

2014 年度高分子計算機科学研究会・ 高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会

<趣旨> ナノテクノロジーは今後ますます飛躍的な発展が期待されており、キーテクノロジーの一つとして幅広い分野への応用が広がっています。一方、理論計算、シミュレーションは近年の計算機性能の飛躍的な進歩とも相俟って、不均一や複雑系に対する計算予測への適用が盛んに行われるようになってきています。高分子においても、精密合成やナノレベルでの構造制御、技術評価の発展、計算・シミュレーションを活用したナノ構造の解析や物性予測のような計算機科学の領域には共通領域が広く存在しているといえます。高分子ナノテクノロジー研究会と高分子計算機科学研究会では、上記のような観点から共同して研究討論会を定期的に開催しています。参加者と発表者が一体となって活発な討論を行い、さらに懇親会での交流を通じて、新しいアイデアや研究対象を発掘する機会になればと考えています。今年度は特に高分子複合材料の構造・物性をテーマに設定し、ポスター賞も設ける予定です。是非積極的なご参加をお願いします。

主催 高分子学会 高分子計算機科学研究会・高分子基礎物性研究会・高分子ナノテクノロジー研究会

日時 12月19日(金) 10:20~16:45 ※終了後懇親会があります。

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)

交通 東急目黒線・東急大井町線 大岡山駅下車徒歩約1分

プログラム 一般発表時間 20分・討論 4分・交代 1分

12月19日(金)

< 10:20~10:30 > 開会挨拶

< 10:30~12:10 >

1. アクリル酸オリゴマー凝集体の構造・機能予測

(日立)何 希倫

2. ベンゼン環を有する高分子のガラス状態における応力複屈折発現機構

(東工大院理工)〇久保山 敬一、有浦 瑛人、扇澤 敏明

3. 生分解性ポリエステル分子特性と分解酵素種との関係：ポリヒドロキシ酪酸、ポリ乳酸、ポリエチレンサクシネート、ポリブチレンサクシネートについて

(千葉大院工)〇笹沼 裕二、野中 雄太、峠 大地、山口 祐生、勝又 しおり

4. ポリエチレンの UA モデルと Kremer-Grest モデルの比較

(慶應大院理工)〇西村 龍斗、高橋 和義、泰岡 顕治、(京大化研)増淵 雄一

<12:10~13:10> 昼休み

<13:10~14:40> ポスターセッション

P1. フラグメント分子軌道計算の高分子シミュレーションへの応用の試み(その1)

(立教大理)奥脇 弘次、(立教大理・東大生産研)○望月 祐志、(日大歯・東大生産研)福澤 薫、
(JSOL)小沢 拓、大畠 広介、(東大生産研)沖山 佳生、渡邊 千鶴

P2. ボトルブラシ共重合体の精密合成とその新規マイクロ相分離構造

(名大院工)○渡邊 桃加、高野 敦志、松下 裕秀

P3. 水素結合性ブロック共重合体ブレンドを用いたマイクロ相分離構造制御とメソポーラス構造の構築

(名大院工)○吉田 恵、高野 敦志、松下 裕秀

P4. ABC トリブロック共重合体を含むブレンドより形成される新規マイクロ相分離構造

(名大院工)○近藤 弘隆、浅井 大登、浅井 裕介、高野 敦志、松下 裕秀

P5. ハードコア-ソフトシェル粒子系準結晶のモンテカルロシミュレーション

(近畿大理工)○別宮 進一、堂寺 知成

P6. モデル脂質分子の指組み-二重層構造転移に関する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

P7. シスプラチン内包リン酸カルシウムナノ粒子の細胞への取り込みと制がん効果

(豊田工大工)寺田 秀司、(豊田工大院工)○堂村 亮太、岡本 正巳

P8. 感圧性接着剤のモルフォロジー解析

(リンテック)○小曾根 雄一、杉崎 俊夫、(産総研ナノシス)堀内 伸

< 14:40~16:45 >

5. 高速流動下での高分子の摩擦

(京大化研)増淵 雄一

6. 分子動力学によるフィラー充填ゴムの粘弾性に関する研究

(東洋ゴム)○鷺谷 智、日野 理

7. フィラー充填系材料の界面ダイナミクスシミュレーション

(産総研ナノシス)○森田 裕史、(防衛大)萩田 克美

8. 熱可塑性エラストマーの大規模粗視化シミュレーション

(日本ゼオン)本田 隆

9. くし型高分子の結晶化の微視的機構：分子動力学シミュレーションによる挑戦

(山口大院理工)山本 隆

<17:00~> 懇親会