

## 第 55 回新大先端化学セミナー

主 催： 理学部化学プログラム

自然科学研究科数理物質科学専攻化学コース

共 催： ユビキタスグリーンケミカルエネルギー連携教育研究センター

演 題： ソフトマテリアルの分子間力設計とデータサイエンスへの展開

演 者： 北里大学・未来工学部 石井良樹 講師

日 時： 2024 年 11 月 5 日 16:25-17:55

会 場： 情報理工棟 2 階第一ゼミ室

講演概要： 高分子や超分子などのソフトマテリアルは高次構造を形成することで、その集合体に応じて複雑な材料機能を発現することから、構造形成を駆動する分子間力の機序解明が期待されています。そこで我々は、計算化学のアプローチを用いることで、分子モデルの設計やソフトマテリアルの内部～界面における構造・分光・熱力学・輸送特性の学理構築を進めてきました。本セミナーでは、国内のスパコンを使って得られた最新の研究成果とデータサイエンスへの展開について紹介します。

問い合わせ先： 理学部化学プログラム 大鳥範和