

第14回高分子計算機科学研究会討論会

～参加募集～

<趣旨> 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。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。自由な研究発表を通じて議論を深める機会としていただきたく、積極的なご応募をお願いいたします。

現在、高分子計算機科学を専門に研究される方のみでなく、初心者の方でもっと効果的な活用法を知りたい方、あるいはこれから利用したいと考えており、高分子計算機科学が何に使えるのかイメージをつかみたい方などに対しても、最新の高分子計算機科学の適用事例、可能性を知る良い機会になると期待されますので、是非参加をお勧めします。

主催 高分子学会 高分子計算機科学研究会

日時 2014年3月13日(木) 10:30~16:30

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

プログラム:

<10:30~10:40> 開会挨拶

[口頭発表時間 15分/件 討論 5分/件 計 20分/件]

<10:40~11:40>

1. 熔融紡糸工程のマルチスケールシミュレーション

(旭化成) ○石川朋希・青柳岳司、(旭化成せんい) 豊田圭一・小島潤一、(東工大院理工) 宝田亘・鞠谷雄士

2. SBF中におけるDNA分子鎖表面へのアパタイト形成

(豊田工大院工) ○竹下貴之・岡本正巳

3. 散逸粒子動力学(DPD)法を用いた有機太陽電池の相分離構造形成メカニズムに関する考察

(三菱化学科学技術研究セ) ○弓削哲治・樹神弘也

昼休み

<13:00~14:00>

4. ポリ(L-ラクチド)、ポリ(DL-ラクチド)のコンフィギュレーションとコンホメーション
: ポリ乳酸の分子特性の触媒依存性

(千葉大院工) ○笹沼裕二・峠大地

5. 全芳香族N-アルキルアミドのヘリックス構造の理論的提案

(東工大院理工) 大津駿・○川内進

6. 分子クラスターアセンブリ法を用いた分子配向構造解析

(日立製作所) 何希倫

<14:15~14:55>

7. Elongation法による高分子の効率的構造最適化とNLO材料設計

(九大院総合理工/JST-CREST) ○青木百合子、(九大院総合理工) 阿部真一・筒井亮太・Liu Kai、(華南師範大&環境学院/JST-CREST) Gu Feng Long

8. 含金属ヘテロナノチューブの電子状態と機能解析に向けたElongation法の応用

(九大院総合理工) ○筒井亮太・Liu Kai・折本裕一、(九大院総合理工/JST-CREST) 青木百合子

[ポスターセッション]

<15:00~16:30>

P-1. 高分子溶融体の流動中の変形

(東北大院理) ○村島隆浩

P-2. 高分子溶融体中に存在する固体粒子の分布構造

(日本ゼオン) ○本田隆

P-3. モデル脂質二重層のコンピュータシミュレーション

(京工繊大院工芸) ○須賀俊貴・藤原進・橋本雅人

P-4. 全芳香族ポリエステル分子の分子動力学シミュレーション

(東工大工) ○羽田野智也、(東工大院理工) 白田圭・服部将也・川内進

P-5. キノイド型低バンドギャップポリマーの理論設計

(東工大工) ○岩崎真皓、(東工大院理工) 林慶浩・日吉淳也・川内進

P-6. Elongation 法による磁性高分子設計と二次電池正極材料設計への応用

(九大院総合理工) ○古谷優樹・Zhu Xun、(九大院総合理工/JST-CREST) 青木百合子

P-7. 全芳香族ポリイミドのコンフォーメーションと非線形光学効果

(東工大院理工) ○白田圭・宮脇亮輔・服部将也・金子将之・渡辺順次・川内進、(岡山大院自然) 木村邦生

P-8. エチレン基を主鎖にもつポリ(エステル-アミド)とポリウレタンの分子特性解析と分子設計

(千葉大院工) ○福田有一郎・宮前宏平・笹沼裕二

P-9. ポリエチレンカーボネートおよびポリプロピレンカーボネートの分子特性解析

(千葉大院工) ○高橋裕太、(千葉大院工) 笹沼裕二

参加要領

1) 定員 100 名

2) 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・シニア会員 2,100 円
(高分子計算機科学研究会メンバー 3,150 円)

3) 申込方法 高分子学会ホームページ (<http://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、開催日までに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 公益社団法人 高分子学会>

郵便振替<00110-6-111688 名義 公益社団法人 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14回高分子計算機科学研究会討論会係

TEL 03-5540-3770 FAX 03-5540-3737

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

