

## 第13回高分子計算機科学討論会（夏の自由討論会）

主催 高分子学会 高分子計算機科学研究会

日時 平成21年7月30日～31日

会場 KKR ホテルびわこ（天津市下阪本 1-1-1）

交通 JR 京都駅から JR 湖西線 14 分、唐崎駅下車、徒歩約 12 分（送迎バスあり）。また、JR 大津駅（東海道本線）から江若バス「堅田」方面で 20 分「四ッ谷」下車徒歩 1 分。詳細はこちらをご覧ください。

### 要旨

本討論会は、計算機を利用した分子設計、材料設計、物性予測、機能解析等に関する理論、モデル、シミュレーション、ならびにそれらの高分子科学への応用について、学生、研究者の交流、情報交換を行う場です。若手が活発で密度の濃い討論を行えるよう、企業、大学あわせて定員を 30 名程度に絞り込み、合宿形式で自由に意見交換できる場を提供したいと思います。すでに年会で発表した研究、アイデア提起、市販・開発ソフトの紹介なども歓迎いたします。特に学生、若手研究者、企業研究者、技術者の発表、参加をお待ちしております。また、参加者同士での交流を目的として、風光明媚な湖畔でのバーベキューディナーパーティーや 2 日目の午後にオプションで比叡山の散策を予定しております。材料開発分野で重要な役割を占めつつある計算科学の発展を支える若手を育て、将来の連携を育む場として、お近くの若手にも参加を奨励していただければ幸いです。

### プログラム

第 1 日 = 7 月 30 日（木）

<13:30-13:40>

運営委員長開会挨拶 寺石和夫

<13:40-15:20>

[依頼講演 1] . . . . .

「材料開発に対する計算機シミュレーションの関わり方 - 旭化成における取り組み - 」

（旭化成）青柳岳司

[依頼講演 2] . . . . .

「企業研究者の高分子計算科学（化学？）事始・・・そして今」

（ルモックス技研）志賀昭信

<15:20-15:40> 休憩

[ポスター発表] . . . . .

<15:40-17:10>

P-1) 固体基板上的 n-アルカン薄膜の構造形成：分子動力学シミュレーション

（山口大院理工）三根雅生・（山口大理）浦上直人・野崎浩二・山本 隆

P-2) ラクタム系薬と シクロデキストリン類の水溶液中包接複合体構造に及ぼす pH の影響

（福岡大院）村上太一・森脇英恵・（福岡大）湯川美穂・池田浩人・安藝初美

P-3) ベシクルの形態変化シミュレーション

（山口大院理工）野口威照・浦上直人・山本 隆

P-4) TD-DFT 法によるポリイミド薄膜の光学的性質の検討

（明治大理工）水沼達郎・松本節子

P-5) 両親媒性溶液中における中間相形成の分子動力学シミュレーション

（京工織大院工芸）藤原 進・橋本雅人・伊藤 孝

P-6) 高分子の閉じ込めによる油中水滴型ドロップレットの形状変化シミュレーション

（山口大院理工）山本 隆・浦上直人・黒川敬久

<18:00-20:00> 夕食&懇親会（バーベキューパーティー）

第2日=7月31日(金)

[口頭発表] [発表20分・討論4分・交代1分 計25分/件] . . . . .

<9:30-10:45>

- 1) 高分子結晶化の微視的シナリオ: "ガラス"からの結晶化と液体構造  
(山口大院理工) 山本 隆
- 2) 自己無撞着場理論による ABA 型トリブロックコポリマー/オイル系の相分離構造のモデル解析  
(山形大院理工) 金澤治嵩・杉本昌隆・小山清人・(京大院工/JST-CREST) 谷口貴志
- 3) 高分子レオロジーのためのマルチスケールシミュレーション  
(JST-CREST/京大院工) 村島隆浩・(京大院工/JST-CREST) 谷口貴志

<10:45-11:10> 休憩

<11:10-12:00>

- 4) イオン強結合と電荷反転  
(京大院工) 浦長瀬正幸・山本量一
- 5) Tumbling motion of a single chain in shear flow  
(京大工) 小林秀樹・(京大工/JST-CREST) 山本量一

<12:00-12:10>

運営委員長閉会挨拶 寺石和夫

<12:10-> 比叡山散策(オプション)

\*交通費(ケーブルカーやバス等)および昼食代は別途自己負担になります。

参加要領

1. 受付期間 6月5日~7月16日
2. 定員 30名程度
3. 参加費
  - (1)企業・大学・官公庁 4,200円
  - (2)学生 2,100円
  - (3)名誉・終身・フェロー・ゴールド・シルバー会員 2,100円
  - (4)高分子計算機科学研究会メンバー 3,150円
4. 宿泊費(1泊2食付き、当日払い) 15,000円