

第1回分子シミュレーション講習会のご案内

主催：日本複合材料学会分子シミュレーション研究会

日時：2018年12月7日(金) 12:30～16:30

会場：埼玉大学サテライトキャンパス東京ステーションカレッジ TSC (秋葉原) TSC-1 室
(東京都千代田区神田須田町 1-7-9 VORT 秋葉原 maxim ビル 4 階)

趣旨：本講習会では、近い将来に分子シミュレーションを高分子複合材料の開発に利用しようとされる方々に向けて、分子シミュレーションの仕組みや使い方、応用例などを入門～基礎レベルで講義します。分子シミュレーションなんて触ったこともないというビギナーの方にもわかるように着手に必要なコンピュータ・ソフト紹介から、基礎理論の説明、簡単な計算事例紹介までを講義します。

講義内容：

- 第1講 12:30～13:05 分子シミュレーションの基礎理論／講師：大矢豊大（東北大学）(Webによる講義)
分子動力学法の大きな目的は、分子構造に立脚して巨視的な物性を予測することである。比較的少数の原子で実験系を再現することが求められており、そのために物理に裏付けられた数々のアルゴリズムが考案されている。力場、熱浴、静電気力といったキーワードをもとにして、これらアルゴリズムの理論的背景とコンセプトを紹介する。
- 第2講 13:10～13:45 高分子材料の分子鎖の多様性／講師：坂井建宣(埼玉大学)
高分子材料は、多様な立体配置(コンフィグレーション)や立体配座(コンフォメーション)をとります。これらの立体規則性について概説し、その違いが機械的特性に及ぼす影響について、実際に分子シミュレーションで解析した結果を紹介します。
- 第3講 13:50～14:25 分子シミュレーション入門／講師：小柳潤(東京理科大学)
分子シミュレーションをこれから取り組もうとする方向けに分子シミュレーション入門をわかりやすく説明します。シミュレーションに着手するためのソフトや、パソコンの必要スペック、また着手するのに必要な費用等、真に入門レベルの講義をします。
- 第4講 14:35～15:10 分子軌道計算入門／講師：田中基嗣(金沢工業大学)
分子シミュレーションにおいて、分子の電子状態や化学反応におけるポテンシャルエネルギーなどを計算できる分子軌道法の併用は非常に有用です。分子軌道計算の利用にあたって最低限知っておくべき原理や、パソコン上で計算するための汎用ソフトの使用法など、入門レベルの講義をします。
- 第5講 15:15～15:50 炭素繊維複合材の解析のための分子動力学計算ソフトの使用法について／講師：森一樹(伊藤忠テクノソリューションズ)
分子動力学(MD)計算を用いて、炭素繊維複合材の解析を行うにあたり、いくつかの重要なポイントが存在します。中でも樹脂のモデルから力場パラメータの作成が難所で、分子が大きくなればなるほど手間が掛かります。パラメータ作成からMD計算までの作業の流れについて詳しく説明します。
- 第6講 15:55～16:30 複合材料成形の分子シミュレーション／講師：松崎亮介(東京理科大学)
複合材料成形に関する分子シミュレーションの事例を紹介します。特に、熱可塑性樹脂の融着、熱硬化性樹脂の硬化反応、含浸過程について、どのようにモデル化しどのような解析ができるのかわかりやすく紹介します。

定員：15名 ※申込み先着順により、定員になり次第締め切ります。

聴講料：会 員：10,000円

非会員：20,000円

学 生：10,000円

※聴講料は当日の受付にてお支払いください(現金のみ)

申込方法・問い合わせ：分子シミュレーション研究会幹事の東京理科大学小柳潤准教授までメール(koyanagi@rs.tus.ac.jp)にて直接ご連絡ください。