

Mg 系および高分子系ミルフィーユ構造の 粗視化粒子シミュレーション

(大阪大学) ○君塚肇、大依加奈、尾方成信

ミルフィーユ構造/LPSO 構造型 Mg 合金の強化相は、添加元素が濃化した硬質層と Mg による軟質層がナノメートルオーダーで配列した層状構造を有することを特徴としており、加工時に結晶回転を伴うキンク形成が生じることで、高強度が発現するという特異な現象を示す[1]。キンク形成・強化現象を Mg 合金以外に展開することを考えたとき、他の物質群、中でも応力負荷時においてキンクが頻繁に観察される高分子系ミルフィーユ構造（ラメラ相）との共通点・相違点を押さえ、キンク形成の条件ならびに力学特性の変化を把握することは有用である。

Mg 基 LPSO 構造は、Mg 積層中に剛性やすべり抵抗等が異なる溶質濃化層（硬質層）が周期的に挿入された形態を有し、溶質濃化層の間隔や密度等の幾何的因子のみならず、溶質層そのものの化学的因子が全体系の力学特性に影響する。溶質濃化層の熱力学的安定性は組成や熱処理時間等に依存して変化し、Mg 格子中の溶質原子の振る舞い、溶質原子が凝集したクラスターの振る舞い、更にはクラスターが偏析した溶質濃化層の振る舞いが各スケール間で相互に関与するため、Mg 系ミルフィーユ構造のモデル化に当たってはスケール階層的な取り扱いが不可欠となる。これまで、溶質クラスターを単位構造とした粗視化描像の下で、クラスターの 2 次元的（濃化層面内）あるいは 3 次元的（濃化層面外）な規則配列の様態が実験科学および計算科学の双方の立場から明らかにされてきている[2]。

高分子鎖は自身が有するスケーリング性から粗視化の考え方が基本的に採用され、モノマーの集合体であるセグメントを単位構造としたモデル化がなされる。特に、**Kremer-Grest** 型のバネ・ビーズモデルに基づく粗視化分子動力学法[3]、および異種セグメント間の相溶性の違いによるマイクロ相分離を首尾よく模擬する散逸粒子動力学法[4,5]等の粗視化粒子モデルは、メソスコピック領域の取り扱いを要する高分子系ミルフィーユ構造のモデル化においても適用可能である。

本講演では、Mg 系ミルフィーユ構造における粗視化粒子モデルの考え方に関して紹介するとともに、高分子系ミルフィーユ構造の粗視化粒子シミュレーションの検討状況について述べる。特に、ポリマーブレンド系を構成する共重合高分子のマイクロ相分離（ラメラ）構造、および結晶性高分子における結晶・非晶の積層ラメラ構造に注目し、粗視化粒子モデルを構築するための上述の要素手法の活用について議論する。

文献

- [1] 河村能人, 日本金属学会 2018 年春期講演大会概要集, S7.1 (2018).
- [2] H. Kimizuka, S. Kurokawa, A. Yamaguchi, A. Sakai, S. Ogata, *Sci. Rep.*, **4**, 7318 (2014); H. Okuda, M. Yamasaki, Y. Kawamura, M. Tabuchi, and H. Kimizuka, *Sci. Rep.*, **5**, 14186 (2015); K. Takeuchi, K. Yuge, S. Tabata, H. Saito, S. Kurokawa, and A. Sakai, *Sci. Rep.*, **8**, 6841 (2018); K. Yamashita, T. Itoi, M. Yamasaki, Y. Kawamura, and E. Abe, *J. Alloys Compd.*, **788**, 277 (2019); H. Okuda, S. Kurokawa, K. Kintsu, M. Yamasaki, Y. Kawamura, and H. Kimizuka, submitted.
- [3] K. Kremer and G. S. Grest, *J. Chem. Phys.*, **92**, 5057 (1990).
- [4] P. J. Hoogerbrugge and J. M. V. A. Koelman, *Europhys. Lett.*, **19**, 155 (1992).
- [5] R. D. Groot and P. B. Warren, *J. Chem. Phys.*, **107**, 4423 (1997).