

# ケミカルスマートものづくり 計算化学スクール ステップアップセミナー

計算化学による効率的なものづくりを知っていただく「ケミカルスマートものづくり」ステップアップセミナーを開催いたします。本セミナーでは、利用促進の取り組みの発展型として、計算化学のより高度な活用事例をご紹介します。

計算化学スクールにご参加の企業の方はもちろんですが、最先端の材料開発ツールに興味のある県内企業の方々の積極的なご参加をお待ちしております。

## プログラム

### 開会挨拶

### 計算化学の活用事例紹介

講演① (13:40 ~ 14:50)

「量子化学計算による化学反応の研究方法」

東京工業大学工学部 理工学研究科 准教授 川内 進氏

講演② (14:50 ~ 16:00)

「分子会合と“Spartan”を用いる“do-it-yourself”計算化学」

大阪大学 名誉教授 柳田 祥三氏

休憩 (16:00 ~ 16:10)

講演③ (16:10 ~ 17:20)

「OCTA を用いた高分子材料シミュレーション事例」

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 研究チーム長 森田 裕史氏

閉会にあたって (17:20 ~)

# STEP UP

平成29年2月22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/stepup](http://www.kishi-ltd.co.jp/chemical_school/stepup)

※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「量子化学計算による化学反応の研究方法」

講師：東京工業大学工学部 理工学研究科 准教授 川内 進氏

量子化学計算が最も有効なものの一つに化学反応の機構解明と反応性予測がある。

本講義では、ケイ素化合物の特異な反応機構の解明の成功例を題材にして、量子化学計算による化学反応の研究方法を具体的に紹介する。

## 講演②「分子会合と "Spartan" を用いる "do-it-yourself" 計算化学」

講師：大阪大学 名誉教授 柳田 祥三氏

実在分子は、水素結合や van der Waals 力とクーロン力相互作用で少なくとも2分子分子会合しています。Wavefunction の計算ソフト「Spartan」は、その優れた do-it-yourself 機能により、会合分子の軌道エネルギー構造、電磁波吸収スペクトル (UV/Vis, IR/FIR, NMR, Raman)、さらに、太陽電池や有機発光デバイスにおける分子レベルの会合構造が影響する電子移動など、会合分子の構造研究の理解と検証・予見を可能にします。

最近の実験的計算化学の検証と予見の成果を解説します。

## 講演③「OCTA を用いた高分子材料シミュレーション事例」

講師：国立研究開発法人 産業技術総合研究所 研究チーム長 森田 裕史氏

OCTA は 2002 年に公開されて後、産学官様々なところで使われるようになってきている。また、OCTA の適用できる範囲はますます広がってきており、高分子界面の問題から、溶媒蒸発過程、リソグラフィー等まで広がりを見せている。本講演では、これらの適用事例を紹介し、OCTA の適用の可能性について、説明する。

# ステップアップセミナー 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29年 2月10日(金)

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 ステップアップセミナー」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。