

## 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などの構造・物性の解析

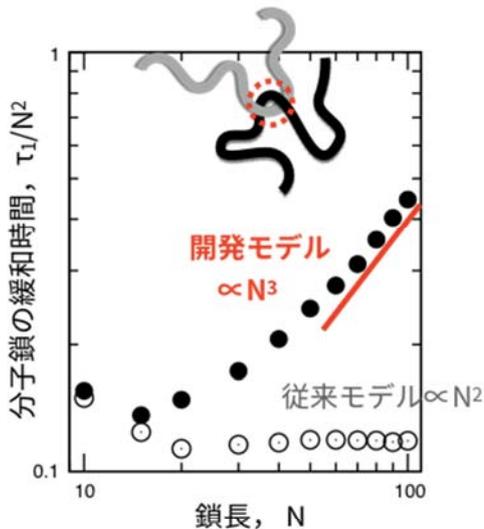


氏名：	岩岡 伸之 / Nobuyuki IWAOKA	E-mail：	niwaoka@tsuruoka-nct.ac.jp
職名：	特命助教	学位：	博士(理学)
所属学会・協会：	日本物理学会		
キーワード：	高分子、分子シミュレーション、粘弾性、緩和現象		
提供可能技術：	高分子材料などに関する分子シミュレーション計算・解析技術		

### 研究内容： 高分子材料の分子レベルにおけるシミュレーション解析

分子動力学法や散逸粒子動力学などの分子シミュレーション技術と統計物理学に基づく解析手法を用いて、高分子材料のナノ相分離構造や動力学物性(特に分子鎖の緩和現象やレオロジー)に関する研究を進めています。高分子材料の構造や運動性を我々の目では観ることのできないマイクロなスケールで解析し、マクロな物性「粘弾性(レオロジー)」との相関関係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。

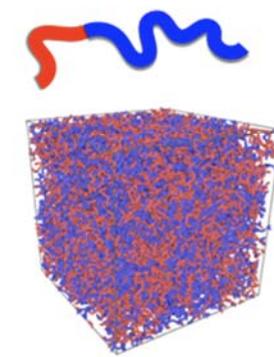
#### からみ合う粗視化高分子モデルの開発



高分子材料のレオロジーなどの力学特性で重要な“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

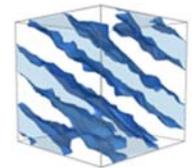
#### マイクロ相分離構造の分子シミュレーション解析

ABブロックポリマー

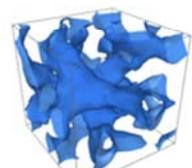


成分比を変えることで多彩なマイクロ相分離構造を発現

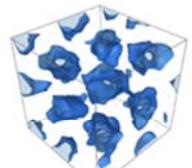
LAM



Gy



Cy



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? またそのレオロジー挙動は?

高分子材料のマイクロとマクロの構造物性相関 ⇒ 分子設計・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> )	
GROMACS (ソフトウェア, <a href="http://www.gromacs.org">http://www.gromacs.org</a> )	