

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 疑似自由度を用いたメソスケール粗視化モデリング

2. 個人研究者名

畹山 多加志 (名古屋大学大学院工学研究科 准教授)

3. 事後評価結果

高分子などのソフトマターは、原子・メソ・マクロスケールといった多段の階層構造を有する。特に、そのマクロ物性を理解するには、ナノ・メソスケール構造の適切なモデル化が鍵となる。本研究は、その合理的な粗視化モデルの開発を目的としている。具体的には、従来は時間に依存しないとされてきた量を時間に依存する新たな疑似自由度として取り扱うことで、これまでは粗視化できなかった特性を合理的に表現して、シミュレーションを可能にすることができる。

マイクロ運動モデルから過渡ポテンシャルに基づく一般モデルの導出に成功した。ここで、マイクロ運動モデルとしては、過減衰 Langevin 方程式によるものと、Hamiltonian 正準方程式によるもの、の2種類を導出した。この理論により、運動モデルが時間とともに確率的に発展する粗視的状況を合理的にシミュレーションできるようになった。これらの粗視化シミュレーションの基盤となる理論および方法論の開発を高く評価する。

本理論がからみあい高分子の物性シミュレーションに広く適用できるものであることを示した。また、既存の手法では困難であった過冷却高分子や結晶性高分子材料のモデル化や解析に有効であることを示した。理論や枠組みの実際的な有効性を示したことは、高く評価できる。

さらに、拡散係数を疑似自由度とするモデルの導出も行い、単純な気体系でその有効性を確認している。考え方の発展性を示したものであり、大きな潜在力を示している。

今後の展開と期待

本研究で完成した粗視化モデル構築方法の理論基盤を、具体的対象に広げることが望まれる。統計力学的妥当性を保証された本理論に基づくシミュレーションと実際の物性との対比により、各種ソフトマターの力学特性のメカニズム解明やメカニクス解明が大いに期待できる。そのためには、他の研究者や技術者が理解しやすく扱いやすい形に整備することも大切である。多岐にわたる理論への深い造詣とそれを統合する能力があり、本研究の発展・展開とともに他研究者への本理論の波及を望む。ただし、材料は複雑な対象が数多く存在するため、自身としては興味が発散しないようにしたい。

実際の材料やその物性解析においては複雑な階層性が存在する場合は想定され、本理論をベースとしたさらなる深化が大いに期待される。特に統計力学的効果は、材料を問わず存在する課題であり、知識や人間力に優れていることから、他材料の研究者とも連携して統計力学に重点をおいた分野の拡張をリードすることを強く期待する。