

平成13年11月6日

日本学術振興会  
プロセスシステム工学第143委員会  
委員長 小野木 克明

プロセスシステム工学第143委員会

第135回委員会・平成13年度第4回研究会 開催通知

(143委員会ホームページ <http://jsps143.pse.nuce.nagoya-u.ac.jp/>)

1. 日時：2001年12月7日（金）13:00～17:00
2. 場所：京都テルサ 東館3階スポーツセンター内 BC会議室  
(京都市南区東九条/電話：075-692-3400)  
交通：JR京都駅八条口から徒歩10分  
URL：<http://www.kyoto-terrsa.or.jp/>
3. 委員会：(13:00～13:20)  
新規ワークショップ紹介  
制御性能監視—プロセス産業での実用化を目指して—  
京都大学 加納 学 委員
4. 研究会：(13:20～17:00) テーマ：「分子シミュレーション技術をPSEはいかに取り込むか」  
13:20～14:20 「分子シミュレーションによる物性推算と材料設計」  
大阪大学大学院基礎工学研究科 新田 友茂 氏  
<概要>分子シミュレーションは平衡物性の再現から始まって非平衡現象までを扱うようになってきた。化学プロセスの設計に必要な平衡物性・輸送物性を現在の分子シミュレーションはどこまで表し、予測できるのか？さらに進んで量子化学計算を取り込み、ナノ空間の現象解明から材料設計を展望する分子シミュレーションの現状と課題を探りたい。  
14:20～15:20 「高分子の長時間物性を予測する新しい分子シミュレーション手法」  
名古屋大学大学院工学研究科 増渕 雄一 氏  
<概要>分子シミュレーションは分子の運動を計算することでマクロな物性を予測する手法であり、種々の分野で一定の成果を上げてきている。ところが高分子は、分子量が大きいことと、問題となる現象が長時間の緩和を含むことが多いことから、分子シミュレーションで扱える問題は限られている。その現状を紹介するとともに、この壁を乗り越えるために我々が開発している、高分子系の千秒をこえるような長時間の現象を扱える新しい分子シミュレーションの手法について紹介する。  
15:20～15:35 コーヒーブレイク  
15:35～16:35 「分子シミュレーションを利用した物性推算について」  
三菱化学(株) 科学技術研究センター物性研究所 坪井 明男 氏  
<概要>企業におけるプロダクト及びプロセス開発において、分子シミュレーションがどのように活用され、期待されているかについて、物性推算を中心として紹介する。  
16:35～17:00 総合討論「分子シミュレーション技術をPSEはいかに利用できるか」  
分子シミュレーションの現状と今後の進展を踏まえて、PSEの研究者が取り組むべき課題について議論する。

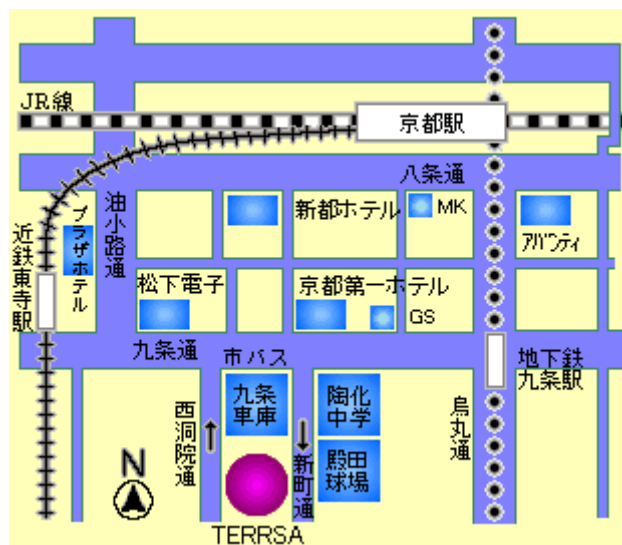
<追記>

準備の都合がありますので、出欠を裏面にご記入の上、11月30日（金）までにご回答下さい。

[送信先]

名古屋大学工学研究科 分子化学工学専攻 小野木 克明 FAX：052-789-3267

## 京都テルサまでのご案内



京都市南区新町通九条下ル 京都府民総合交流プラザ内  
TEL 075-692-3400 (代)  
FAX 075-692-3410

- JR 京都駅(八条口西口)より南へ徒歩約10分
- 近鉄東寺駅より東へ徒歩約5分
- 地下鉄九条駅④番出口より西へ徒歩約5分
- 市バス九条車庫南へすぐ
- 名神京都南インターより国道1号北行き市内方面へ九条通を東へ、九条新町交差点を南へ、進入路あり地下駐車場200台(有料)