

# 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PJ) シミュレータ公開説明会

【開催趣旨】 超超PJ(2016年より実施中)では、有機・高分子材料を主な対象として、幅広い時空間スケール(マルチスケール)を扱い、材料設計開発を加速することが期待される、種々の機能・用途を持つシミュレータ群を開発しました。この度、PJ前半3年間の成果物であるそれらのシミュレータ群を一般に広く利用していただくために、公開・配布を行います。本説明会では、公開シミュレータの情報提供の一環として、各シミュレータ公開バージョンの内容について、詳しく紹介します。

【日時】 2019年4月12日(金) 13時～18時00分(予定)  
開場・受付開始 12時30分

【主催】 産業技術総合研究所(AIST)、先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) 共催

【後援】 日本化学会、高分子学会、応用物理学会

【場所】 産業技術総合研究所 臨海副都心センター(東京都江東区青海2-4-7) 別館11F 会議室

【アクセス】 新交通ゆりかもめ「テレコムセンター」駅下車 徒歩3分 他以下をご参照ください。  
[https://www.aist.go.jp/aist\\_j/guidemap/tokyo\\_waterfront/tokyo\\_waterfront\\_map\\_main.html](https://www.aist.go.jp/aist_j/guidemap/tokyo_waterfront/tokyo_waterfront_map_main.html)

## 【プログラム】

### 1. はじめに

- (1) 13:00～13:10 趣旨説明 超超PJ プロジェクトマネージャー (NEDO 岡本 昌彦)
- (2) 13:10～13:20 概要説明 超超PJ プロジェクトリーダー (産総研理事 村山 宣光)

### 2. 公開シミュレータ内容説明

- (1) 13:20～13:45 電気、光等のキャリア輸送シミュレータ(拡張 CONQUEST)  
産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 中村 恒夫
- (2) 13:45～14:10 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ(I) (ESM-RISM)  
産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 大谷 実
- (3) 14:10～14:35 界面原子ダイナミクス・反応シミュレータ(II) (HybridQMCLT)  
名古屋工業大学大学院 工学研究科 尾形 修司
- (4) 14:35～15:00 モンテカルロフルバンドデバイスシミュレータ  
産業技術総合研究所 ナノエレクトロニクス研究部門 福田 浩一
- (5) 15:00～15:25 誘電率等の外場応答物性シミュレータ  
産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 三宅 隆  
～ 休憩 (10分) ～
- (6) 15:35～16:00 電圧印加粗視化分子動力学シミュレータ(拡張 COGNAC/Lammps)  
産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 青柳 岳司
- (7) 16:00～16:25 汎用インターフェース(拡張 OCTA)  
先端素材高速開発技術研究組合 齋藤 健
- (8) 16:25～16:50 フィラー充填系コンポジットシミュレータ(拡張 KAPSEL)  
産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 青柳 岳司
- (9) 16:50～17:15 ナノカーボンコンポジット用シミュレータ(SOBA)  
先端素材高速開発技術研究組合 本田 隆
- (10) 17:15～17:40 反応性流体シミュレータ  
産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 松本 純一

### 3. 総合質疑応答

17:40～18:00 全体を通しての質疑、問い合わせ方法、支援体制等に関する説明

## 【参加方法】

事前登録制 参加費無料 会場定員(120名)  
所属・氏名・連絡先メールアドレス を記載のうえ、下記アドレスまでお申し込みください。  
[u2m-seika2019-ml@aist.go.jp](mailto:u2m-seika2019-ml@aist.go.jp)