

畝山 多加志

名古屋大学大学院工学研究科
准教授

疑似自由度を用いたメソスケール粗視化モデリング

§ 1. 研究成果の概要

高分子をはじめとするソフトマターは原子レベルの構造だけでなく、ナノスケール(あるいはメソスケール)において階層的な構造を形成しており、マクロスケールにおける物性はナノ・メソスケールの階層構造を反映したものとなっている。そのため、高分子材料の物性を理解するには原子レベルのミクロスケールモデルではなく、より大きなスケールに着目した粗視化運動モデルを用いる必要がある。2019 年度の研究にて、過渡ポテンシャルを用いた新たな粗視化運動モデルである LETP (Langevin equation with transient potential) を導出・正当化することに成功した。LETP は複数の粒子を大きなスケールでまとめて見た際の粗視化自由度に加え、粒子に働く力を発生するポテンシャル自体を自由度とみなすナノ・メソスケールモデルであり、複雑な挙動を示す系を比較的単純かつ計算効率の良い形で記述することができる。LETP は既存の高分子の粗視化モデルの一般化ととらえることができ、高分子に限らずさまざまな系に適用できる。応用例として、LETP が複雑な拡散・緩和挙動を示す過冷却液体系に適用可能であることを示した。

