

研究タイトル:

分子シミュレーションを用いた 高分子材料の構造・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の計算・解析技術

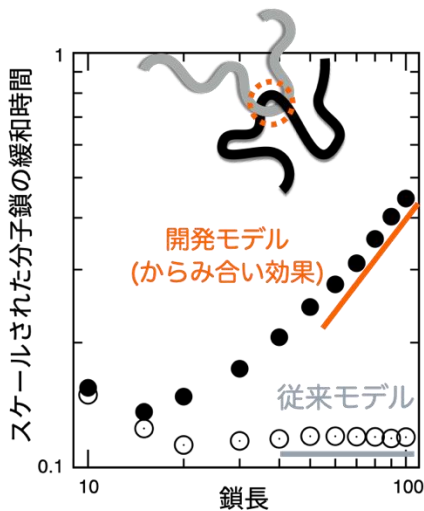
研究内容:

主に高分子材料を対象として、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。我々の目では直接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」とマクロな「粘弾性・レオロジー」といった物性の間の相関関係を分子スケールで明らかにし、工学における材料設計や物性制御への貢献を目指しています。

9 産業と技術革新の基盤をつくろう



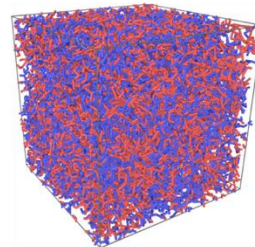
からみ合う高分子モデルの開発



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

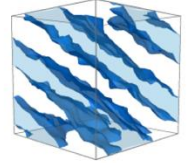
ミクロ相分離構造の分子シミュレーション解析

AB型ブロックコポリマー

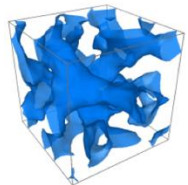


成分比を変えることで多彩なナノ相分離構造を発現

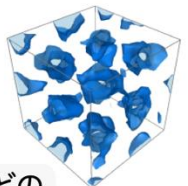
LAM



DG



Cy



成分比やトポロジー、ABA/ABAB/…などの組成の調整により、どのようなミクロな構造が発現し、マクロな材料物性はどうか？

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, <http://lammps.sandia.gov>)

OVITO (ソフトウェア, <https://ovito.org>)

Study on Physical Properties of Polymeric Materials via Molecular Simulations

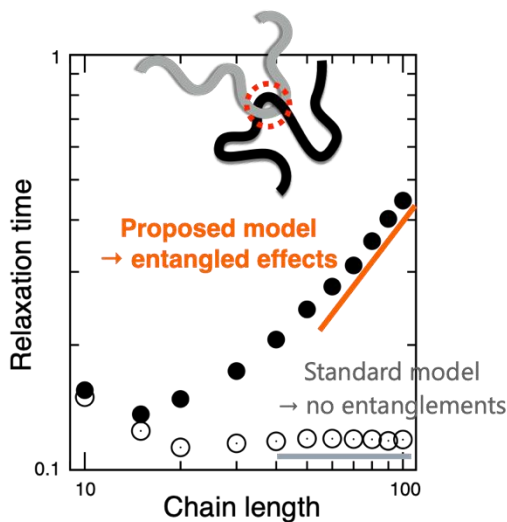


| | | | |
|---------------------------------|---|---------------|----------------------------|
| Name | Nobuyuki IWAOKA | E-mail | niwaoka@tsuruoka-nct.ac.jp |
| Status | Lecturer | | |
| Affiliations | The Physical Society of Japan | | |
| Keywords | Polymer, Simulation, Viscoelasticity, Relaxation phenomena | | |
| Technical Support Skills | Analysis techniques of polymeric materials via computer simulations with molecular dynamics, dissipative particle dynamics methods. | | |

Research Contents

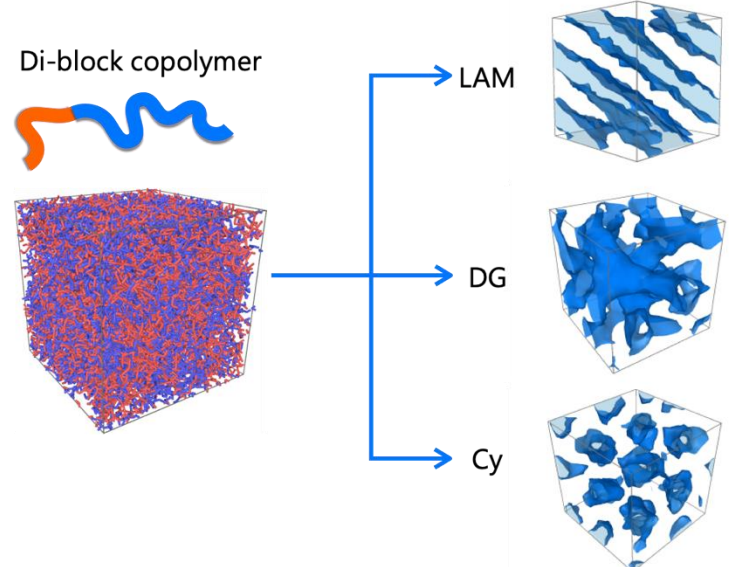


Development of a polymer model in dissipative particle dynamics method



Development of a coarse-grained polymer model which captures entanglements that plays important role in the rheological and mechanical properties of polymeric materials.

Molecular simulation of microphase-separation of block copolymers



What morphologies develop and what are the material properties depending on the fraction of segments, topology, composition, etc of block copolymers.

Reveal correlation between microscopic structures and macroscopic physical properties of polymeric materials via molecular simulations

Available Facilities and Equipment

| | |
|--|--|
| LAMMPS (open software, http://lammps.sandia.gov) | |
| OVITO (open software, http://lammps.sandia.gov) | |
| | |
| | |