

H29 名古屋大学 HPC 計算科学連携研究プロジェクト成果報告書  
ReaxFF 法による高分子系材料の破壊に関する HPC 活用の基盤的準備研究  
萩田 克美（防衛大学校）

高分子分子材料は、産業用の素材材料として応用が期待されており、その開発研究は国民生活においても重要である。ポリエチレン（PE）は、分岐の程度の制御により、食品包装の低密度 PE や、高温に耐える高密度 PE などに、制御されている熱可塑性樹脂である。PE は、室温では部分的に結晶を形成することで、材料の機能を発揮している。延伸破壊では、結晶層の分解や、結晶層以外のアモルファス層での鎖のほどけに加えて、高分子鎖が切断される挙動が複雑にバランスしていると考えられ、分子論的なメカニズム解明は関心が高い。

高分子材料系の MD の標準的なソルバー LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov>) では、従来の古典 MD 法に加えて、反応力場分子動力学法 (ReaxFF 法) を実施することができる。ReaxFF 法は、ボンド等をあらかじめ設定せず、ボンドの結合切断反応を DFT 計算に基づいた多体ポテンシャルで動的に行う MD 計算手法である。*npj Computational Materials* 2 (2016) 15011 などのレビューで示されるように、広い応用が見込まれる。特に、無機物と有機物などの界面も精度良く扱うことができるため、材料の研究のブレークスルーと期待される。なお、ReaxFF で架橋反応を扱う場合、触媒を含めた忠実な再現が必要である。一方で、延伸による力学的な高速破壊は、バルクな素材の再現ができていれば、妥当な実施が可能である。

本研究課題は、ポリエチレン分岐鎖のラメラ結晶に対して、延伸破壊の ReaxFF 計算を行い、有効性・妥当性を示す先駆的な成果の創出を目指すことを目的としている。

H29 年度の名古屋大学 HPC 計算科学連携研究プロジェクト公募課題では、分岐ポリエチレンのラメラ結晶（図 1）に対する準備的シミュレーションを実施した。それに基づいて、HPCI 課題を申請した。プロダクトランは、H30 の HPCI 課題 (hp180016) で現在進行中である。

ReaxFF 法による一軸延伸破壊の MD を実施し、延伸速度に応じた破壊挙動を詳しく分析する予定である。

H29 の本公募課題で得られた基盤的な知見は、他の共同研究においても、有効に活用している。それらの知見やノウハウなどを、シミュレーションの実施やデータの解析において効果的に活用していくために、2018年7月18日（水）に、大阪大学 サイバーメディアセンター 吹田本館 Mishite にて、「高分子材料系における LAMMPS ReaxFF 計算の活用セミナー（勉強会）」を実施する予定である。

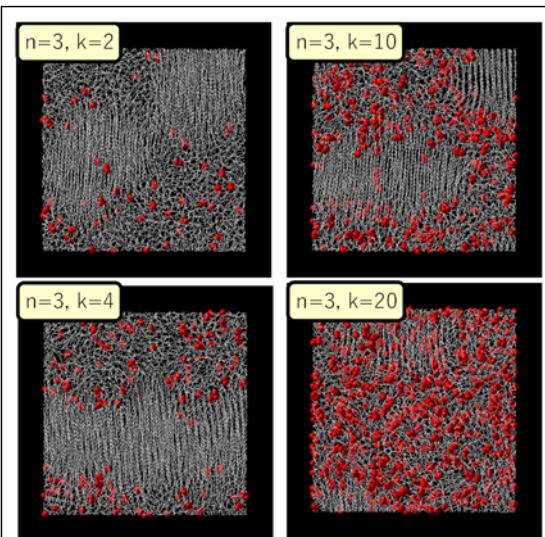


図 1 分岐したポリエチレンの結晶化状態の分岐状態依存性。分岐鎖の長さ  $n$ 、分岐の本数  $k$ 。