(19)日本国特許庁(JP)　(12)公開特許公報(A)　(11)特許出願公開番号
特開2024-20867
(P2024-20867A)
(43)公開日　令和6年2月15日(2024.2.15)

(51)Int.Cl.		F I		テーマコード（参考）
G16C 20/30	*(2019.01)*	G16C	20/30	
G01N 33/44	*(2006.01)*	G01N	33/44	

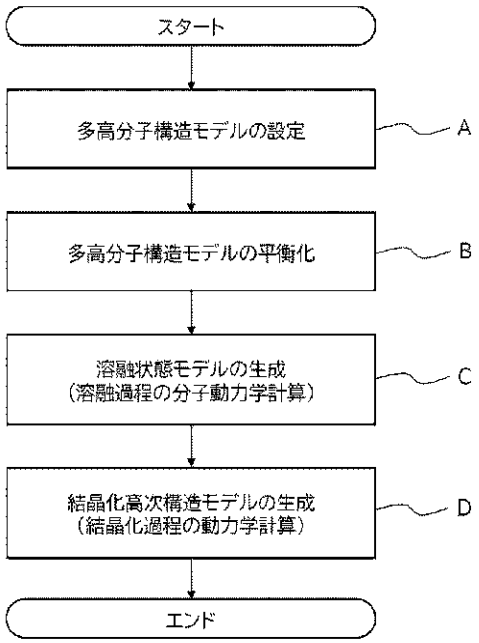
審査請求 未請求　請求項の数 9　ＯＬ　（全 25 頁）

(21)出願番号　特願2022-123383(P2022-123383)
(22)出願日　令和4年8月2日(2022.8.2)

（出願人による申告）平成３１年度（令和元年度、２０１９年度）、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構「ＮＥＤＯ先導研究プログラム／エネルギー・環境新技術先導研究プログラム／プラスチックの高度資源循環を実現するマテリアルリサイクルプロセスの研究開発」に係る委託研究、産業技術力強化法第１７条の適用を受ける特許出願

(71)出願人　598015084
学校法人福岡大学
福岡県福岡市城南区七隈８丁目１９番１号
(74)代理人　100197642
弁理士　南瀬　透
(74)代理人　100099508
弁理士　加藤　久
(74)代理人　100182567
弁理士　遠坂　啓太
(74)代理人　100219483
弁理士　宇野　智也
(72)発明者　八尾　滋
福岡県福岡市城南区七隈八丁目１９番１号
学校法人福岡大学内

最終頁に続く

(54)【発明の名称】結晶性高分子の結晶化高次構造モデルの生成方法、結晶性高分子の結晶化高次構造モデル生成システム、結晶性高分子の結晶化高次構造モデル生成性プログラム、ならびに結晶性高分子の物性

(57)【要約】
【課題】結晶性高分子の結晶化高次構造を精度よく再現できる、結晶性高分子の結晶化高次構造モデルの生成方法を提供する。
【解決手段】基本セル内に、解析対象の結晶性高分子の一本鎖ラメラ構造を複数配置し、一本鎖ラメラ構造を複数含む多高分子構造モデルを設定するステップ（Ａ）と、多高分子構造モデルを用いて、分子動力学計算を行い、多高分子構造モデルを平衡化するステップ（Ｂ）と、平衡化された多高分子構造モデルを用いて、結晶性高分子の融点以上の温度T_1の溶融過程の分子動力学計算を行い、溶融状態モデルを生成するステップ（Ｃ）と、生成した溶融状態モデルを用いて、T_1から結晶性高分子の融点よりも低い温度T_2まで冷却し、結晶化させる結晶化過程の分子動力学計算を行い、結晶化高次構造モデルを生成するステップ（Ｄ）と、を有する、結晶性高分子の結晶化高次構造モデルの生成方法。
【選択図】　図１