

# MDシミュレーションを利用した誘電物性の計算

大阪大学大学院工学研究科 槻尾大輔・谷川智子

目的 高分子化合物の誘電物性をMDシミュレーションより見積もる

内容 各種ポリマー化合物を重合度5、ポリマー本数20～40とし、GROMACSにて計算を行った。計算は、熱安定状態を得るための緩和計算を最初に行い、その後、プロダクションランを500ns実施した。計算結果から双極子モーメントの自己相関関数を計算し、FFTより誘電分散を見積もった。

結果 ポリマーのみの計算に加えて、水が数%混入している系についても計算が可能となり、水の誘電物性への影響を見積もることが可能になった。

利用した計算機

ノード時間

並列化

使用ソフトウェア

OCTOPUS

約2万ノード時間

4並列

GROMACS