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

TOAGOSEI

東亞合成 () 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.

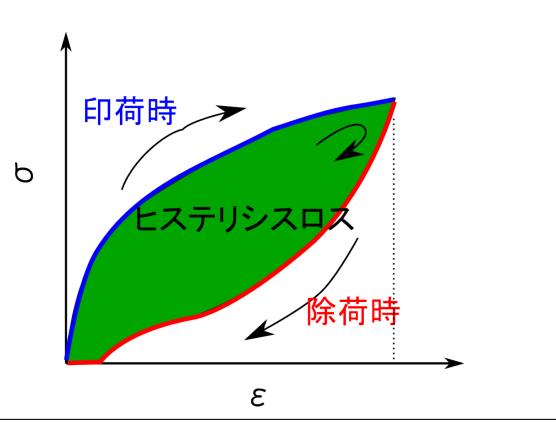
In this presentation, relationship of mechanical hysteresis and relaxation characteristics of "Phantom Network Model" was investigated.

Introduction

- ■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靭性

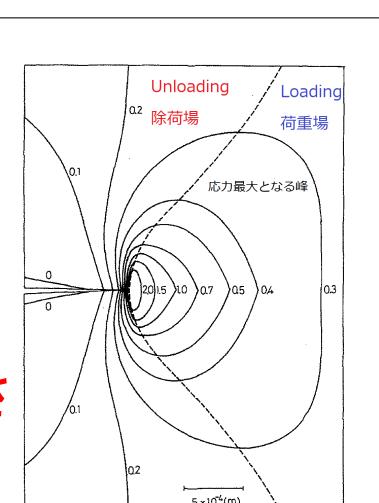
- ■力学的ヒステリシス
 - 除荷時の応力が低下
- ■破壊靭性との関係
 - Andrews 理論によりヒステリシスロスの重要性



Andrews 理論[1]

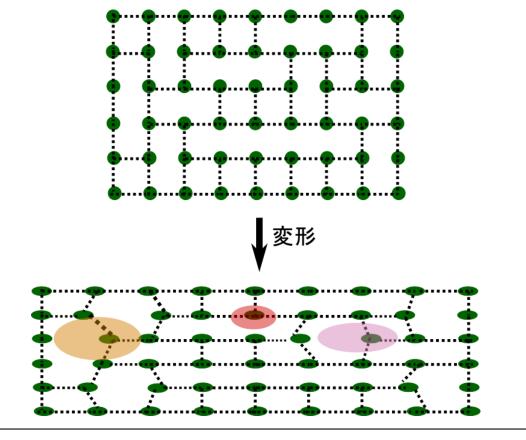
クラックの微小進展時に、

- 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 ⇒ 強靭さ の起源。



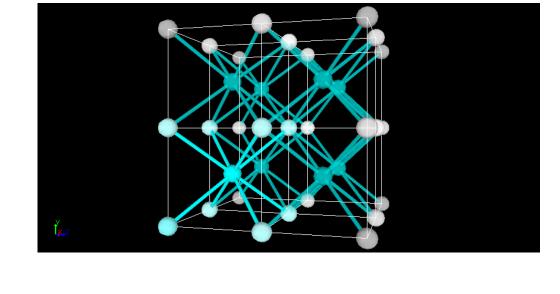
ランダム構造とは?

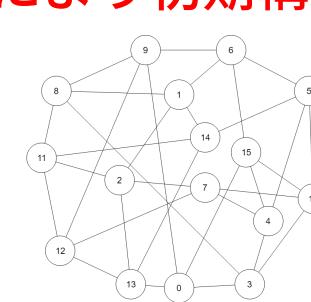
- ■連結性を不均一に
 - 連結に位置依存性
- ■巨視的な変形後
 - 結節点のゆらぎが不均一
 - 多様な緩和モード

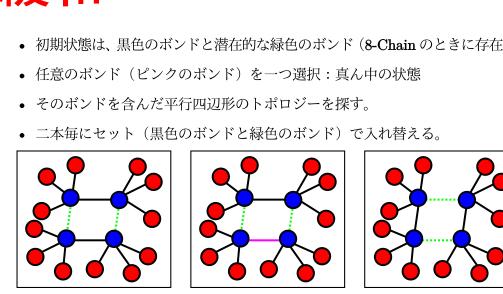


Simulation

- 11 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
- 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







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)