

分子動力学計算によるポリマーデータベース構築

旭化成(株) 研究・開発本部 基盤技術研究所 石山裕輝, 嶋川肇

目的

所望の物性値を有する新規ポリマーを開発する

概要

ポリマー開発における実験データの不足を補うため、シミュレーションによりポリマーの物性値を予測し、大規模(数千)なポリマーシミュレーションデータベースを構築した。

結果

SQUID を利用し、これまで構築したデータベースを拡張した。今年度は高次構造を有する系の計算や、計算物性の拡充を行った。

計算機

SQUID 汎用CPUノード群

使用ソフト

LAMMPS