

< 背景・目的 >

高分子材料開発を行うときに、あらゆる階層の設計と制御が必要とされている。しかし、従来の高分子系のシミュレーション(Self-Consistent-Field-Theory)は 局在した場合、 外場がかかっている場合でも、アルゴリズム的にすべてをトレースして計算を行うため効率が悪い、といった問題があった。そこで局在した条件にあった新たな SCF 方程式 (H. Frusawa, J. Phys.: Cond. Matt., 2005) を用いて高分子の粗視化シミュレーションを目指した。

< 結果 >

右図は壁面に吸着条件がある SCF 方程式(外場あり)を解いたグラフである。壁面からの距離が離れるにつれて濃度が薄くなるが、途中から外場がかかって濃度が大きくなるのが分かる。従来の SCF 方程式と比較を行えば、今回の SCF 方程式が局在系に向いと証明できる。

