

研究タイトル：**分子シミュレーションを用いた  
高分子材料構造・物性の解析**



氏名：岩岡 伸之 / IWAOKA Nobuyuki E-mail: niwaoka@tsuruoka-nct.ac.jp

職名：講師 学位：博士(理学)

所属学会・協会：日本物理学会

キーワード：高分子、シミュレーション、粘弾性、緩和現象

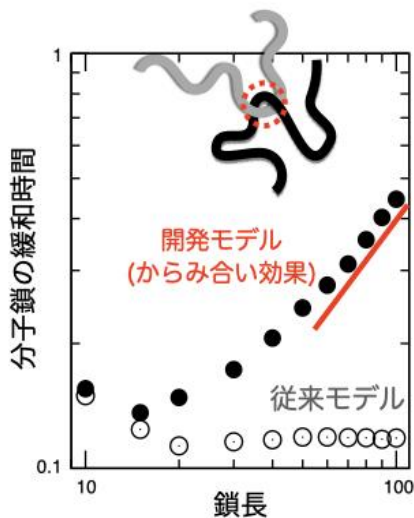
技術相談  
提供可能技術：高分子材料などに関する分子シミュレーション計算・解析技術

研究内容：

高分子材料を対象に、分子動力学や散逸粒子動力学といった分子シミュレーション法と統計物理学に基づく解析手法を用いて、分子鎖の動力学特性やナノ相分離構造に関する研究を行っています。我々の目では観ることのできない高分子材料のミクロな「構造」や「運動性」を分子スケールで調べ、マクロな「粘弾性/レオロジー」との物性相関を明らかにすることで材料設計や物性制御への貢献を目指しています。

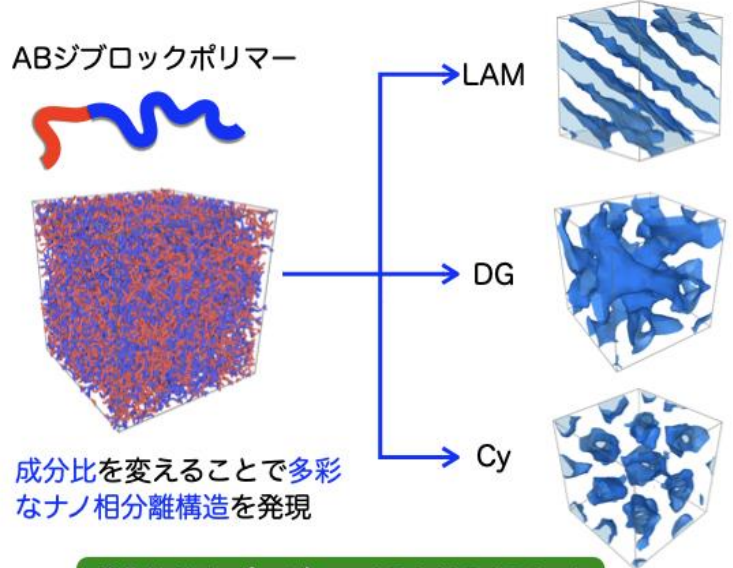


からみ合う高分子モデルの開発



高分子材料のレオロジー挙動や力学特性で重要な“からみ合い”効果を再現できる粗視化高分子モデルを開発

ミクロ相分離構造の分子シミュレーション解析



成分比やトポロジー、ABA/ABAB/…などの組み合わせにより、どんな構造が発現するか？またその材料物性は？

高分子材料のミクロとマクロの構造物性相関 ⇒ 材料設計・制御

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	
LAMMPS(ソフトウェア, <a href="http://lammps.sandia.gov">http://lammps.sandia.gov</a> )	
OVITO (ソフトウェア, <a href="https://ovito.org">https://ovito.org</a> )	

# Study on Physical Properties of Polymeric Materials Using Molecular Simulation

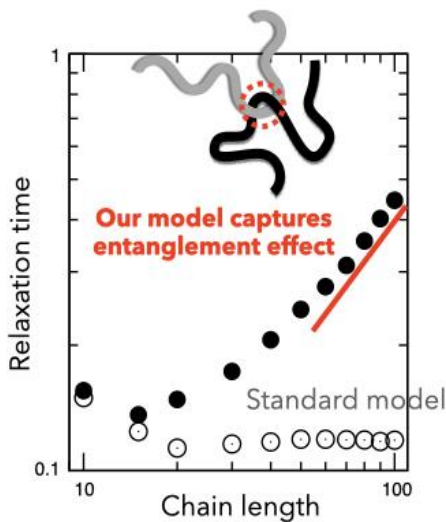


<b>Name</b>	Nobuyuki IWAOKA	<b>E-mail</b>	niwaoka@tsuruoka-nct.ac.jp
<b>Status</b>	Lecturer		
<b>Affiliations</b>	The Physical Society of Japan		
<b>Keywords</b>	Polymer, Simulation, Viscoelasticity, Relaxation phenomena		
<b>Technical Support Skills</b>	Analysis of polymeric materials by computer simulation such as molecular dynamics, dissipative particle dynamics, etc.		

## Research Contents

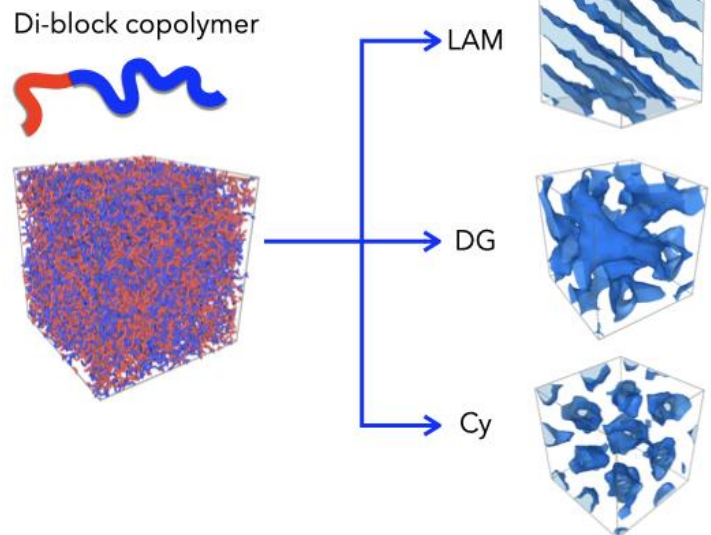


### Development of a model of polymer chain in DPD simulation



Development of a coarse-grained polymer model that can reproduce entanglement effect that plays important role in the rheological behavior and mechanical properties of polymeric materials.

### Molecular simulation analysis of microphase-separation of block copolymers



Morphology of the block copolymer depends on fraction of A segment, topology of polymer, etc.; how will the mechanical properties change??

Reveal correlation of microscopic structures and macroscopic properties of polymeric materials by molecular simulation

## Available Facilities and Equipment

LAMMPS (open software, <a href="http://lammps.sandia.gov">http://lammps.sandia.gov</a> )	
OVITO (open software, <a href="http://lammps.sandia.gov">http://lammps.sandia.gov</a> )	