

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_615@kurume-nct.ac.jp

職名： 准教授 学位： 博士（人間・環境学）

所属学会・協会： American Physical Society, 日本物理学会, 高分子学会, 分子シミュレーション学会, 日本物理教育学会

キーワード： 高分子物理学, 分子シミュレーション, 統計力学

 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,
- ・汎用分子シミュレーションソフトの利用
- ・分子シミュレーションによる分光分析の技術 ・逐次フーリエ変換の技術

研究内容： 高分子の結晶化・ガラス転移の研究

昨今の環境問題に対する国際情勢では、地球温暖化の問題を背景に、高分子材料の循環利用に期待が寄せられています。高分子系の結晶化やガラス転移を深く理解することで、日常生活に利用されている高分子材料の有効な循環サイクルが確立出来るものと期待できます。私は、こういった観点から、高分子材料の基礎物性の解明を行ってゆきたいと考えています。

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転移現象です。結晶化は一次相転移、ガラス転移は動力学的な転移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、結晶化やガラス転移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。

これまで、高分子系の分子シミュレーションを行い、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1）。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、ガラス状態で観測される低エネルギー励起（ボゾンピーク）の原因を調査しました。最近では、結晶化やガラス転移のダイナミクスを調べるために、新たな離散片側フーリエ変換の公式を導き、シミュレーションで分光分析を行う技術（図1）を提案しています。

研究に関連する事柄で、協力させて頂けるものがありませんでしたら、遠慮なくご相談ください。

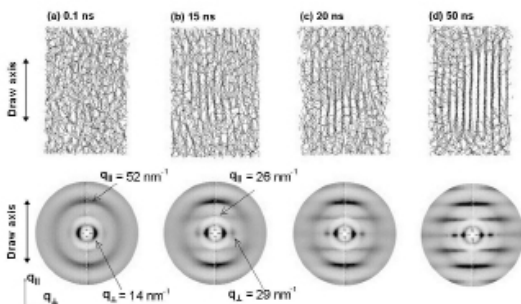


図1. 高分子配向結晶化シミュレーションでの時間発展。上段が実空間、下段が逆空間のスナップショットである。時刻が経過するに従い、結晶化が進むのが分かる。

(PRE 2002, J. Macro-mol. B 2003)

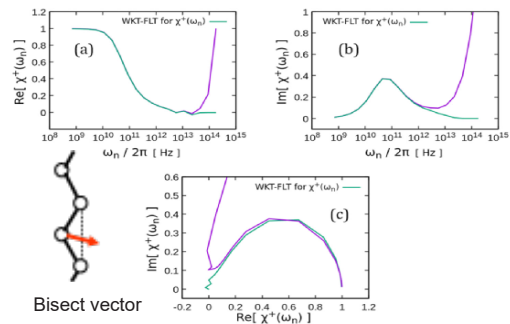


図2. 高分子熔融状態の Bisect vector の複素応答関数。ポリエチレンの分子動力学シミュレーションから計算した。紫線は従来の片側フーリエ変換の公式を用いており、高角振動数でエラーを生じている。緑線が新たな離散フーリエ変換の公式を用いており、高角振動数でエラーを生じている。緑線が新たな離散フーリエ変換によるものであり、エラーが修正されていることが分かる。(2020 PRE)

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