

分子性液体の粘度と局所構造緩和

大分大学 理工学部 氏名 岩下拓哉

目的 分子性液体の粘度と局所構造緩和の関係性を明らかにする。

内容 分子性液体の応力緩和の計算

結果 液体シリコンの応力揺らぎの時間相関は、高温領域でさえ振動モードと構造緩和モードが分離できることがわかり、構造緩和を特徴付ける緩和時間が、局所四面体構造のトポロジカルな緩和時間と等価であることを見出した。

利用した計算機

ノード時間

使用したソフト

並列化

OCTOPUS

2000時間

LAMMPS

24並列

