

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 using Molecular Dynamics Simulations



東亜合成株式会社 佐々木裕

Toagosei Co., Ltd. H. SASAKI mail:hiroshi_sasaki@toagosei.co.jp

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.

Introduction

高分子材料でマルチマテリアル化 ⇔ 高い比強度の有効利用

▶ 「**接着接合**」への高分子の利用

▶ 柔らかさを生かした「**弾性接着接合**」

▶ 耐久性、可逆性に優れた**ゴム材料に注目**

▶ **耐久性が不明確**

▶ 特に疲労破壊に対して

ヒステリシスと破壊靱性

▶ 力学的ヒステリシス

▶ 印荷時に比べて、除荷時の応力が低下する減少

▶ ヒステリシスロス：変形時のエネルギー散逸

▶ 破壊靱性との関係

▶ Andrews 理論：ヒステリシスロスの重要性が指摘

Andrews 理論[1]

クラックの微小進展時に、

▶ **Loading 場**と**Unloading 場**のひずみエネルギーの差

▶ 全体の変形に要したエネルギーの多くを**散逸**

▶ 鎖の破断へのエネルギーが低減 ⇒ **強靱さの起源。**

架橋点の環境とランダムな接続性

▶ 接続性を不均一に

▶ 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

▶ ファントムネットワークの諸特性が発現

架橋点は、**多数のストランド（図中の×）**に囲まれている。

Simulation

1. **実空間**で8-Chain Model で初期構造を作成。

▶ 除去したジオメトリーに対応した**トポロジーモデル**

2. トポロジー空間でランダム性の導入

▶ **エッジ交換**して、ネットワーク構造にランダムな接続性を導入

3. 対応する**実空間でのネットワーク初期構造**を作成

4. **ストランド長がホモポリマーに対応**するように多重度設定して、**Slow Push Off** により**初期構造を緩和**

• 初期状態は、黒色のボンドと潜在的な緑色のボンド（8-Chain のときに存在）

• 任意のボンド（ピンクのボンド）を一つ選択：真ん中の状態

• そのボンドを含んだ平行四辺形のトポロジーを探す。

• 二本毎にセット（黒色のボンドと緑色のボンド）で入れ替える。

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)