

研究タイトル：

# 高分子の分子動力学シミュレーション



氏名： 小山 暁 / KOYAMA Akira E-mail: koyama@toyota-ct.ac.jp

職名： 准教授 学位： 博士(人間・環境学)

所属学会・協会： 日本物理学会, 日本高分子学会, 高分子計算機科学研究会, 物理教育学会

キーワード： 統計力学, 物性物理, 高分子物理, 分子シミュレーション, 物理教育

技術相談  
提供可能技術：  
・分子シミュレーションソフトの開発  
・物理教育・物理実験教育

## 研究内容： 高分子の結晶化・ガラス転移の研究

過冷却液体からの結晶化やガラス転移は、多くの物質で普遍的に見られる非平衡転移現象です。結晶化は一次転移現象、ガラス転移は動力学的な転移現象と考えられています。実験的な研究蓄積は膨大にありますが、これらを統一的に説明する理論の開発は、長く物性物理学の課題となっていて、いまだ成し遂げられていません。私は、結晶化やガラス転移に関する研究を、高分子系で行っています。

高分子は長くつながった分子構造を持つため、結晶化に時間がかかるので、その祖過程を検討するのに都合の良い物質です。また、代表的なガラス形成物質であり、容易にガラス化させることができます。さらに、構造が単純であるため、統計力学的な取り扱いが比較的簡単にできます。高分子は、実験的な研究成果をもとに結晶化やガラス転移の理論構築を目指すにあたって適した物質だといえます。

私は、これまで、高分子の分子シミュレーション的な研究を行い、シミュレーションで配向結晶化を実現する方法を開発しました(図)。また、自由エネルギー地形という概念を用いたガラス転移の理論構築に携わりました。高分子系の結晶化やガラス転移の研究を進め深く理解することで、結晶化やガラス転移の普遍性を説明する材料を得られるはずだと考えています。

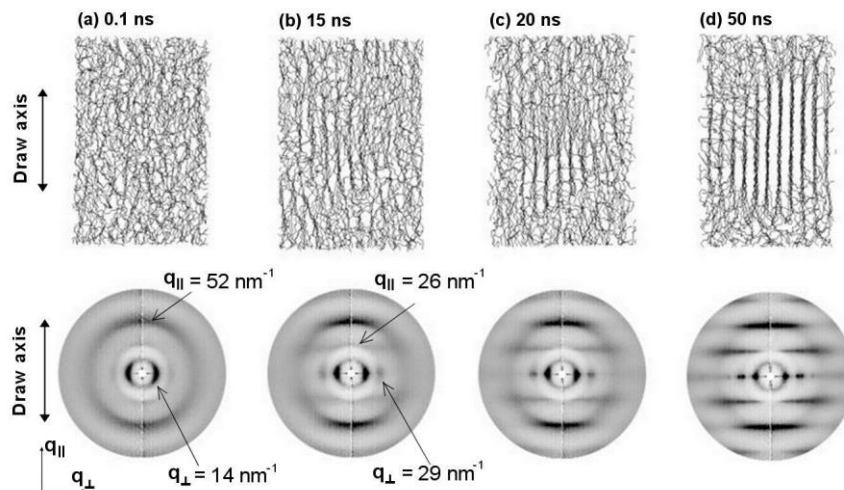


図. 高分子配向結晶化シミュレーションでの時間発展。上段が実空間、下段が逆空間のスナップショットである。

### 提供可能な設備・機器：

#### 名称・型番(メーカー)

各種物理実験機材
