

ポリマーナノコンポジットの分子動力学

Cerius2ソフトウェアパッケージを使った分子動力学シミュレーションによって、アルキルアンモニウム型界面活性剤でイオン交換した2：1層状シリケートの静的、動的性質を研究しました。

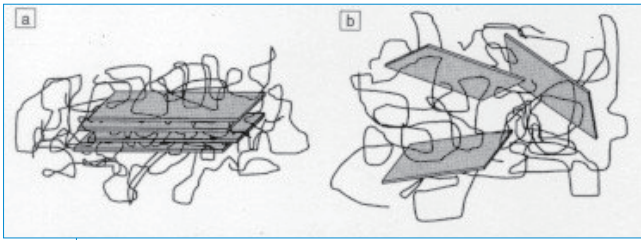


図1: 重合体層状シリケートナノコンポジット (PLSN) の形態図: (a) 層間に挿入されている; (b) 外部に配置されている[1]。

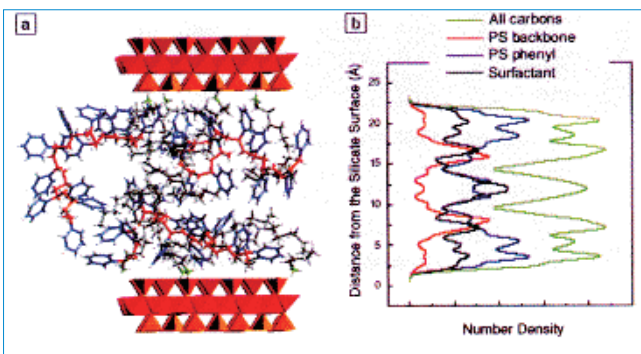


図2: (a) シリケート-界面活性剤-ポリスレンから成るナノコンポジットの分子動力学シミュレーション"snapshot"。(b) 距離関数としての炭素原子の各集合平均数密度。[1], [2]。

重合体シリケートナノコンポジットは優れた力学的熱的特性を持っているので、多様な用途に使用することができます。Cerius2ソフトウェアパッケージを使った分子動力学シミュレーションによって、アルキルアンモニウム型界面活性剤でイオン交換した2：1層状シリケートの静的、動的特性を研究しました。

実験的に測定された層間隔で系を研究することにより、コンピュータモデリングによる実験で、層間に挿入された界面活性剤分子の構造と動力学が明らかとなり、重合体シリケートナノコンポジット系の設計に役立てられます。

高性能ポリマーから日用品用のポリマーまで、多岐にわたる系のナノコンポジットを開発する上で、ごく簡単な構造-特性モデルでさえ十分ではないという大きな難問があります。こうした構造-特性モデルがないために、ナノコンポジットの進歩は、今なお実験に大きく依存しています。重合体ナノコンポジット (PNC) は、重合体とシリケートの内部界面面積が大きいことと、ナノエレメント間の大きさがナノスケールである点で、従来の複合材や充填プラスチックと異なります[1]。

モンテカルロ法および分子動力学シミュレーションは、原子レベルでのナノコンポジットの構造に関する情報を提供してくれます。図2は、ナノスケールの間隙または表

面付近に限定した場合、高分子鎖がサブナノメートル (ナノメートルより1桁小さい大きさ) 単位で区別される層を形成していることを示しています。これは、インターカレーション (層間挿入) の過程と、イオン伝導のような巨視的特性の

Organization

Cornell Center for Materials Research
Emmanuel PGiannelis research group
epg2@cornel.edu

Products

Cerius2 materials modules
Capabilities noavailable in BIOVIA Materials Studio

起源を理解するのに役立ちます。シミュレーションから得られる知識は、重合体-シリケート相互作用のさらなる活用のために使用することができます。

参考文献

1. R.A. Vaia and E.P. Giannelis. MRS Bulletin, May 2001, Volume 26, NO 5.
2. D.B. Zax, D.-K. Yang, R.A. Santos, H. Hegemann, E.P. Giannelis and E. Manias. J. Chem. Phys., 112, 2945, (2000).