

## 高分子シミュレーションソフトウェア”J-OCTA”について

株式会社 JSOL エンジニアリング事業本部 小沢 拓

高分子材料の設計を行うには、そのマルチスケール特性に注目する必要がある。モノマーレベルでの電子状態やそれに起因する分子間相互作用、高分子鎖の形状や絡み合い、複数成分を混合した際の相分離や界面形状、複合材料としての特性など、空間スケールで考えてもその範囲はÅから $\mu\text{m}$ まで広範囲に及ぶ。

実験では困難なメカニズムの解明や、実験回数を減らすためのスクリーニングを目的としてコンピュータシミュレーションが用いられるが、その際にも上記のマルチスケール特性に基づいた計算手法の選択、モデリングが求められる。

本講演では、ソフトマターのための統合シミュレーションソフトウェアである「OCTA(オクタ)」およびその商用版「J-OCTA(ジェイ・オクタ)」に搭載されているシミュレーションおよびモデリング技術、事例の紹介を通して、最近のトピックスの概要を紹介する。

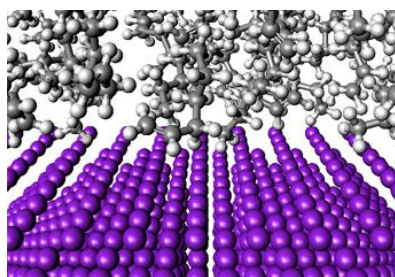


図1. 金属表面への高分子の吸着構造  
相互作用を第一原理計算で求めて、  
全原子分子動力学法でダイナミクスを計算。

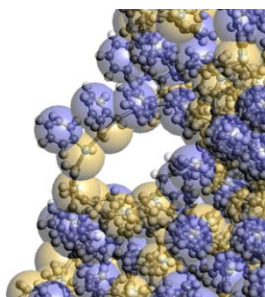


図2. 粗視化分子動力学法の計算結果  
を用いた全原子分子動力学法  
へのリバースマッピング

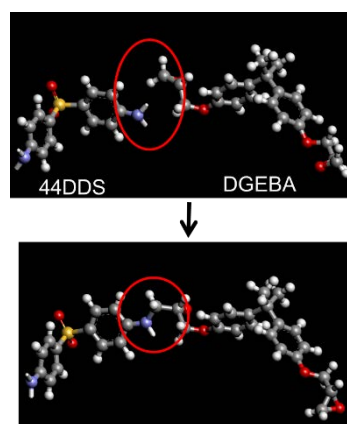


図3. エポキシ樹脂の硬化反応計算  
全原子分子動力学法で共有結合の生成を模擬。  
反応後の構造を用いて物性を計算。