東京大学大学院新領域創成科学研究科
E1b「全原子分子動力学計算を用いた
マルチロック型バイオポリマーの設計」

MS伊藤PJ

１．タフネス化設計

結晶性の生分解性ポリマーであるポリカプロラクトン（PCL）が取るラメラ構造に対し、弾性、降伏、破壊の分子機構を全原子分子動力学計算に基づいて明らかにする。また、ポリ乳酸（PLA）の非晶領域に侵入する水が力学特性にどのように影響するか、分子レベルで解析する。

２．分解設計

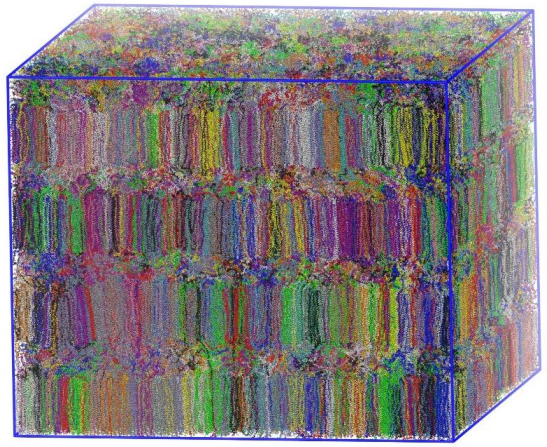
ポリエステル、ポリアミドの分解設計に向けて、東大鈴木グループによる金属クラスター触媒の触媒機能発現機構を量子化学計算に基づいて解明する。特に、分解反応に対するマルチロック機構の基本要素となる光と海水の役割について検討する。

３．データ管理

ImPACT資産を活用し、高分子分解・破壊標準データベース管理・入力ソフトを開発し、NIMSとの連携の下でこれを運用する。データベースにおいては、メタデータ形式としてタグツリー法を採用し、系統的なデータ管理を行う。

富岳

原子数：9,900,825
鎖重合度：2000
鎖数：275
長周期：10 nm
ラメラ厚み：7 nm
非晶厚み：3 nm



PCLのラメラ構造。1000万原子系

東京大学 THE UNIVERSITY OF TOKYO

Copyright © MOONSHOT Ito Project 2021 All Right Reserved.