

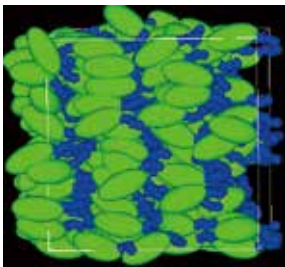
電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ (拡張COGNAC/Lammps)

シミュレータ概要

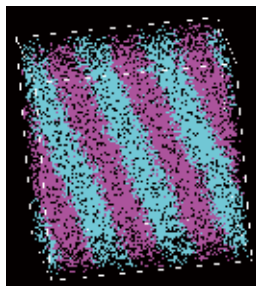
- ▶ 本シミュレータは、一定電圧下における分子動力学／粗視化分子動力学を実行できるようにしたプログラムです
- ▶ 同時に液晶エラストマーなど、メソゲンを持つ高分子鎖の粗視化分子動力学に対応するため、ポテンシャルモデルが拡張されています。
- ▶ OCTA/COGNAC(<http://octa.jp/>)およびLammps(<https://lammps.sandia.gov/>)の拡張モジュールとして提供されます。

COGNACの基本機能

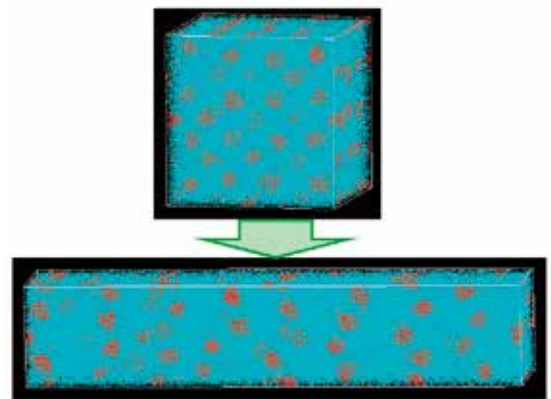
低分子液晶



ブロックコポリマーの
マイクロ相分離



伸長時の応カーひずみ挙動



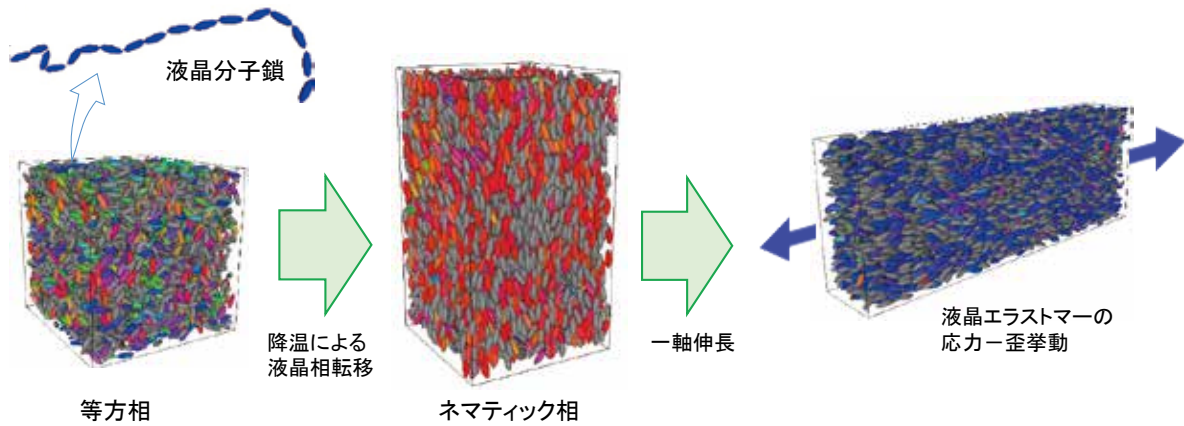
拡張機能

- ▶ 電極間の電圧を制御した電場印加の機能を実装
- ▶ Soft-core-Gay-Berneポテンシャルの実装による粗視化分子動力学計算の効率化
- ▶ 粗視化分子動力学に対応したSmearred-coulomb interactionの実装

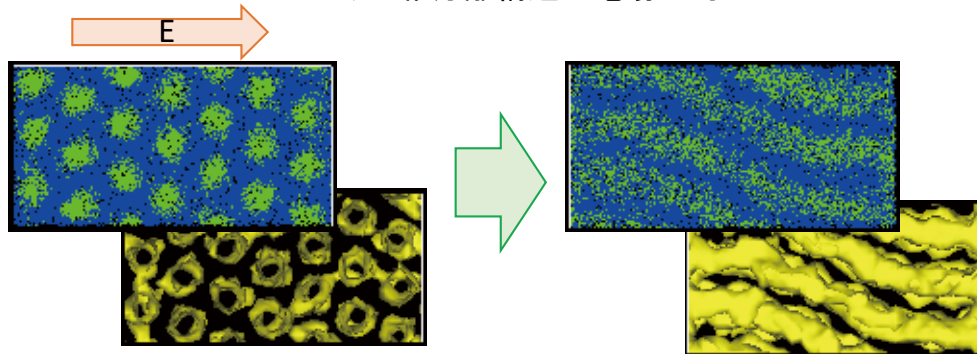
想定用途

- ▶ 液晶エラストマーの弾性／電歪特性解析
- ▶ 荷電ポリマーの電場配向

液晶エラストマーの相転移と応力-ひずみ挙動



マイクロ相分離構造の電場配向



動作環境

- ▶ COGNAC拡張版はソースコードおよびWindows版、Linux版の実行ファイルを提供
- ▶ Lammps拡張モジュールは、拡張部だけのソースコードを公開予定で、ユーザーによりオリジナルのソースコードにパッチをあててコンパイルし利用する必要がある

ライセンス・配布方式

- ▶ COGNAC拡張版は拡張OCTAに同梱されOCTA公開サイト(<http://octa.jp/>)より公開中
- ▶ COGNAC拡張版は「OCTAの利用規約」に準拠
- ▶ Lammps拡張モジュールを利用してLammps拡張版を利用する際は、オリジナルのLammpsのライセンスGNU General Public License, version 3に従う
- ▶ Lammps拡張モジュールの配布希望の場合は、問い合わせ窓口に連絡ください

—謝辞—

本シミュレータの拡張部分は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務(P16010)により開発されたものです。

【連絡先】超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト

【シミュレータ配布問合せ窓口】u2m-sim-ml@aist.go.jp

2020.04