

局所秩序変数を用いた大規模高分子系の 半結晶化ダイナミクスの追跡

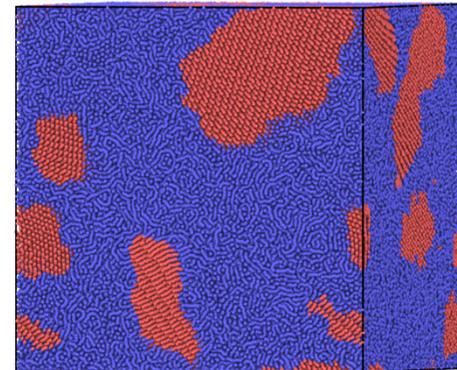
(国研)産業技術総合研究所 機能材料コンピュータシミュレーション研究センター 高橋 和義

目的 結晶性高分子の半結晶化ダイナミクスの詳細を解明する

内容 まず結晶性高分子の大規模分子系を徐冷・急冷して結晶化温度・ガラス転移温度を明らかにする。次に、結晶化とガラス化における局所構造のダイナミクスの違いを局所秩序変数を用いて明らかにする。

結果 結晶化温度・ガラス転移温度を明らかにし、半結晶化構造を可視化した

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
	ノード時間 45,452 時間
	使用メモリ 57 GB
	並列化 8ノード 並列



局所秩序変数で可視化された
大規模高分子系の半結晶構造