

## 分子動力学を用いた熱応答性高分子に関する基礎研究

## Basic Study of Thermo-responsive Polymer with Molecular Dynamics

秋田工業高等専門学校, °阿部 竜・榊 秀次郎・上林 一彦

Akita National College of Technology, °Ryo Abe, Shujiro Sakaki and Kazuhiko Uebayashi

E-mail: last.noir@gmail.com

## 1. はじめに

熱応答性高分子であるポリ *N*-イソプロピルアクリルアミド (PNIPAAm) の水溶液は、転移温度前後において、透明・白濁の色相変化を引き起こす。この現象は coil-globule 転移に起因すると考えられている。この動的性質を実際に合成した高分子について透過率を観察し、分子動力学シミュレーション(MD)で得られた慣性半径との相関関係から材料設計における有用性を検討することが目的である。

## 2. 計算・実験

熱応答性高分子の低重合度(オリゴマー)における温度変化に対する挙動を MD 計算から調べた。また、数値計算のみならず、実際に高分子合成を行い、単分散の PNIPAAm ( $n=50$  程度)の高分子を作成した。PNIPAAm 水溶液の透過率を測定した(図 1)。

## 3. 結果

合成した高分子の透過率を、転移温度である下限臨界溶解温度(LCST)を確認し、この結果をもとに MD 計算を行った(図 2)。

MD 計算において、分子モデルは重合度が  $n=2, 4, 6, 8, 10$  のオリゴマーに設定し、温度と時間における挙動を調べた。高分子の丸まりの度合いを慣性半径として、経時変化を実際の LCST 前後の 300K と 310K において比較した結果を図 2 に示す。この MD 計算から、低い重合度においても高分子の粒径変化を確認し、材料設計の指針となる情報を得ることができた。

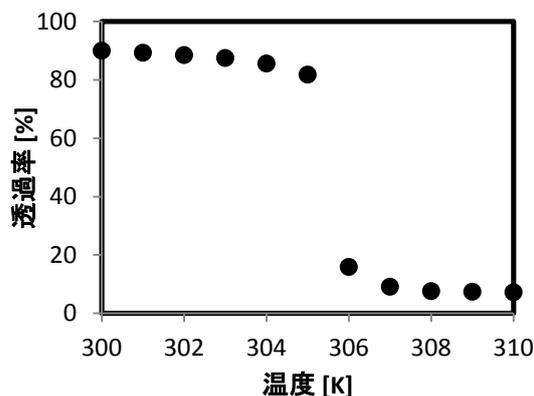


図 1 Mw=5000g/mol の PNIPAAm 水溶液の各温度における透過率測定。

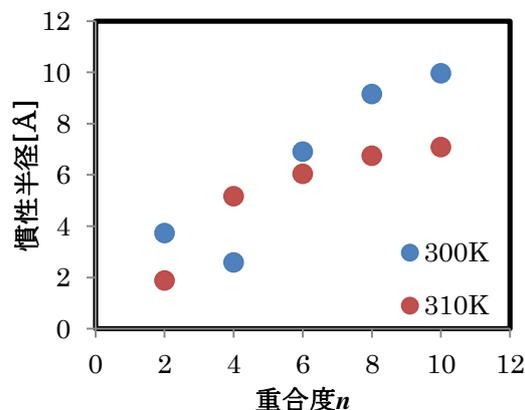


図 2 MD 計算から求めた各重合度のオリゴマーに対する慣性半径。

## 4. 今後の課題

本研究では、オリゴマーの挙動を実験と MD 計算から考察した。今後は、順を追って実際の高分子の重合度へ近づけ、計算と実験の双方の観点から、高分子の挙動を理解することである。MD 計算は、材料特性を理解する上で重要な情報となる。そのためには、実験において分子量の制御および粒径の測定が必要である。