

任意のトポロジー構造を持つブロック共重合体の密度汎関数法

お茶の水大学 ソフトマター教育研究センター 富吉良徳

目的 環状構造を含むブロック共重合体が形成するミクロ相分離構造を効率的に予測するための方法論の開発および検証

内容 環状構造を持つ高分子の散乱関数から定義される密度自由エネルギー汎関数について、時間依存Ginzburg-Landau方程式を用いて平衡構造に収束させることで自由エネルギーを求め、相図を作成した。

結果 線状・単環状・8の字型およびおたまじゃくし型のブロック共重合体について、一方のブロックの体積分率 f と χ パラメータに関する相図を作成できた。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群
使用資源量 11000ポイント

