

第 40 回溶融塩化学講習会

計 算 機 科 学

— 溶融塩・イオン液体の物性を如何に予測するか? —

主 催：(社)電気化学会溶融塩委員会

水、有機溶媒のような分子液体とは異なるユニークな液体としてイオン液体が注目され、基礎から応用まで活発に研究開発されております。それに伴い現状のイオン液体よりも優れた新しいイオン液体が求められるケースも増えており、イオン液体の分子設計指針がますます必要となってきております。ところがイオン液体を構成するアニオン、カチオンの組み合わせは無限と言っても良いほど多数であり、これらすべてを網羅的に合成、検証することは極めて困難です。一方、従来の無機イオンからなる溶融塩では早くから計算機シミュレーションによる溶融塩研究が盛んに行われ成果を上げており、また近年ではより構造が複雑なイオン液体系においても分子動力学計算等が行われるようになるなど、計算機の性能向上にともないますます盛んになっていくものと思われまます。本講習会では、溶融塩／イオン液体に関する計算機科学に焦点を当て、計算機科学初心者のみならず、実験科学者の今後の溶融塩／イオン液体開発に向けた計算機科学の適用について考えるきっかけとしていただければと考えております。皆様のご参加をお待ちしております。

日 時 2009 年 11 月 18 日(水) 13:00-18:30

場 所 大阪大学吹田キャンパス

材料開発・物性記念館 2 F 研修室 (大阪府吹田市山田丘 2-1)

(http://www.eng.osaka-u.ac.jp/ja/access/pdf/campus_map.pdf 中の「R4」)

プログラム

	13:00-13:10	開会挨拶		
1	13:10-14:10	第一原理分子軌道法によるイオン液体のイオン対相互作用の計算と MO 法による拡散係数とイオン構造依存性 (仮題)	産総研	都築 誠二
2	14:10-15:10	イオン液体の液体構造および金属イオン溶媒和に関する実験および理論的アプローチ	九大院理	梅林 泰宏
	15:10-15:25	休憩		
3	15:25-16:00	SCIGRESS による分子動力学計算の概要	富士通 (株)	海老沢 幸子
4	16:00-17:00	分子動力学法による輸送係数評価 -Fumi-Tosi モデルから分極イオンモデルまで-	新潟大	大鳥 範和
5	17:00-18:00	第一原理 DFT 計算による固体／イオン液体界面のエネルギー計算	産総研	香山 正憲
	18:00-18:30	質疑応答		

定 員 60 名(先着順)

参加費 会員(協賛学協会員を含む)6,000 円, 学生会員(協賛学協会員を含む)3,000 円,

(税込) 学生非会員 4,000 円, 非会員 8,000 円

テキストのみ購入 (会員、非会員とも) 4,000 円 (税込)

なお、セミナー当日、溶融塩委員会へ入会された場合、参加費を 1,000 円とさせていただき、差額を溶融塩委員会の入会金・年会費の一部とさせていただきます。

※富士通 SCIGRESS 体験版を講習会直前にインストールしたノート PC をご持参頂く事を推奨いたします。
(詳細については溶融塩委員会 HP に掲載予定)

参加申込方法：下記指定の URL からお申し込み下さい。(締切：11 月 6 日(金))

<http://msc.electrochem.jp/koushu40.html> なお、Web からの申し込みが困難な場合は、郵送・E-mail による申し込みも可能です。その場合は下記の内容をご連絡下さい。

1. 参加者氏名、2. 所属、3. 連絡先 (郵便番号・住所・電話番号・FAX 番号・E-mail アドレス)
4. 会員資格 (会員扱いで参加を希望される場合は、入会している協賛学会名を記載して下さい)
5. 会費支払予定日 (当日の現金取扱いはいたしませんので、ご注意下さい)

申込・問合せ先 〒563-8577 大阪府池田市緑丘 1-8-31

独立行政法人産業技術総合研究所

世話人 松本 一

(TEL: 072-751-9426 FAX: 072-751-9622, E-mail: h-matsumoto@aist.go.jp)