

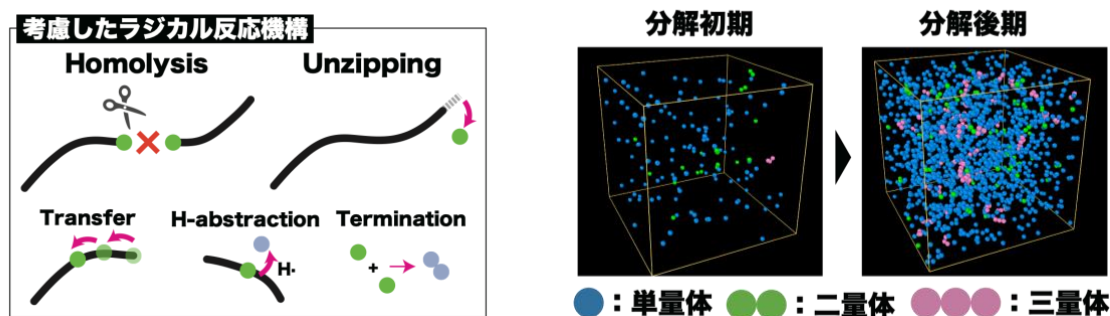
ケミカルリサイクルを加速する高分子の 新規熱分解シミュレーション手法の開発

名古屋大学大学院工学研究科 日本学術振興会特別研究員 PD 石田 崇人

本研究は、樹脂材料の炭素資源循環(リサイクル)を推進する計算科学的研究である。石油化学資源の枯渇がそう遠くない未来にやってくることはもはや世間の誰もが知るところになりつつある。そうなれば、廃プラスチックを再資源化することなく樹脂材料を作り出すことはできなくなるだろう。便利で身近な樹脂材料を未来社会においても引き続き利用可能とし、現代社会の well-being を担保するために本研究を遂行する。

ここでは、標準 Kremer-Grest モデル(Kremer and Grest, J. Chem. Phys., 1990)に熱分解反応が引き起こす分子鎖切断やラジカル再結合の素過程を導入する。粗視化分子動力学は原子1つ1つを取り扱う古典分子動力学とは異なり、複数の原子団を代表する1つのビーズで表現することで計算効率化が見込める。既往の熱分解反応速度モデルに矛盾なく、分解反応を粗視化モデルに挿入することでメソスケールの熱分解計算モデルを構築可能である(下図)。

上記のメソ系は一辺が数十 nm のシミュレーションボックス内での計算であり、分解ガスの脱離ダイナミクスを議論するにはスケールアップする必要がある。ここでは、メソ系を成すボックスを縦に数百個連結した大規模系を対象に、名古屋大学スーパーコンピューター不老を用いた大規模並列計算を行う。グランドカノニカルアンサンブルに基づき、各ボックス間は脱離ガスの受け渡しのみ行うものとして計算する。ここでは、熱分解反応速度モデルが構築されており、パッケージ用途で頻繁に用いられているポリエチレン、ポリプロピレン、ポリスチレンを対象とし、各々の反応速度モデルに応じた熱分解シミュレーションを実施する。計算結果の妥当性検証のために、計算で得られた分解脱離ガスのモノマー/ダイマー/トリマー比について熱分解ガスクロマトグラフィー分析結果と比較する。



【実用化が期待される分野】

樹脂材料の資源循環、ケミカルリサイクル、石油化学資源の利用削減に伴う自然再興