

力学機能のナノエンジニアリング
2019年度採択研究者

2020年度 実績報告書

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

2020年度は、2019年度に開発した過渡ポテンシャル理論の欠点を解消し、第一原理的に正当な形とするための改良理論を構築した。2019年度に開発した理論では過渡ポテンシャルの使用を部分的に正当化できるものの、Hamilton ダイナミクスから出発していないこと、過渡ポテンシャルに対する運動方程式が陽的に与えられないことが問題として残っていた。そこで、運動方程式から粗視化自由度の運動のみを抽出する射影演算子の方法を適用することで、Hamilton ダイナミクスから過渡ポテンシャルの導出を行った。この改良版理論により、第一原理的かつ陽的な形で過渡ポテンシャルを含む粗視化運動モデルを正当化することができた。さらに、既存の過渡ポテンシャルの理論の正当化、Langevin 方程式に対する射影演算子の適用方法の開発等も行い、さまざまな粗視化経路を確立した。

また、過渡ポテンシャルの枠組みを用いて半現象論に粗視化モデルの構築を試みた。過渡ポテンシャルの理論は平衡系における一般的な粗視化運動モデルの枠組みを与えるが、実際に興味ある系に第一原理的に適用するのは困難である。さらに、そのような系では非平衡状態をあらわに扱わねばならないことも多い。過渡ポテンシャルを非平衡系に拡張した例として、結晶性高分子固体のモデル化を試みた。不可逆に変化する過渡ポテンシャルを用いた粗視化モデルを構築しシミュレーションを行うことで、大変形した結晶性高分子にみられる構造変化を示す予備的データを得た。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Plateau Moduli of Several Single-Chain Slip-Link and Slip-Spring Models”, *Macromolecules*, vol. 54, No. 3, pp.1338-1353, 2021