

令和 2 年 5 月 21 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H01152

研究課題名(和文) 高分子ナノ粒子混合系における分子ダイナミクスの計算手法開発

研究課題名(英文) Development of prediction methods for polymer dynamics in nanocomposites

研究代表者

増淵 雄一 (Masubuchi, Yuichi)

名古屋大学・工学研究科・教授

研究者番号：40291281

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 35,100,000円

研究成果の概要(和文)：高分子と固体粒子を混合したコンポジット材料は利用が進んでいるが、成形加工等で重要なダイナミクスに関する理解は進んでおらず、従来の分子シミュレーションでも扱いが困難である。

本研究では高分子に固体粒子を含む系の長時間ダイナミクスを扱える新たな分子シミュレーション法および分子理論の開発を目指した。申請者が独自に開発している高分子液体のモデルである多体スリップスプリングモデルを拡張し、従来のいわゆる粗視化分子動力学法に対して数百倍の高速計算ができる手法を開発した。シミュレーションで得られる知見を利用して管模型を拡張した分子理論も構築を目論んだ。検証のためのレオロジー計測実験も行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高分子に微細な固体粒子を含む、高分子ナノコンポジットのダイナミクスを計算するシミュレーション手法が開発できた。この手法により同系の粘度などのマクロな流動物性の解析が可能であり、また流動中に起きる構造変化も観察できる。このような計算は従来の手法では実用的に困難である、本手法が工学的な材料開発に応用されれば、様々な機能性材料の開発や加工条件の検討に役立つものと考えられる。

研究成果の概要(英文)：Polymer composites have been widely used in the industry. However, the dynamics inside have not been fully clarified yet, though it dominates the processability. The reason is that the conventional theories and the molecular simulation techniques are not practically useful for the analysis of the cooperative motion of polymers and fillers.

In this study, we aimed to develop a new molecular simulation method and a molecular theory that can deal with the long-time dynamics of polymer nano-composites. We have extended the multi-chain slip-spring (MCSS) model, which has been being developed in our group. From the simulation results, we have constructed a preliminary molecular model based on the tube theory to consider the effects of nano-particles on the polymer motion via the idea of constraint release. To evaluate the developed simulations and the theory, we have conducted the experiments as well.

研究分野：レオロジー

キーワード：高分子 ナノコンポジット ダイナミクス 粘弾性 レオロジー 粘度 シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

高分子と固体粒子を混合したコンポジット材料は広く利用されているが、加工に重要なダイナミクスへの理解は進んでいない。粒子分散液および高分子液体それぞれの研究は進んでいるが、粒子と高分子の運動がカップルする系はほとんど手付かずで未解決の問題も多い。例えば Mackay ら (Nat Mater 2003 2:762-766) は、ポリスチレン (PS) のメルトに、PS 分子と同サイズの PS ゲルビーズを添加すると、粘度が低下する現象を報告した。通常粒子分散液では固体粒子の体積分率が上がれば粘度は上昇する (Einstein の理論 (Annalen der Physik 1906 19:289-306))。Mackay らの結果はこのような一般的な理解に反するものである。Mackay らの実験に対する追試は多数行われ、妥当性が確認されている報告がある。さらに BASF では粘度を低下させる成形助剤としての微粒子を開発して販売するまでになっている。しかし Mackay らは粘度のみを報告しており、分子運動の詳細を与える粘弾性について結果を明示していないことから、メカニズムについては不明なままである。

系の分子レベルでのダイナミクスを調べるには分子シミュレーションが便利であるが、高分子と粒子の運動がカップルする系に適用できる実用的な手法はない。理論も未開発である。原子レベルの分子シミュレーションで扱える時間範囲はたかだか数ナノ秒でしかなく、高分子や微粒子の遅い運動 (特徴時間が数ミリ秒から数百秒) をトレースできない。長時間現象を扱うための手法として粗視化分子動力学法 (K. Kremer and G. Grest 1990 J. Chem. Phys. 92:5057-5086) があるが、これでもミリ秒以下の現象を追うのが限界である。散逸粒子動力学 (DPD) 法を使うとより長時間の計算が可能となるが、DPD 法は高分子のからみあい効果が入らない (G. Pan and C. Manke, Int. J. Mod. Phys. B 2003 17:231-235)。高分子の長時間ダイナミクスを記述する理論モデルとして管模型 (M. Doi and S. F. Edwards, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1978 274:1789-1801) が知られているが、粒子を混在させた系への拡張はなされていない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、高分子に固体粒子を含む系の長時間ダイナミクスを扱える新たな分子シミュレーション法および分子理論を開発することであった。申請者が独自に開発している高分子液体のモデルである多体スリップスプリングモデルを拡張し、従来のいわゆる粗視化分子動力学法に対して数百倍の高速計算ができる手法を開発することを目指した。シミュレーションで得られる知見を利用して管模型を拡張した分子理論も構築することを目論んだ。もともとは検証を目論んで、レオロジー計測実験も行った。

3. 研究の方法

申請者がこれまでに開発してきた、高分子のからみあい運動を数理モデル化して高分子の多体運動を高速に計算する独自のシミュレーション手法を、固体粒子を含む系に拡張した。申請者は高分子間のからみあいのダイナミクスに注目し、それ以外の自由度をからみあいのパラメータ (特徴時間と特徴長さ) に押し込めたモデル、プリミティブチェーンネットワーク (PCN) モデル (J. Chem. Phys. 2001 115:4387-4394) および多体スリップスプリング (MCSS) モデル (J. Chem. Phys. 2012 137:154902) を開発し、基盤研究 B や JST-さきがけ、JST-CREST などでも成果をあげている。本研究ではこのうち MCSS モデルを固体粒子を導入できるように拡張した。

シミュレーションで得られる知見に基づいて、管理論を拡張して微粒子が混在する系のダイナミクスを記述する分子理論も構築した。申請者は DNA と PS ナノ粒子を用いた実験により、微粒子が高分子ダイナミクスに与える影響は管理論における Rouse-CR 型のダイナミクス (W. Graessley, Adv. Polym. Sci. 1982 47:67-117) と類似することをすでに見出している (J. Polym. Sci. B Polym. Phys. 2009 47:1103-1111)。この発見に基づけば、高分子の管理論における束縛解放因子に粒子の影響を押し込められる。上記のシミュレーションで系の運動を調べ、このような考え方を検証するとともに、理論の定式化を行った。

シミュレーションと理論の検証のため、文献の実験データとの比較を行うほか、不足しているデータを補うために申請者のグループでもレオロジー実験を行った。

4. 研究成果

1) MCSS モデルの拡張

MCSS モデルは図 1 に示すように Rouse 鎖を仮想バネでつないだモデルである。ビーズ 1 個が分子量 1000 程度の部分鎖に相当する。Rouse 鎖自体には相互作用はなく、そのままでは鎖は互いにすりぬけるが、仮想バネを加えることですり抜けを抑制でき、からみあい系

を扱える。MCSS モデルは系の自由エネルギーを書くことができるので、自由エネルギーから平衡状態近傍のダイナミクスはすべて記述できる。そのようにして得た系の運動方程式を用いて計算したところ、従来の排除体積効果を考慮したビーズスプリングモデル（いわゆる Kremer-Grest モデルに対して数百倍の効率で長時間の粘弾性応答を得られることがわかっている。オリジナルの MCSS モデルは（からみあいを除くと）分子間相互作用がない。これを取り入れるために散逸粒子動力学法 (DPD) と組み合わせた拡張を行った。DPD との組み合わせにより粒子間相互作用と流体力学的相互作用が導入され、運動量が保存されて高分子溶液のダイナミクスが扱えるようになった。本研究では、この DPD 法に基づく方法を応用した。Mackay らの論文にしたがって高分子を分子内でゲル化させて微粒子を作成した（図 1 の青で示されたビーズ塊）。このように作成した微粒子と高分子の間で統計的に仮想バネを導入した。この仮想バネの生成消滅確率は相互作用ポテンシャルの活性化エネルギーに対応する。

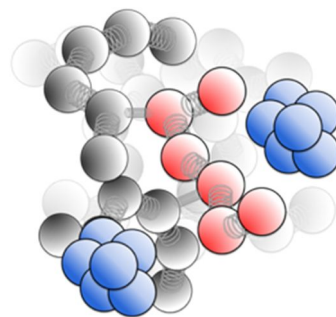


Figure 1 Schematic of the model

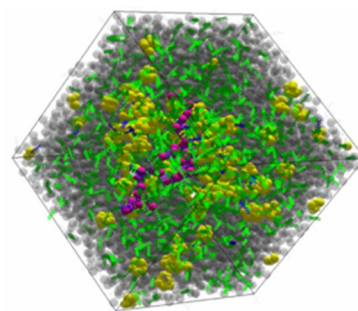


Figure 2 Typical snapshot of the composite simulation

図 2 にシミュレーションのスナップショットを示す。高分子間に設定した仮想バネは、平均的には高分子間に弱い引力として作用する。このため、仮想バネの密度が高いときには、DPD 相互作用を無熱系（すなわち高分子-高分子、ゲル-ゲル、高分子-ゲル間で同じ DPD 相互作用を設定）としても、高分子間の相互作用が他を凌駕するため、高分子とゲル球がマクロに相分離する。仮想バネの密度がおおよそ高分子セグメント密度の 1/3 となる場合には、図 2 のようにゲル球がある程度均一に分散する状態が得られた。図 2 のような分散状態において、高分子とゲル球の間に種々の条件で仮想バネを導入してダイナミクスを調べた。

図 3 に線形緩和弾性率 $G(t)$ を示す。 $G(t)$ は Green-Kubo 公式に基づいて、平衡状態での応力揺らぎの相関関数から得た。高分子セグメントとゲルセグメントの間に仮想バネを導入しない場合（赤の実線）は、コンポジットの $G(t)$ の緩和がメルト（黒の実線）よりも早くなった。この結果は Mackay らの報告と矛盾しない。我々はすでに、同様の手法で高分子溶液のダイナミクスを計算し、溶媒 DPD 粒子を導入すると高分子感のからみあいが希釈されて緩和が加速することを報告している。ゲル球であったとしても溶媒と同様のからみあい希釈が起きていると考えられる。一方、高分子セグメントとゲルセグメントの間に仮想バネを導入した場合（赤の破線）には、 $G(t)$ の緩和はメルトよりも遅くなり、ほとんどゲル化する場合もあった。これらの場合はゲル球が動的な架橋として作用していると考えられる。いずれの結果も直感的に理解しやすく実験とも整合しており、手法そのものの妥当性を示している。実験との整合性を詳細に検討するには、この線形粘弾性関数を比較すればよいのだが、後述する実験的な困難が現出したために本研究の期間内では未達となった。

2) 管理論の拡張

ポリスチレンメルトに POSS を分散させた系において 図 4 のように Mackay らの報告と同様に粘度の減少が見られる場合があった。すなわち、ガラス域とゴム状平坦域では POSS の影響が見られず、流動末端域でのみ分子運動の加速が見られた。この様子を管理論の枠内で説明するには束縛解放に粒子の影響を押し込んで考えればよい。すな

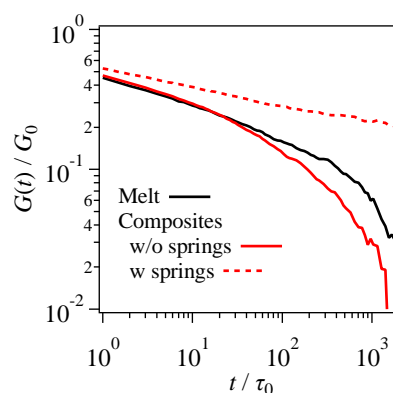


Figure 3 Linear relaxation

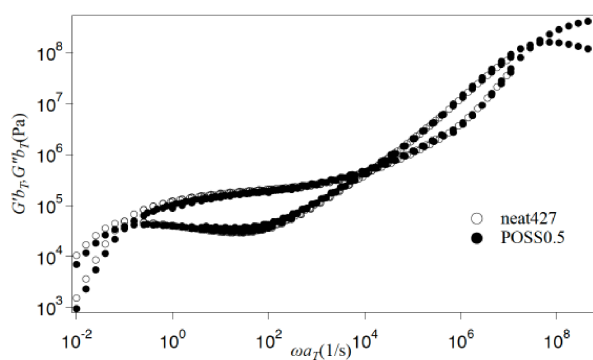


Figure 4 Linear viscoelasticity of PS and its POSS composite

わち固体微粒子分散系の線形緩和弾性率は以下のようにかける． $G(t) = G_N\varphi(t)R(t) + G_p(t)$ ここで G_N は平坦部弾性率， $\varphi(t)$ は管残存確率， $R(t)$ は束縛解放確率， $G_p(t)$ は微粒子の緩和項である．微粒子の量が少ないことから $G_p(t)$ の項を無視すると，微粒子の影響は $R(t)$ に押し込められる．この考え方に基づいて，管模型の一つである Likhtman-McLeish モデル (Macromolecules 2002 35:6332-6343) で結果を解析したところ，束縛解放パラメータを変更することで POSS 分散系とニートの PS メルトの違いを説明できた．この考え方の妥当性を検証するには，高分子と粒子を系統的に変えた実験を行い，その組み合わせと $R(t)$ の関係を明らかにすればよい．これを目論んで様々な実験を行ったが，以下で述べるように実験的な困難が現出し，本研究の期間内では未達となった．

3) レオロジー実験

上記のように，分子モデル構築のためには，粘度ではなく，線形粘弾性関数の比較が必要である．このため本研究においては配分いただいた研究費により化学的な実験を実施する環境を整え，種々の高分子ナノコンポジット系で系統的な実験を行った．その結果，先行研究で報告がある粘度低下を再現することは非常に困難であることがわかった．その原因は，結果に対する試料調整条件の影響が非常に大きく，再現性を確立することが困難なためである．

我々は先行研究 (Tuteja et al, Macromolecules 2005 38: 8000-8011) を再現することを目論み，ポリスチレンに C60 を混合した系の粘度を計測した．しかし，平衡化した系では，図5に示すように，結果は Einstein 則を満たすものばかりであり，先行研究のような粘度低下を見ることができなかった．図4の POSS 粒子を混合した場合のように粘度低下を示すこともあったが，再現性を取ることは困難である．

この結果から，粘度低下が起きるのは，系がある特定の非平衡状態にあるときに限られるものと考えられる．我々は研究の企画段階での文献調査で，図4のような粘弾性スペクトル $G(t)$ の報告がほとんどないが，あっても不十分であることに疑問を持っていた．その理由が図らずも明らかとなった．

なお顕微鏡や散乱実験による構造解析も試みたが，系の特性長が種々の観察に適しておらず，十分な結果が得られなかった．

4) まとめ

当初の目論見通り，粒子分散系のダイナミクスを高速に計算するための分子シミュレーション手法は開発できた．また粒子分散系における高分子の運動を管模型の枠内で記述するための方向性もわかった．しかし，これらの検証のためには実験データが必要である．このことからポリスチレンに POSS や C60 などを混合したナノコンポジットを作成し，自前で実験を行った．その結果，先行研究を再現することはできなかった．所与の研究期間で分かったことは，先行研究の結果は平衡状態では再現不可能なことである．我々は，先行研究のような粘度低下は，系がある特殊な準平衡状態にあるときに実現するものと考えている．

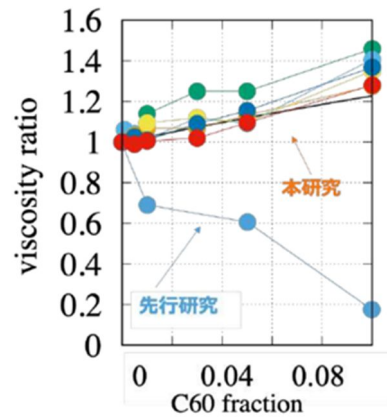


Figure 5 Viscosity ratio of PS/C60 composites with various PS molecular weights

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Masubuchi Yuichi	4. 巻 51
2. 論文標題 Multichain Slip-Spring Simulations for Branch Polymers	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 10184 ~ 10193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.8b01739	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Masubuchi Yuichi, Uneyama Takashi	4. 巻 88
2. 論文標題 Comparison among Multi-Chain Simulations for Entangled Polymers under Fast Shear	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ECS Transactions	6. 最初と最後の頁 161 ~ 167
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1149/08801.0161ecst	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamamoto Tetsuya, Masubuchi Yuichi, Doi Masao	4. 巻 9
2. 論文標題 Coil-globule transitions drive discontinuous volume conserving deformation in locally restrained gels	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 2062-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-018-04533-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Masubuchi Yuichi, Uneyama Takashi	4. 巻 14
2. 論文標題 Comparison among multi-chain models for entangled polymer dynamics	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 5986 ~ 5994
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8SM00948A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tassieri Manlio, Ramirez Jorge, Karayiannis Nikos Ch., Sukumaran Sathish K., Masubuchi Yuichi	4. 巻 51
2. 論文標題 i-Rheo GT: Transforming from Time to Frequency Domain without Artifacts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 5055 ~ 5068
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.8b00447	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Matsumiya Yumi, Watanabe Hiroshi, Masubuchi Yuichi, Huang Qian, Hassager Ole	4. 巻 51
2. 論文標題 Nonlinear Elongational Rheology of Unentangled Polystyrene and Poly(p-tert-butylstyrene) Melts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 9710 ~ 9729
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.8b01954	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Takeda Keiko, Sukumaran Sathish Kumar, Sugimoto Masataka, Koyama Kiyohito, Masubuchi Yuichi	4. 巻 46
2. 論文標題 Re-Examination of the Effect of the Stretch/Orientation-Induced Reduction of Friction under Equi-Biaxial Elongational Flow via Primitive Chain Network Simulation?Using?Two?Definitions?of?Orientation?Anisotropy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nihon Reoroji Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 145 ~ 149
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1678/rheology.46.145	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Masubuchi Yuichi, Takata Hiroto, Amamoto Yoshifumi, Yamamoto Tetsuya	4. 巻 46
2. 論文標題 Relaxation of Rouse Modes for Unentangled Polymers Obtained by Molecular Simulations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nihon Reoroji Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 171 ~ 178
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1678/rheology.46.171	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Kazuaki Z., Yamato Nobuyoshi, Yasuoka Kenji, Masubuchi Yuichi	4. 巻 43
2. 論文標題 Critical test of bead-spring model to resolve the scaling laws of polymer melts: a molecular dynamics study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 1196-1201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2017.1334883	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masubuchi Yuichi, Pandey Ankita, Amamoto Yoshifumi	4. 巻 45
2. 論文標題 Inter-Chain Cross-Correlation in Multi-Chain Slip-Link Simulations without Force Balance at Entanglements	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nihon Reoroji Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 175-180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1678/rheology.45.175	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yuichi Masubuchi, Ankita Pandey, Yoshifumi Amamoto and Chen-Yang Liu	4. 巻 13
2. 論文標題 Primitive chain network simulations of probe rheology	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 6585-6593
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7SM01229B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Takahashi Kazuaki Z., Nishimura Ryuto, Yamato Nobuyoshi, Yasuoka Kenji, Masubuchi Yuichi	4. 巻 7
2. 論文標題 Onset of static and dynamic universality among molecular models of polymers	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 12379
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-08501-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Masubuchi Yuichi, Pandey Ankita, Amamoto Yoshifumi, Uneyama Takashi	4. 巻 147
2. 論文標題 Orientational cross correlations between entangled branch polymers in primitive chain network simulations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 184903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5001960	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計37件 (うち招待講演 16件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi, Giovanni Ianniruberto and Giuseppe Marrucci,
2. 発表標題 Stress undershoot of entangled polymers under fast startup shear flows in primitive chain network simulations
3. 学会等名 Annual European Rheology Conference (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 草田慧、天本義史、松島智、山本哲也、増淵雄一
2. 発表標題 ナノ粒子を分散させた種々のポリスチレンメルトの粘弾性
3. 学会等名 日本レオロジー学会第45年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 夏目享治、天本義史、増淵雄一、山本哲也
2. 発表標題 種々の塩濃度下で高分子電解質がグラフトされたコロイド粒子表面とグラフトされていないコロイド粒子表面の相互作用
3. 学会等名 日本レオロジー学会第45年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Multi-Chain Slip-Spring Simulations for Entangled Polymers
3. 学会等名 The 34th Polymer Processing Society Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Multi-chain Slip-spring Simulations for Branch Polymers
3. 学会等名 The 67th Annual Meeting of the Society of Polymer Science
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 高分子の多階層計算はどこまで可能か
3. 学会等名 第56回高分子材料自由討論会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 高分子の粗視化モデリングと有用性
3. 学会等名 第3回計算科学・シミュレーション・実験の融合による新たな材料開発研究会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Detailed Comparison among Multi-Chain Simulations for Entangled Polymers
3. 学会等名 First International Conference on 4D Materials and Systems (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一, 畝山多加志
2. 発表標題 からみあい高分子の多体モデル間の比較
3. 学会等名 第67回高分子討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 夏目享治, 畝山多加志, 増淵雄一, 山本哲也
2. 発表標題 高分子電解質がグラフトされたコロイド粒子間の相互作用の理論解析
3. 学会等名 第69回コロイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Multi-chain Simulations of Entangled Polymer Dynamics
3. 学会等名 International Symposium on Multiple Scale Modelling of Complex Fluids (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Some Applications of Coarse-Grained Polymer Simulations
3. 学会等名 International Symposium on Multiple Scale Modelling of Complex Fluids (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuya Yamamoto, Yuichi Masubuchi, and Masao Doi
2. 発表標題 Relaxation dynamics of the normal stress of polymer gels
3. 学会等名 International Symposium on Multiple Scale Modelling of Complex Fluids (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一, 畝山多加志
2. 発表標題 からみあい高分子ダイナミクスの多体モデル間の比較
3. 学会等名 第66回レオロジー討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 多体スリップスプリングモデルの分岐高分子への拡張
3. 学会等名 第66回レオロジー討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi, Giovanni Ianniruberto, Giuseppe Marrucci
2. 発表標題 Stress undershoot of entangled polymers under fast startup shear flows in primitive chain network simulations
3. 学会等名 第66回レオロジー討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 草田慧, 畝山多加志, 増淵雄一
2. 発表標題 ナノ粒子分散PSの粘弾性の管模型による解析
3. 学会等名 第66回レオロジー討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 種々の粗視化モデルにおけるからみあいの強さ
3. 学会等名 第30回高分子加工技術研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Highly-coarse-grained multi-body models for polymers
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 高分子レオロジーのシミュレーションによる予測
3. 学会等名 第5回ヘキサケミカルカンファレンス(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Multi-Chain Slip-Spring Simulations for Entangled Polymers
3. 学会等名 The 12th SPSJ International Polymer Conference (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 多体粗視化シミュレーションによる高分子のネットワーク形成
3. 学会等名 2018年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akira Kusada, Takashi Uneyama, Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Linear Viscoelasticity of Polystyrene Melts Containing Nano-Particles
3. 学会等名 IWEAYR-14 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Lixin Yang, Takashi Uneyama, and Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Rheological properties of Poly(Propylene Carbonate) and modeling
3. 学会等名 IWEAYR-14 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 ソフトマテリアルのシミュレーション技術の現状と将来展望
3. 学会等名 スーパーコンピューティング技術産業応用協議会2018年度第3回セミナー(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akira Kusada, Yoshifumi Amamoto, Satoru Matsushima, Tetsuya Yamamoto and Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Linear Viscoelasticity of Polystyrene Melts Containing Nano-Particles
3. 学会等名 IWEAYR-13th (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroto Takata, Yoshifumi Amamoto, Tetsuya Yamamoto and Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 "Effects of Inter-segment Interactions on Normal Modes of Unentangled Polymers
3. 学会等名 IWEAYR-13th (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 レオロジーによる高分子ダイナミクスの解析
3. 学会等名 17-2高分子学会講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 レオロジーでわかるソフトマターのダイナミクス
3. 学会等名 平成29年度ソフトマター中性子散乱研究会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 分子シミュレーションによる高分子レオロジーの解析と成形加工への応用
3. 学会等名 第26回ポリマー材料フォーラム（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 高分子レオロジーの基礎
3. 学会等名 第25回東海高分子基礎研修コース（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高田寛人, 天本義史, 山本哲也, 増淵雄一
2. 発表標題 非絡み合い高分子のダイナミクスに対する排除体積相互作用の影響
3. 学会等名 第65回レオロジー討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 成形加工における高分子のダイナミクス
3. 学会等名 化学工学会塗布技術研究会特別講演会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 高分子ダイナミクスのシミュレーション
3. 学会等名 第15回未踏科学サマー道場（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Yuichi Masubuchi
2. 発表標題 Cross-correlation between Confined Chains and Surrounding Network Chains
3. 学会等名 IUMRS-ICAM2017（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 高分子の長時間ダイナミクスのシミュレーション
3. 学会等名 繊維学会第47回夏季セミナー（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 増淵雄一
2. 発表標題 成形加工の分子レベルシミュレーション
3. 学会等名 プラスチック成形加工学会第36回講演会（招待講演）
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	畷山 多加志 (Uneyama Takashi) (10524720)	名古屋大学・工学研究科・准教授 (13901)	
研究分担者	山本 哲也 (Yamamoto Tetsuya) (40610027)	名古屋大学・工学研究科・助教 (13901)	
研究分担者	天本 義史 (Yoshifumi Amamoto) (70773159)	名古屋大学・工学研究科・学振特別研究員 (SPD) (13901)	