

力学機能のナノエンジニアリング
2019年度採択研究者

2021年度 年次報告書

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

2021年度は2020年度に開発したミクロスケールのHamiltonianダイナミクスからのメソスケールの過渡ポテンシャルモデルの導出を整備し、論文として出版した。これまでの本研究課題での研究成果として、ミクロスケールの運動モデルの詳細によらずメソスケールでは過渡ポテンシャルを含む粗視化運動モデルにできることを確立できた。また、過渡ポテンシャルモデルをさらに粗視化することで、粗視化自由度の感じる摩擦係数や拡散性が環境に応じて時間とともに変わるゆらぐ拡散係数モデルへとつなげられることもわかった。これらの粗視化モデルはこれまで一般的に用いられてきた粗視化方法とは別の粗視化モデルを設計方法として有用となるものと期待される。

過渡ポテンシャルモデルの応用として、2020年度から開始した結晶性高分子の粗視化モデルの開発を引き続き行った。このモデルでは結晶性高分子の結晶部分を状態に応じて変化できる過渡ポテンシャルとしてモデル化する。結晶度や延伸方向等の条件を変えた一軸延伸シミュレーションを行い、結晶性高分子の一軸延伸実験で報告されている構造変化と応力-ひずみ曲線の典型的な挙動を定性的に再現することに成功した。

また、過渡ポテンシャルモデルの他の応用として、過冷却高分子のダイナミクスを考えた。2021年度は分子動力学シミュレーションを用いて、重合度や構成要素間の相互作用の異なる複数の高分子系に対して、幅広い温度条件で緩和弾性率(粘弾性緩和の指標)、Rouse緩和関数(形態緩和の指標)、拡散係数を求めた。どの系においても、緩和弾性率、Rouse緩和関数ともに温度を変えても緩和関数の形が同様でありマスターカーブを形成できることを見出した。しかしながら、温度依存性は共通ではなく、緩和弾性率はRouse緩和関数と拡散係数とは別の温度依存性を示すことがわかった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Uneyama, "Application of Projection Operator Method to Coarse-Grained Dynamics with Transient Potential", *Phys. Rev. E* **105**, 044117 (2022).
- 2) T. Uneyama, "Linear Response Theory of Scale-Dependent Viscoelasticity for Overdamped Brownian Particle Systems", *Nihon Reorogi Gakkaishi (J. Soc. Rheol. Jpn.)* **50**, in print.
- 3) Y. Masubuchi, Y. Doi, and T. Uneyama, "Effects of Slip-Spring Parameters and Rouse Bead Density on Polymer Dynamics in Multichain Slip-Spring Simulations", *J. Phys. Chem. B* **126**, 2930-2941 (2022).