

研究成果報告書

(公財)スガウェザリング技術振興財団 研究助成事業

令和6年度研究助成（第43回）

1. 研究課題 樹脂材料の屋外自然劣化及び各種ウェザリング法による促進劣化試験のモデリング
2. 研究者所属・氏名 名古屋大学・石田崇人
3. 研究期間 令和6年4月1日から令和7年3月31日まで
4. 研究成果の概要

（和文）申請者らは分子動力学ソフトウェア LAMMPSにREACTIONパッケージを組み合わせて、酸素飽和条件下で熱劣化を受ける樹脂材料の劣化シミュレーションを現実的な計算コストで実現する粗視化分子動力学ベースの計算モデルを開発した。具体的には、研究成果（Ishida et al. *Polymer Journal*, 2024）では仮想的な酸素飽和下においてウェザリングの振る舞いに重要な役割を果たすと思われるフリーラジカルの拡散性に関して議論し、フリーラジカルの拡散性依存して劣化の空間的進展や反応進展は定量的には影響を受けるが定性的なシナリオは影響を受けないことを示した。また研究成果(Ishida et al. arXiv: 2501.02898)は現在、国際論文誌にて査読中の結果であり、これまで酸素濃度が飽和している環境（実験室環境ではオートクレーブ環境で実現できる）を想定した計算を行ってきたが、現実の大気雰囲気での劣化の記述にモデルを昇華することを目的に酸素濃度依存性をパラメータとして受け付けるようモデルを更新した。その結果、大気雰囲気でのメソスケール劣化シミュレーションが実現できた。

加えて、これまでに申請者独自で保有していた、促進熱劣化作用を受ける熱硬化性ウレタン架橋樹脂の劣化反応速度論モデルを促進光暴露（290nm以下の波長をカットしたメタルハライドランプ照射）の劣化反応速度論に拡張し、熱硬化性樹脂のネットワーク構造の崩壊、すなわち構造的視点に基づく材料寿命予測にまでモデルを昇華した(Ishida et al.

Macromolecular Symposia, 2024).

（英文）The applicants developed a coarse-grained molecular dynamics (CGMD) model by integrating the REACTION package into LAMMPS, enabling efficient simulations of polymer degradation under oxygen-saturated conditions. In Ishida et al., *Polymer Journal* (2024), the model revealed that while the diffusivity of free radicals quantitatively affects degradation progression, the overall qualitative scenario remains unchanged.

Further, in Ishida et al., arXiv:2501.02898 (under review), the model was extended to include oxygen concentration as a parameter, allowing simulations under realistic atmospheric conditions.

Additionally, the applicants expanded their reaction kinetics model for thermosetting urethane degradation under thermal conditions to include photodegradation induced by metal halide lamps (>290 nm cutoff), enabling prediction of network breakdown and material lifetime (Ishida et al., *Macromolecular Symposia*, 2024).