

ポリカーボネートの降伏挙動とエンタルピー緩和

東亜合成 佐々木裕

2022 年 9 月 4 日

1 やりたいこと

大目標 接着剤の性能（強度や耐久性等の力学的、機械的特性）の発現機構を明確に理解したい。

中目標 その主成分である高分子材料のバルクでの力学特性を、特に破壊挙動に注目して整理したい。

小目標 高分子の特徴的な 2 つの状態について評価

- ガラス状態での破壊挙動
 - － ポリカーボネートの降伏挙動とエンタルピー緩和との関係について（本ドキュメント）
 - － 上記関係と破壊挙動との相関を明らかに（連続して実施予定）
- ゴム状態での破壊挙動
 - － 詳細については今後策定

2 実験

2.1 予備実験

- サンプル
- 試験条件
- データ処理

初期状態として、

任意の分岐数 f ($f = 3 \sim 6$) の結節点からなる規則構造を有するネットワークに対して、トポロジーモデルの「代数的連結性」を指標として以下のアルゴリズムでランダムな結合性を導入した。

1. 実空間で“8-Strand Unit Cell”の周期境界での連なり（ $2 \times 2 \times 2 = 8$ Cells）の初期構造を作成（Fig. 1）。
2. そのトポロジーモデルに対応するように、実空間の初期構造からストランドを除去。

2.2 MD シミュレーション

上記にて生成したランダムな結合性を有するネットワークを初期構造として、OCTA 上の COGNAC シミュレーターにより MD シミュレーションを行った。ユニットセル中でのストランドの末端間距離がホモポリマーと同等になるようにストランド長と多重度を調整し、緩和計算により平衡構造を得た。

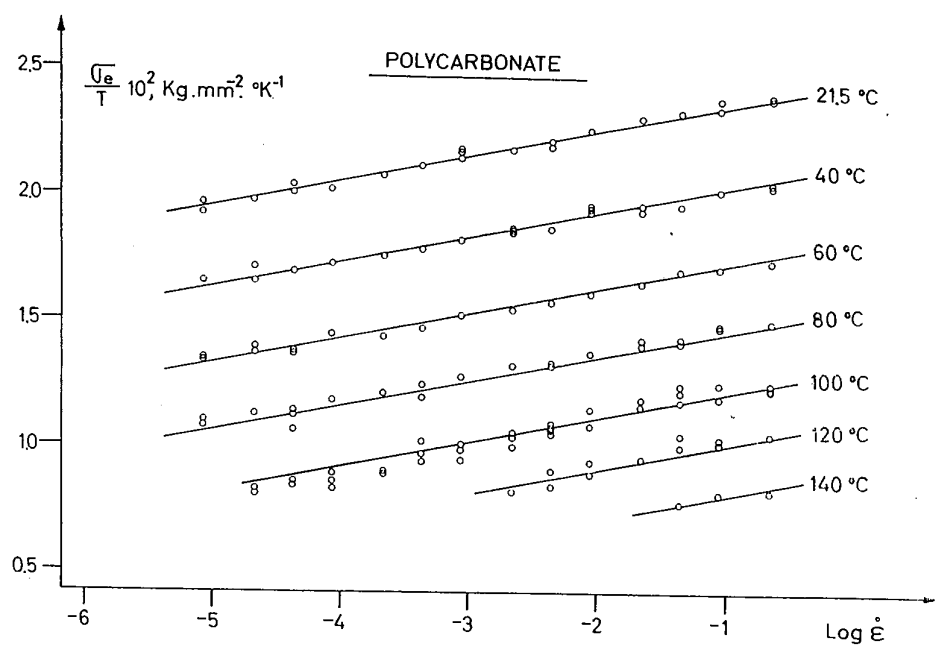


Fig. 1. Measured ratio of yield stress to temperature as a function of logarithm of strain rate ($\dot{\epsilon}$ in sec^{-1}). The set of parallel straight lines is calculated from eq. (1).

Fig.1 Copied from ref.1