecular dynamics. *J. Chem. Phys.* **1992** 97, 1990.