

第8回 高分子計算機科学討論会

主催 高分子学会 高分子計算機科学研究会

日時 3月7日(金) 9:45 ~ 17:00

会場 キャンパスプラザ京都 4F 第4講義室
(京都市下京区西洞院通塩小路下ル 電話 075-353-9111)

交通 JR 京都駅前中央郵便局西側徒歩2分

プログラム <発表12分・討論5分>

- <9:45~9:50> 挨拶 (運営委員長・千葉大工) 笹沼裕二
<9:50~10:24> [座長 岡 勝仁]
- 1) 水素結合による星型分子のネットワーク形成
(京大院工) 岡田幸典・古賀 毅・田中文彦..... 1
- 2) せん断流下における会合高分子のコンホメーション変化とレオロジー
(京大院工) 榎本達也・古賀 毅・田中文彦..... 2
<10:24~10:58> [座長 古賀 毅]
- 3) 分子力学計算による周期性ポリペプチドの構造解析
(阪府大先端研) 柿木佐知朗・岡 勝仁(阪工大工) 平野義明..... 3
- 4) ポリエチレンイミンのコンホメーション特性
(千葉大工) 笹沼裕二・服部 聖・今津晋一・飯嶋孝行・貝塚朋芳・澤登美沙
(Imperial College, UK) M.A.Azam・R.V.Law・J.H.G.Steinke..... 4
<10:58~11:49> [座長 飛田英孝]
- 5) 会合高分子溶液のブラウン動力学シミュレーション
(京大院工) 古谷 勉・古賀 毅・田中文彦..... 5
- 6) シンジオタクチックポリスチレン結晶の構造相転移のMDシミュレーション
(福井大工) 玉井良則(兵庫教育大) 福田光完..... 6
- 7) 高分子配向結晶化のMDシミュレーション
(京大院人環) 小山 暁(山口大理) 山本 隆
(京工繊大繊維) 深尾浩次(京大総人) 宮本嘉久..... 7
<13:00~13:51> [座長 青木百合子]
- 8) 分岐・架橋高分子生成過程のシミュレーション
(福井大工) 飛田英孝..... 8
- 9) ポリシランの光学特性に対する酸素含有側鎖の効果
(千葉大工) 加藤晴久・唐津 孝・北村彰英(産総研) 松山重倫・海藤 彰..... 9
- 10) 密度汎関数法を用いた157nmレジスト材料の真空紫外域における光吸収スペクトル計算
(東大院理工) 安藤慎治・藤ヶ谷剛彦・上田 充.....10
<13:51~14:25> [座長 福田光完]
- 11) Elongation-FF法を用いたPush-Pull共役高分子における非線形光学性の効率的な計算方法
(広島大院理・PRESTO) 青木百合子・大西真一・Gu Feng Long.....11
- 12) 環状分子と鎖状高分子の包接現象
(山口大理) 岩橋秀樹・山本 隆.....12

< 14 : 25 ~ 14 : 59 > [座長 笹沼裕二]

- 13) 両親媒性膜への高分子鎖の進入と複合体形成
(山口大理) 岡崎光治・浦上直人・山本 隆.....13
- 14) 剛直ポリイミド鎖を用いたナノスケールの空孔を有する新規材料の設計
(兵庫教育大) 福田光完(福井大工) 玉井良則.....14

< 15:15 ~ 16:06 > [座長 山本 隆]

- 15) 分子動力学シミュレーションによる高分子膜へのガス収着と拡散
(NOK) 菊地洋昭(兵庫教育大) 福田光完.....15
- 16) 高分子電解質膜のマルチスケールシミュレーション
(豊田中央研究所) 山本 智、山川俊輔、兵頭志明.....16
- 17) 均一オリゴマーを使用したポリエチレングリコールの水中での拡散挙動
- 分子動力学計算と実験結果との比較 -
(産総研) 島田かより・齋藤 剛・衣笠晋一(千葉大院自然科学) 加藤晴久.....17

< 16:06 ~ 16:57 > [座長 兵頭志明]

- 18) 粗視化分子動力学による熱可塑性ポリウレタンの力学物性シミュレーション
(旭化成中央技術研究所) 坂本直紀・青柳岳司.....18
- 19) 高分子の協同現象的構造変化に対する量子化学的研究
(広島大院理・PRESTO) 折本裕一・青木百合子.....19
- 20) 有機強磁性高分子設計のためのスピン整列機構への理論的なアプローチ
(広島大院理・PRESTO) 今井隆浩・折本裕一・青木百合子.....20

< 17:15 ~ 19:00 > 高分子計算機科学交流会 (京都タワーホテル：京都駅前 9F)