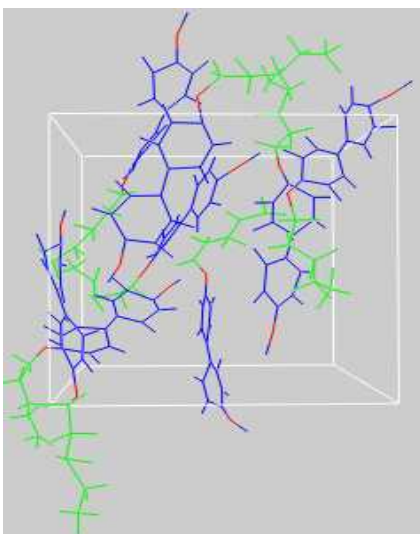


シミュレーションで分子の働き・役割を知る

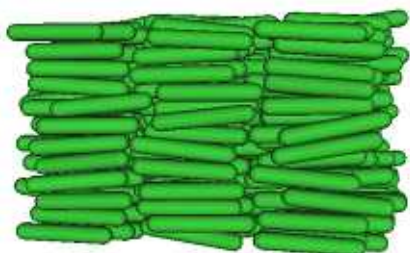
キーワード [液晶, 高分子, 分子シミュレーション]

准教授 香田智則

フルアトムモデルから粗視化分子モデルまでの
分子シミュレーションを設計いたします



フルアトムモデル
(分子を構成する
原子まで考慮し
たモデル)



粗視化分子モデル
(分子構造のおお
よその特徴を捉え
たモデル)

内容:

我々の身の回りにある材料の多くは、分子が集まってできたものです。もちろん、食塩のように分子の定義できない材料もありますが、私の研究は、材料を構成する要素である分子に着目します。すなわち、材料の性質を決めるものは分子の性質と、分子が集まって形づくる構造であると考えます。そして、注目する材料を決めたら、分子シミュレーションという手法を用いて、コンピュータの力を借りて、分子の動きを捉えることを試みます。上手く行くと、分子がどのような役割をしているか、を知ることができます。現在は、新しい液晶材料を創製するためのシミュレーションや、ご飯が炊きあがる仕組みを調べるためのシミュレーションなどを行っています。また、**シミュレーションで得られるイメージから、新しいテクノロジーにつながるアイデアを生みだしたいと考えています**。身の回りで起こっている現象を、分子という観点で考えてみたい、また、分子という観点で捉えてみたい材料がある、という場合は是非お声がけ下さい。

分野: 機能高分子工学
専門: 分子シミュレーション, 統計物理学

E-mail: koda@yz.yamagata-u.ac.jp
Tel(Tel&Fax): 0238-26-3066

