

第 21 回高分子計算機科学研究会講座

「凝集、破壊、分子間相互作用に関わる材料設計技術」

<趣旨> 光学、バイオ、構造材等の様々な分野で高分子からなる高機能材料が実用化されており、今後さらなる機能強化が期待されています。このような材料の開発の多くは、新規物質探索、物質の配合組成及び配合プロセス設計、製造工程における諸条件の最適化等の研究開発の各ステージにおいて、勘と経験にもとづく試行錯誤により試作と機能評価を繰り返す形で進められてきました。しかしながら、いずれの分野もグローバル化により開発競争が激化しつつあり、これを勝ち抜くためには材料開発スピードの向上と革新材料の発掘の高確度化が必須なものとなっています。

近年、京に代表される大規模計算技術の発展により、材料開発への計算機シミュレーション活用の可能性が拡大しています。これに加えて、マテリアルインフォマティクスといった情報科学的アプローチを模索する動きも活発化してきました。これらは、従来実験的な手法により進められていた材料開発を効率化し短期間に機能最大化を実現するための新たな手段として、大いに注目されています。

このような背景のもと、本講座では、光学、バイオ、構造材の分野における材料開発に波及すると期待される、凝集、破壊、分子間相互作用の観点での機能物性理解を目指した方法論を広く学ぶ機会として、1) 計算アプローチ：全原子 MD、2) 理論的アプローチ、3) 数学的アプローチ、4) 実験的アプローチ、5) 計算アプローチ：量子化学の5つの研究アプローチに関する講演を企画いたしました。計算機シミュレーションの材料開発への活用を考えている方、併せて必要となる実験的あるいは理論的知見を含め、広い見地から今後の材料設計技術のあり方を検討したい方への参考になれば幸いです。多くの方々のご参加をお待ちしております。

主催 高分子学会 高分子計算機科学研究会
日時 6月21日(火) 10:00~16:00
会場 東京工業大学蔵前会館ロイヤルブルーホール
(東京都目黒区大岡山 2-12-1 TEL 03-5734-3737)
交通 東急目黒線・大井町線「大岡山」下車 徒歩1分
<http://www.somuka.titech.ac.jp/ttf/access/>

プログラム

- <10:00~10:10> 運営委員長 挨拶
- <10:10~11:00>
1. 粗視化MDに用いる相互作用パラメータの概要 (旭化成) 三枝 俊亮
- <11:00~11:50>
2. 高分子薄膜における粘性散逸と天然複合材料の破壊 (お茶の水女子大基幹) 奥村 剛
- <13:10~14:00>
3. パーシステントホモロジーを用いたアモルファス構造の記述 (東北大原子分子材料研) 中村 壮伸
- <14:00~14:50>
4. 架橋高分子のジオメトリー・トポロジーと破壊特性 (九大院工) 山口 哲生
- <15:10~16:00>
5. PVA-ヨウ素錯体の構造と形成機構に関する量子化学的検討 (豊田工大院工) 高濱 智彦

参加要領

- 1) 定員 100 名
- 2) 参加費 ①企業 14,040 円 ②大学・官公庁 5,400 円 ③学生 2,160 円
④名誉・終身・フェロー・ゴールド・シニア会員 2,160 円
⑤計算機科学研究会メンバー a) 企業 10,800 円, b) 大学・官公庁 4,320 円
- 3) 申込方法 高分子学会ホームページ (<https://www.spsj.or.jp/entry/>) からお申込みください。
参加証、請求書(希望者のみ)を送付いたします。
参加費は、お振込みをお願いいたします。
- 4) 振込先 銀行振込<三菱東京UFJ銀行 銀座支店(普通) 1126232 名義 高分子学会>
郵便振替<00110-6-111688 名義 高分子学会>
- 5) その他 演題・講演者は予告なく変更になる場合がございます。予めご了承下さい。

問合せ先 〒104-0042 東京都中央区入船 3-10-9 新富町ビル
高分子学会 第21回高分子計算機科学研究会講座係
TEL 03-5540-3770 FAX 03-5540-3737

行事参加申込 QR コード
<http://www.spsj.or.jp/entry/>

