

第 11 回高分子計算機科学研究討論会

主催 高分子学会 高分子計算機科学研究会

日時 平成 18 年 3 月 3 日(金) 9:50~17:35

会場 大阪府立大学学術交流会館大ホール (大阪府堺市学園町 1-1)

http://www.osakafu-u.ac.jp/info/campus_map/nakamozu.html

交通 大阪市営地下鉄御堂筋線 中百舌鳥駅下車徒歩約 13 分、南海電鉄高野線 白鷺駅下車徒歩約 6 分

プログラム

[口頭発表] [20 分/件 研究発表 12 分・討論 8 分]

< 9:50-10:00 >

挨拶..... (運営委員長・旭化成) 青柳岳司

<10:00-11:00> [座長 堂寺知成]

- 1) 架橋点を導入したゴム分子の変形シミュレーション..... (SRI 研究開発) ○皆川康久・尾藤容正, (日本総研) 崎元友紀子・小沢拓・君塚肇
- 2) ハイブリッド動的平均場法による高分子溶融体の相構造解析..... (JCII) ○本田隆, (東北大理) 川勝年洋
- 3) 計算機シミュレーションを用いた高分子準希薄溶液の流動誘起相分離現象のダイナミクスに関する研究..... (京大院工) ○西辻祥太郎・竹中幹人・長谷川博一, (山形大工) 谷口貴志

<11:00-12:00> [座長 川内 進]

- 4) 物造りのためのラジカル重合シミュレーション..... ○木村次雄
- 5) 光学ポリマーの光物性値予測システムの構築..... (千歳科技大光科学) ○谷尾宣久・北川洋和・松原潤樹
- 6) 高分子の電子状態の超効率的計算方法の開発とその応用..... (九大院総理工、JST-PRESTO) ○青木百合子, (九大院総理工) Feng Long Gu・Marcin Makowski・大西真一

[ポスター発表]

<13:00-14:30>

- P-1) ポリエチレンテレフタレート of の粗視化 End Bridging Monte Carlo シミュレーション..... (三井化学) ○神尾和教・Krzysztof Moorthi, (National Tech. Univ. of Athens) Doros N. Theodorou
- P-2) 荷電表面への高分子電解質吸着シミュレーション..... (花王) ○久保宏記, (JCII) 本田隆, (東北大理) 川勝年洋
- P-3) 分子スピンの制御による有機ナノ磁石の理論的設計..... (九大院総理工) ○折本裕一・Gu Feng Long, (九大院総理工、JST-さきがけ) 青木百合子
- P-4) 第一原理解析的分子軌道法の開発と高分子・分子性結晶への応用..... (九大院総理工) ○三浦雅典・折本裕一, (九大院総理工、JST-さきがけ) 青木百合子
- P-5) セルラーオートマトン法を用いたゴム材料の摩耗解析..... (三ツ星ベルト) ○柳生裕聖
- P-6) 任意形状、任意電荷分布を持った粒子の電気泳動シミュレーション..... (JST-CREST) ○牧野真人, (名大院工) 小多秀明, (東大院工) 土井正男

- P-7) SRDモデルによるシア流動下でのDNAダイナミクスの解析..... (名大院工) ◯渡信彦,
(JST-CREST) 牧野真人, (東大院工) 土井正男
- P-8) モデルシクロデキストリンを用いた包接現象シミュレーション..... (山口大理) ◯浦上
直人・山本隆
- P-9) n-アルカン薄膜の構造形成シミュレーション..... (山口大院理工) ◯山口重紀, (山口大
理) 浦上直人・山本隆
- P-10) 高分子データベース PoLyInfo の分子表現と記録..... (物材機構) 飯室茂・山崎政義・桑
島 功・八木 晃一, (ゼファー) 高柳 弘
- P-11) 分子力学・分子動力学計算による周期性ポリペプチドの構造解析..... (阪府大総合教育)
◯柿木佐知朗・岡勝仁, (阪工大) 平野義明
- P-12) 溶液中における高分子構造形成の分子動力学シミュレーション..... (京工繊大繊) ◯藤
原進・橋本雅人・伊藤孝
- P-13) 両親媒性リニア・デンドリティックポリマーのミクロ相分離のモンテカルロシミュレーシ
ョン..... (京大院工) ◯野村晃敬・堂寺知成
- P-14) ABC星型高分子アルキメデスタイリング相のフォトニックバンド計算..... (京大院工) ◯
上田和成・堂寺知成
- P-15) PI0解析による環状ビニルモノマーの開環重合性の予測..... (ルモックス技研) ◯志賀昭
信, (山形大工) 落合文吾・遠藤剛
- P-16) 絡み合い点における紐状ミセルのメソスケールシミュレーション..... (豊田中研) ◯山本
智・兵頭志明
- P-17) 全芳香族ポリアミドの非線形光学効果..... (東工大院) ◯川内進・西川丞・小池正雄・
福田薫・戸木田雅利・渡辺順次
- P-18) 環状含フッ素ポリイミドの分子設計と凝集構造..... (兵庫教育大院) ◯福田光完, (福井
大工) 玉井良則

[口頭発表] [20分/件 研究発表12分・討論8分]

<14:40-16:00> [座長 玉井良則]

- 7) 代表的なポリエーテル・ポリスルフィドにみられる一次構造-結晶構造相関および構造-
物性相関..... (千葉大工) 笹沼裕二
- 8) らせん分子オリゴマーの構造相転移と結晶成長..... (山口大理) ◯山本隆
- 9) 分子情報を取り込んだ粗視化粒子シミュレーション..... (豊田中研) ◯金城友之・兵頭
志明
- 10) Smoothed Profile法による荷電コロイド粒子の電気泳動シミュレーション..... (JST-さ
きがけ、京大院工) ◯金鋼, (九大院工) 名嘉山祥也, (JST-さきがけ、京大院工) 山本
量一

<16:15-17:35> [座長 藤原 進]

- 11) ポリメチルペンテン結晶の構造規則性と気体透過性の関係..... (福井大工) ◯玉井良則,
(兵庫教育大院) 福田光完
- 12) 架橋と崩壊反応のシミュレーション-ゲルの発生と成長..... (中央大) ◯高橋恒人
- 13) ABC星型ブロック共重合体の準結晶構造の対角線法MCシミュレーション..... (京大院工)
◯堂寺知成
- 14) 分子力学・分子動力学計算によるプロリン関連ポリペプチドの高次構造解析..... (阪府
大総合教育) 柿木佐知朗・弓削光裕・◯岡勝仁, (阪工大) 平野義明

参加要領

- 1) 定員 100 名
- 2) 参加費 会員 ①会社・大学・官公庁 4,200 円 ②学生・ゴールド・シルバー 2,100 円 ③高分子計算機科学研究会メンバー 3,150 円
- 3) 申込方法 下記申込書を記入し、FAX または郵送にて送付の上、3 月末日までにご送金下さい。参加証、請求書（希望者のみ）を順次送付させていただきます。
- 4) 振込先 銀行振込<UFJ 銀行 銀座支店（普通）1126232（社）高分子学会>
郵便振替<00110-6-111688（社）高分子学会>
振込手数料は振込人にてご負担下さいませようお願いいたします。
銀行・郵便振替の領収書をもって本会からの領収書にかえさせていただきます。

申込先

（社）高分子学会 第 11 回高分子計算機科学研究討論会係
〒104-0042 東京都中央区入船 3-10-9 新富町東急ビル 6F
TEL 03-5540-3771 FAX 03-5540-3737 E-mail sugimoto@spsj.or.jp

----- き り と り -----

（社）高分子学会

第 11 回高分子計算機科学研究討論会係

FAX 03-5540-3737 E-mail sugimoto@spsj.or.jp

第 11 回高分子計算機科学研究討論会 参加申込書

(ふりがな) 参加者名	
勤務先 (部署・課・グループ名までご記入下さい)	
連絡先住所 〒 (<input type="checkbox"/> 勤務先 <input type="checkbox"/> 自宅 ←該当するものにチェックして下さい)	
TEL	FAX
E-mail	
高分子計算機科学研究会メンバー資格 有 ・ 無	
送金方法 (該当するものにチェックして下さい) 送金額 ¥ _____ (所属： <input type="checkbox"/> 企業 <input type="checkbox"/> 大学/官公庁 <input type="checkbox"/> 学生 <input type="checkbox"/> ゴールド <input type="checkbox"/> シルバー) <input type="checkbox"/> 請求書希望 <input type="checkbox"/> 銀行振込・三菱東京UFJ銀行 銀座支店 (普通) 1126232 (社) 高分子学会 (振込予定 月 日) <input type="checkbox"/> 郵便振込・00110-6-111688 (社) 高分子学会 (振込予定 月 日)	