

# ケミカルスマートものづくり

## 計算化学スクール

# キックオフセミナー

理論計算によるシミュレーションを有効活用した製品開発が加速化しています。和歌山県では計算化学に基づくものづくりの効率化を「ケミカルスマートものづくり」と命名し、本年度県内化学系企業での計算化学の利用促進に関する取り組みを実施します。具体的には計算化学を実施可能な環境の整備を行い、さらには皆様に計算化学に触れ、活用いただくための「計算化学スクール」を実施いたします。

スクール開催にあたり、計算化学がどのように活用されているかを知っていただくため本キックオフセミナーを開催し、企業で実際に利用している技術者からその魅力と利用例についてご紹介いただきます。

### プログラム

**開催挨拶** 和歌山県工業技術センター 所長 和坂 貞雄 氏

**事業内容紹介** (13:35~13:45)

和歌山県工業技術センター 化学産業部 部長 前田 拓也 氏

**計算化学の活用事例紹介** (13:45~17:00)

#### ①量子化学計算の活用事例

「化学企業における量子化学計算の活用について」  
(一何ができるか、有効に活用するにはどうしたらよいか)

元 株式会社カネカ 先端材料開発研究所 毛利 文仁 氏

休憩

#### ②分子動力学計算の活用事例

「化学企業における材料物性シミュレーション」  
花王株式会社 解析科学研究所 久保 宏記 氏

**事務連絡** (17:00~)

計算化学スクール応募についての注意事項



アクセス

**平成28年9月28日(水)**  
**13:30~17:30**  
**ダイワロイネットホテル和歌山**  
**4階ブランシェ**

**参加費：無料**

**募集定員：60名(先着順)**

同様の内容は下記ホームページからも確認できます。  
[http://www.kishi-ltd.co.jp/chemical\\_school/kick\\_off](http://www.kishi-ltd.co.jp/chemical_school/kick_off)



※本事業は平成27年度補正予算 地方創生加速化交付金で実施しています。

## 講演概要

### 講演①「化学企業における量子化学計算の活用について」 (一何ができるか、有効に活用するにはどうしたらよいか)

講師：元株式会社カネカ 先端材料開発研究所 毛利 文仁 氏

企業、特に化学企業における量子化学計算の活用例を、各種スペクトルの計算、化学反応性の予測、および接着剤、色素、光学ポリマーなど機能性化学品を例にとって紹介します。また量子化学計算の化学工学と特許出願への応用にも触れます。最後に、量子化学計算を含め、計算科学が企業の研究開発現場で有効に活用され、職場文化として根付くようにするには、どうしたらいいのかについての私見を提言させていただきます。

### 講演②「化学企業における材料物性シミュレーション」

講師：花王株式会社 解析科学研究所 久保 宏記 氏

近年、計算化学関連ソフト、ハードの進歩と利用環境の充実に伴い、計算化学は企業の実験化学者にとって身近な存在となりつつある。比較的単純な分子物性であれば、分子構造入力のみで十分使用に耐えうる精度での予測は可能であり、一方で複雑な構造を有する物質の複雑な現象を理解する際においても、計算化学は合理的な解釈の仕方を与えてくれる。本講演では花王の計算化学の役割と、材料物性シミュレータOCTAの適用事例を中心に化学メーカーにおける計算化学の一端を紹介する。

## キックオフセミナー 参加申込

募集定員：60名(先着順)

参加費：無料

申込方法：下記申込用紙にご記入の上、(株)貴志宛にFAXで申し込みをお願いいたします。

申込締切：平成28年9月20日(火)

申込FAX送付先番号：073-432-5677

お申込に関するお問い合わせ

株式会社 貴志 担当：西脇

連絡先：TEL 073-431-5131

E-Mail nishiwaki@kishi-ltd.co.jp

会社・団体名		
申込者①	部署・役職	
	氏名	
	E-mail	@
申込者②	部署・役職	
	氏名	
	E-mail	@
連絡先	〒	-
	TEL	- - FAX - -
備考		

■記載されました個人情報については「ケミカルスマートものづくり キックオフセミナー」および「計算化学スクール」開催のため使用させていただき、その内容につきましては第三者に対し一切の開示はいたしません。

### 計算化学スクールについて

スクール実施期間 平成28年10月14日～平成29年1月27日(全10回)

スクール内容 化合物物性、反応性予測シミュレーション講座  
材料物性予測シミュレーション講座

スクール会場 和歌山県工業技術センター

募集定員 10名

詳しい内容やお申込み方法については下記ホームページをご覧ください。

[http://www.kishi-ltd.co.jp/chemical\\_school](http://www.kishi-ltd.co.jp/chemical_school)