

利用事例紹介 10

高分子の一軸伸長による配向の再現

分子動力学法により系を一方向に伸長させることで、引張変形における現象を可視化することができます。ポリビニルアルコールを引張変形させたときの配向の様子紹介します。

計算フローチャート

モデルの主な設定項目

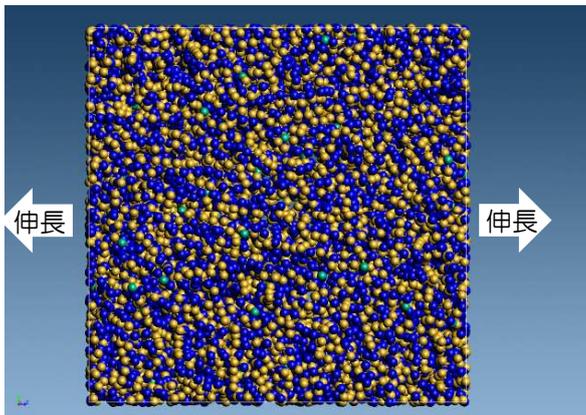
モデル作成

モノマーモデル、ポリマーモデル (今回使用)
全原子モデル、50分子、力場: PCFF → 粗視化

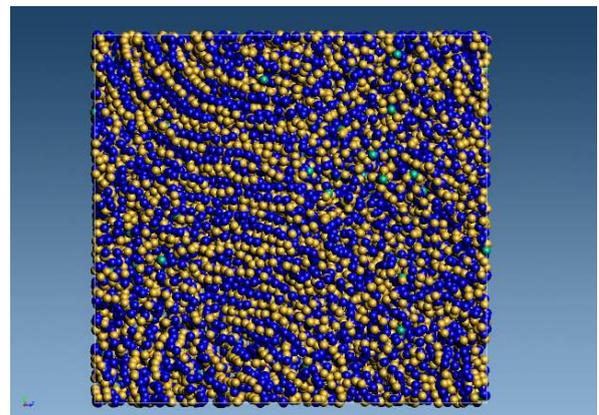
初期配置作製 → 緩和後、圧縮 (温度: 300K)

一軸伸長 (変形速度: 150mm/min)

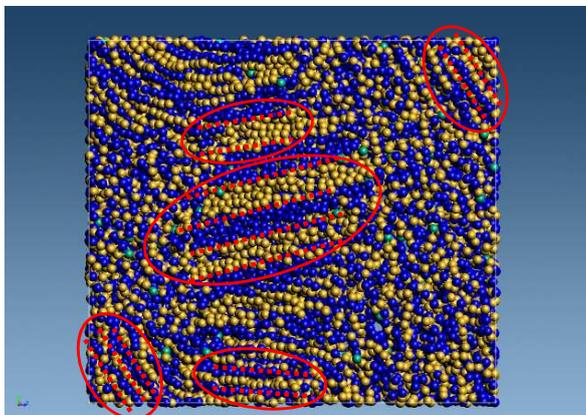
計算結果



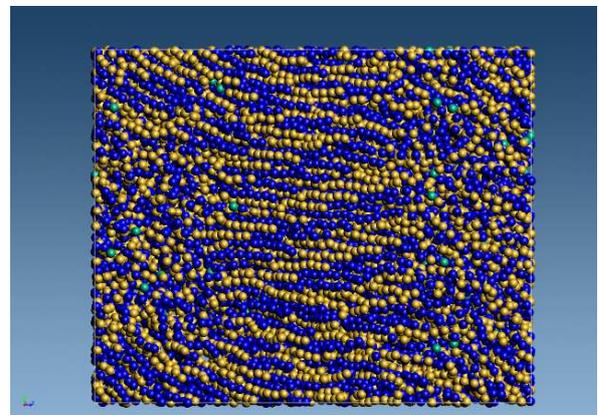
伸長前



伸び: 3.9%



伸び: 7.8%



伸び: 15.6%

分子が部分的に配向している様子がありました。
力学特性や光学特性の考察に利用できる可能性があります。