

MD シミュレーションによるネットワークポリマーの緩和挙動

Relaxation Characteristics of Network Polymers with random connectivity using Molecular Dynamics Simulations

東亜合成 ○佐々木裕



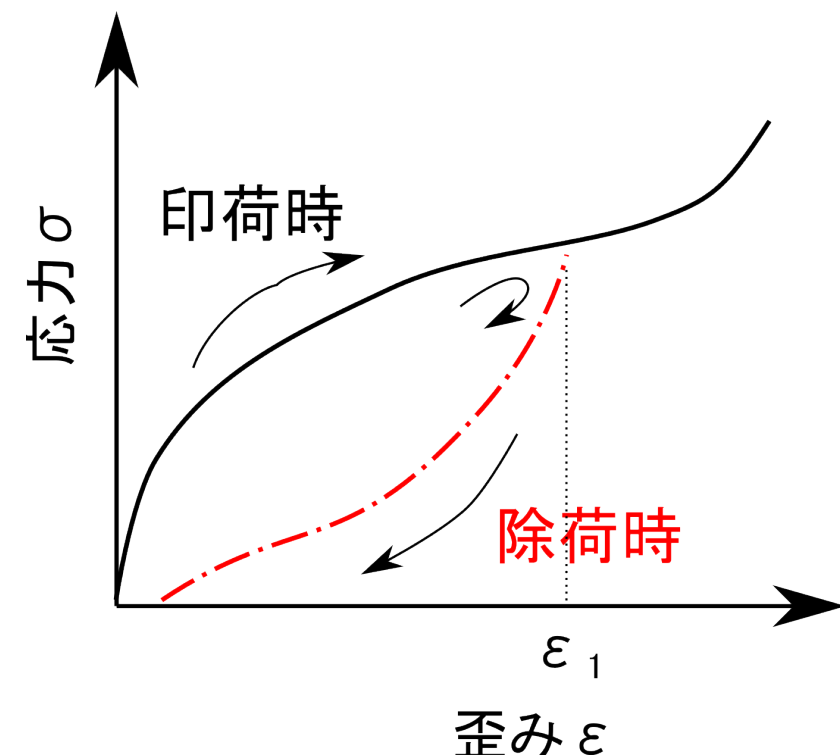
ABSTRACT

Existence of mechanical hysteresis is believed to be one of a key to achieve high durability for rubber materials. “Phantom Network Model”, in which fluctuation of junction point is rather high, seems to be a good candidate for micro-scale energy dissipation. Introducing random connectivity for network junctions, previously we successfully presented “Phantom Network Model” in molecular dynamics simulations.

In this presentation, relationship of mechanical hysteresis and relaxation characteristics of “Phantom Network Model” was investigated.

はじめに

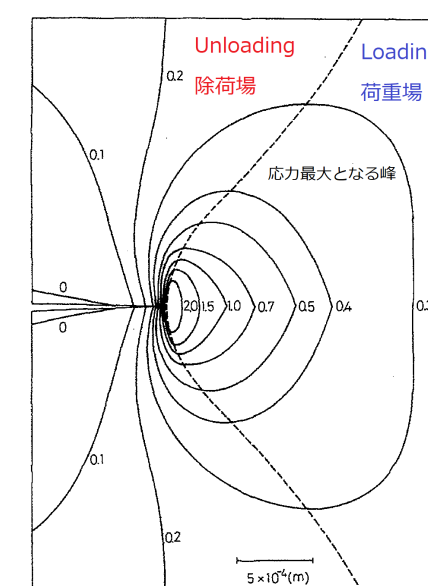
- 高分子材料の破壊耐性向上の設計指針
- 耐久性、可逆性に優れたゴム材料
- 破壊工学的⇒クラック進展を抑制



Andrews 理論[1]

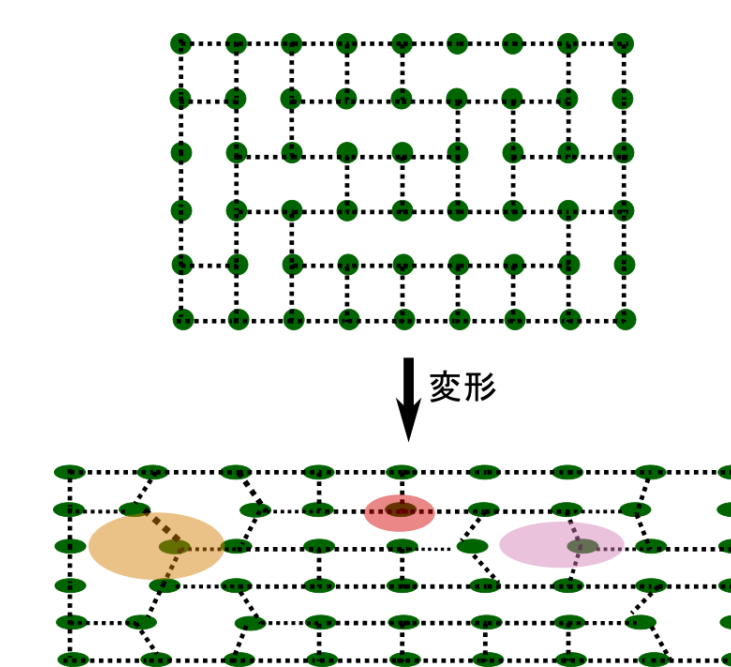
クラックの微小進展時に、

- Loading 場とUnloading 場
- この差が、全体の変形に要したエネルギーを散逸
- 鎖破断のエネルギーが低減 ⇒ 強靱さの起源。



ランダム構造とは？

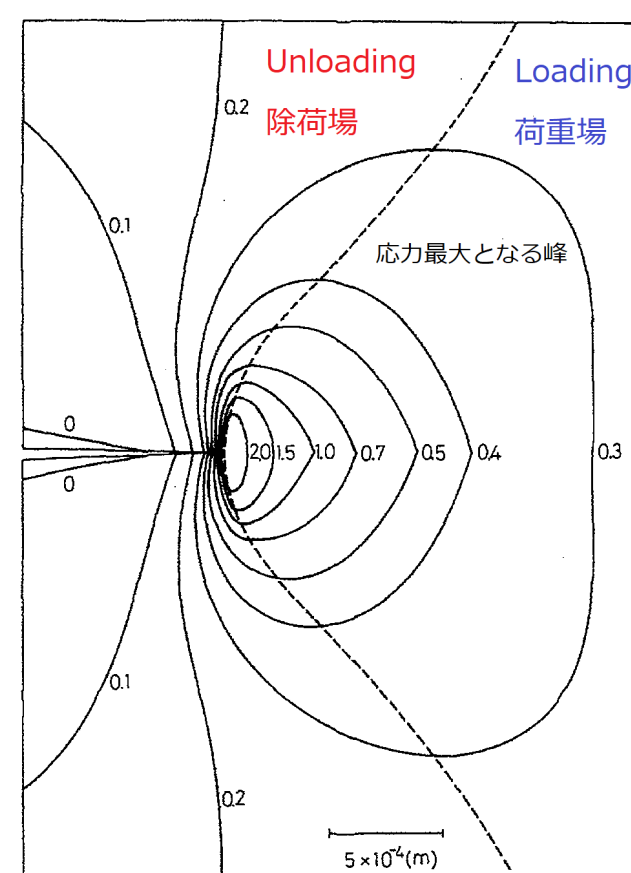
- 連結性を不均一に
 - 連結に位置依存性
- 巨視的な変形後
 - 結節点のゆらぎが不均一
 - 多様な緩和モード



はじめに

Andrews 理論

- クラックの進展を抑制
- Andrews 理論[1]
 - クラックの応力場
 - クラック進展時に、エネルギー散逸
 - ヒステリシスに由来



第四セクション

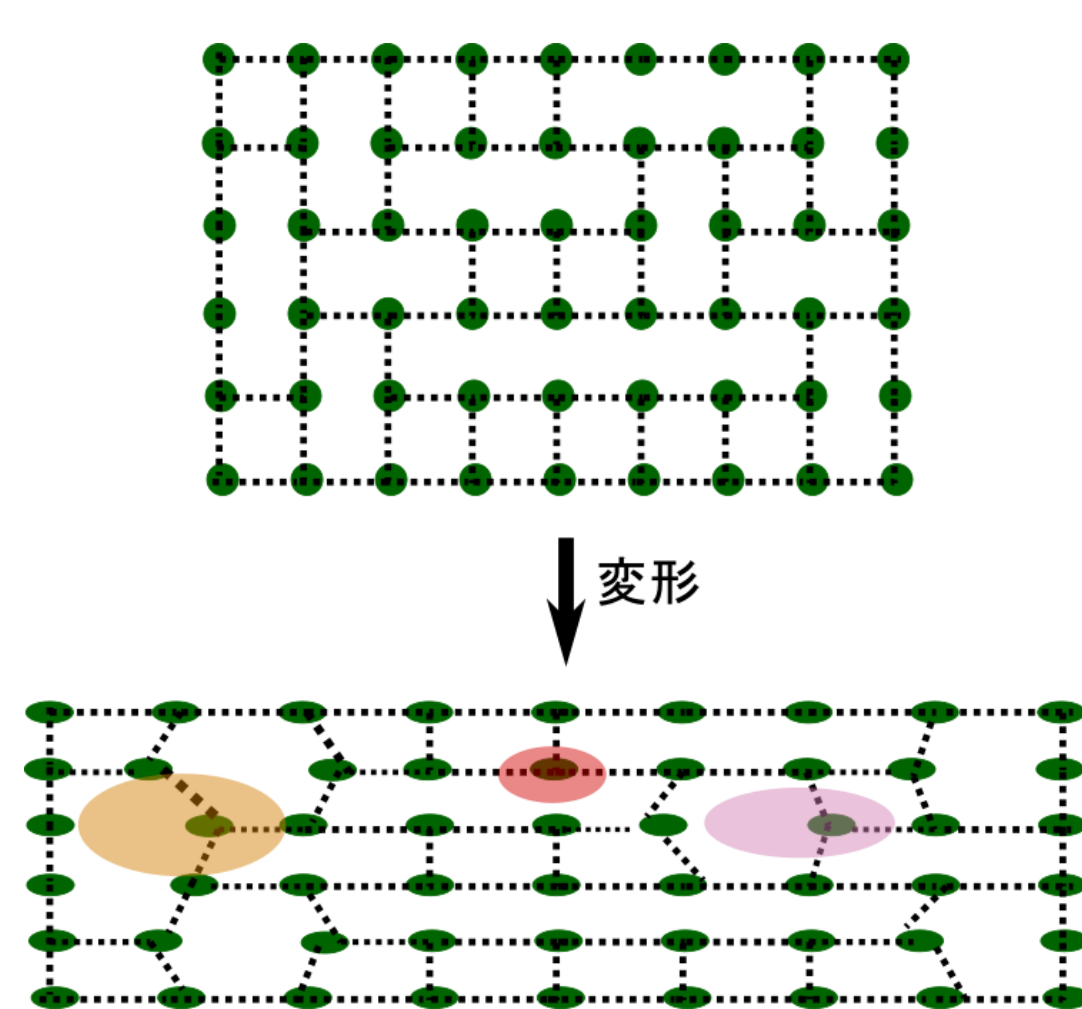
参考文献

- [1] E. H. Andrews, Y. Fukahori, J. of Mat. Sci., 12, 1307 (1977)
- [2] T. L. Smith, R. A. Dickie, J. of Polym. Sci. A-2: Polym. Phys., 7, 635 (1969)
- [3] P. J. Flory, Proc. R. Soc. London. Series A, 351, 351 (1976)
- [4] 佐々木裕, 第69回レオロジー討論会 (2021)
- [5] R. Auhl et al., J. of Chem. Phys., 119, 12718 (2003)
- [6] S. Shanbhag, M. Kröger, Macromol. 40 2897 (2007)
- [7] J. T. Kalathi et al., Macromol. 47 6925 (2014)

ランダム構造について

- 連結性を不均一に
 - 連結に位置依存性
- 巨視的な変形後
 - 結節点のゆらぎが不均一
 - 多様な緩和モード
 - 緩和の長時間化？
- 解析を容易に、
 - 既往研究で反応系
 - スtrand長と結合数を一定

ランダム構造の模式図



第三セクション