

# 高分子材料をモデリングする

キーワード[液晶, 高分子, 分子シミュレーション]

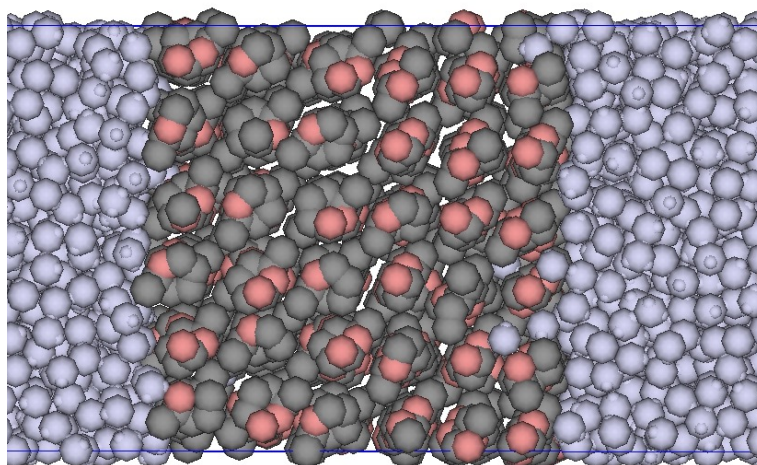
教授 香田 智則

## 全原子モデルの例

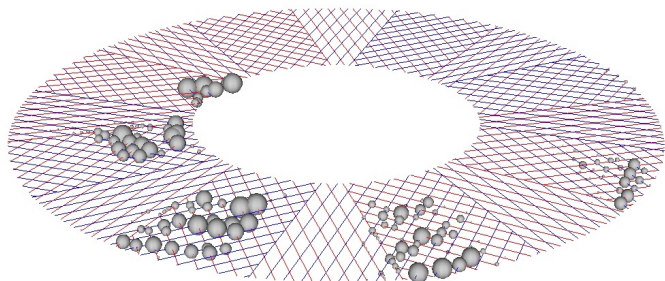
水

セルロース

水



## 臼による粉碎のモデル



内容:

モデルとは、ものごとを正確に理解するための仕組み・概念・物などのことを言います。モデリングとはモデルを作ることです。私はモデリングにより高分子材料を理解するための研究を進めています。高分子材料を理解するためにモデルを作ります。モデルを使って計算機シミュレーションを行います。

分子を原子の集まりとして考えるということもモデリングの1つで、その結果として分子シミュレーションのための全原子モデルが得られます。左上図に全原子モデルによる分子シミュレーションのスナップショットを記します。セルロースに水が接する様子を計算した結果です。

もう一つの例として、臼による粉碎のモデルを左下図に記します。我々は臼による澱粉やセルロースの構造制御に関する研究もしています。

アピールポイント:

- 分野にこだわらず興味を持ちます。
- 新しい発見や自分で考えたことに重きを置きます。
- 斬新な発想をします。

分野: 高分子・有機材料工学  
専門: 統計物理学、成形加工

E-mail : [koda@yz.yamagata-u.ac.jp](mailto:koda@yz.yamagata-u.ac.jp)

Tel : 0238-26-3066

Fax : 0238-26-3066

HP : <https://nishioka-lab.yz.yamagata-u.ac.jp>

