

環状構造を含む・絡み合う単環状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 本田隆・富吉良徳

目的 環状構造を含み理想鎖統計に従う/絡み合いがあるために理想鎖統計に従わないブロック共重合体が形成するミクロ相分離構造を予測するための密度汎関数法の開発および検証

内容 高分子のトポロジーを定めるグラフラプリアンから求まる散乱関数/中性子小角散乱の実験と整合的な散乱関数の表式により定義された自由エネルギー密度汎関数に基づき、時間依存Ginzburg-Landau方程式を用いてミクロ相分離の平衡構造を得る。また高分子のSCF法において、ループを含む任意構造の相分離構造を計算するアルゴリズムを開発する。

結果 相図の作成し、また新規準安定相を発見した。SCFプログラムをOCTA/SUSHIで実装・検証した。2次元の計算にはGPUを利用する方法を新たに考案した。

利用した計算機 SQUID 汎用CPUノード群 (使用資源量 22000 ポイント)

