

高分子物理モデルによるシミュレーション研究

防衛大学校 応用物理学科 萩田 克美

目的 高分子ネットワークと基板の接着や剥離などの挙動や物性を、粗視化MDシミュレーションにより鎖レベルで解明すること。

内容 表面基板の形状を河川蛇行曲線に基づいて構築し、粗視化MDシミュレーションを実施した。さらに、その他の高分子物理モデルのMDシミュレーションも実施した。

結果 基板と高分子ネットワークの相互作用や温度変えて、一軸延伸やズリ変型下での特徴的な振る舞いや応力歪関係などの物性を評価した。
Macromolecules, 2024, in press として出版した。

利用した計算機 SQUID CPU/GPUノード群
ノード時間(CPU) 1287.43時間
ノード時間(GPU) 2880.13 時間

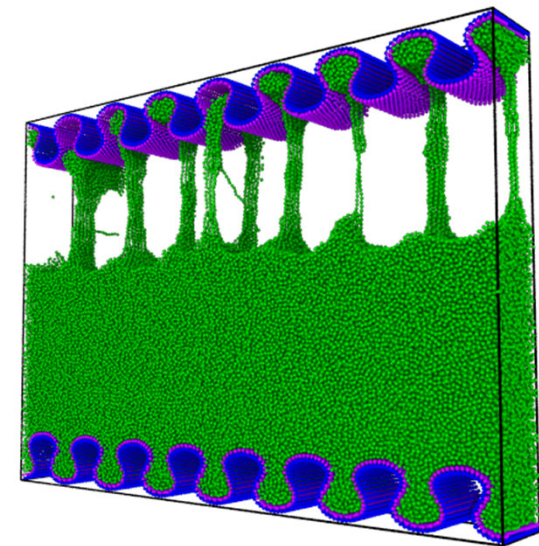


図 凹凸のある基板での剥離の様子