

高分子のトポロジーに由来する 特異な動的相関に関する理論・シミュレーション研究

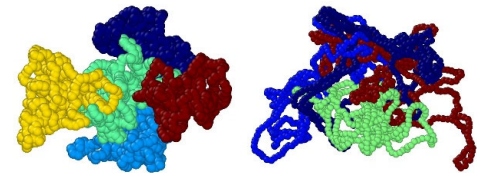
大阪大学 大学院 基礎工学研究科 後藤 頌太

目的 環状高分子が互いの穴を貫通することで生じる絡み合いの性質を明らかにすること

内容 分子動力学（MD）シミュレーションを用いて環状高分子を絡み合い構造と運動の様子を再現し、重心の運動を解析した

結果 鎖が硬くなり真っ直ぐに伸びようとすることで、穴が生成され運動が本質的に変化することを見出した

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	15,000 時間
使用メモリ	20 GB
並列化	64コア 並列



図：MDシミュレーションの結果。(左) 柔軟な鎖では球状に丸まって貫通しない。(右) 鎖が硬いと大きく広がって穴を生成し、貫通し合う