

プラスチックの硬さに潜むシンプルな性質を世界で初めて明らかに

大阪大学大学院基礎工学研究科大学院生の友重 直也さん（博士前期課程2年）、金 鋼准教授、松林 伸幸教授の研究グループは、東京大学の水野 英如助教、筑波大学の森 龍也助教との共同研究により、ガラス状高分子における分子振動の正体を、コンピュータシミュレーションを用いた理論研究により明らかにしました。

今回共同研究グループは、高分子鎖の集合体がガラスになる過程を分子動力学法と呼ばれるコンピュータシミュレーションにより再現し、その性質を詳細に解析しました（図1）。ずり変形と呼ばれる歪みを加えて硬さを計測したところ、高分子鎖1本が硬くなるにつれて集合体全体も硬くなりました。しかし、系全体の硬さはガラス特有の非アフィン変形の効果に起因して、鎖1本の硬さに対して相対的に極めて柔らかくなることを明らかにしました。

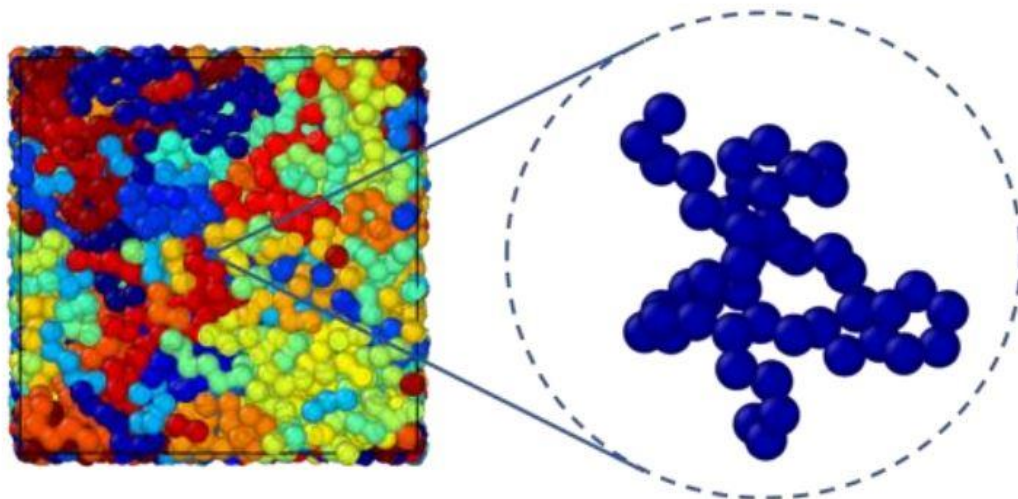


図1：高分子鎖の繰り返し分子構造を1つの球とみなしたモデルに基づいた高分子ガラスに対する分子動力学法のスナップショット。

また、ボゾンピークと呼ばれるほとんどのガラス物質で見られる振動励起が、高分子ガラスでもテラヘルツ波領域で観測されることがわかり、その周波数がずり変形に対する硬さの指標である剪断弾性率のみによって説明される関係式を得ることに、世界で初めて成功しました（図2）。このことはテラヘルツ波を用いてプラスチックのずり変形のしにくさなどの力学特性を非破壊・非接触に検査できることを意味し、応用上も重要な知見となります。

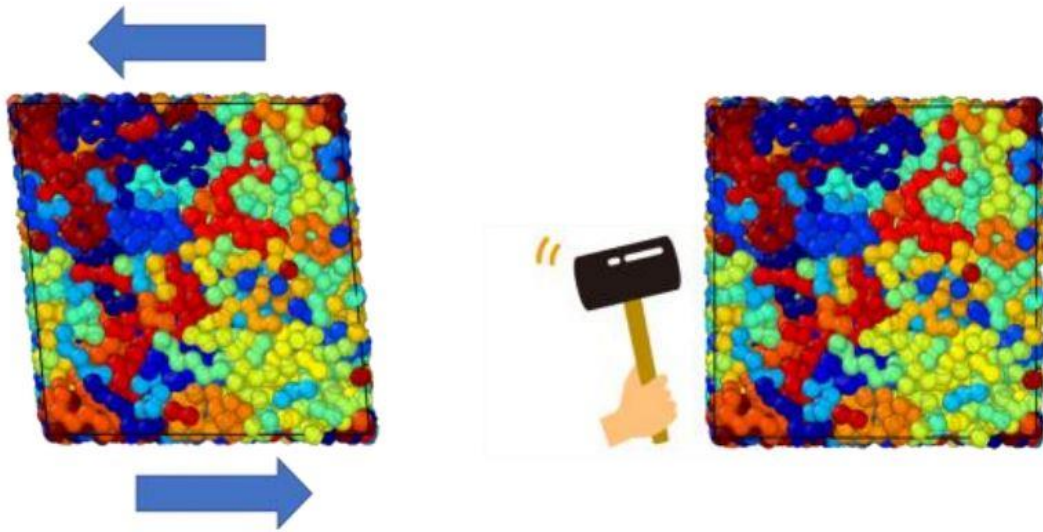


図 2: ずり変形を加えて内部に生じる力から高分子鎖の集合体の硬さを計測したところ (左図)、ボゾンピークと呼ばれるガラス特有の分子振動の周波数 (右図) を決めていることがわかった。

本研究成果は、英国総合科学誌「Scientific Reports」に、2019年12月20日(金)にオンラインで公開されました。

論文情報

タイトル Boson peak, elasticity, and glass transition temperature in polymer glasses: Effects of the rigidity of chain bending

雑誌 Scientific Reports

DOI 10.1038/s41598-019-55564-2

日文发布全文 https://www.u-tokyo.ac.jp/focus/ja/press/z0109_00290.html

文: JST 客观日本编辑部翻译