

## A-グループ:まとめ 塗膜新機能に対するシミュレーションの活用

- ◆機能という観点では、どこをシミュレーションするか:構造制御、組成制御:  
求める機能によってシミュレーションする領域の絞り込みが必要  
⇒光学etc.ナノ物性発現でマイクロレベルのシミュレーションではミスマッチ
- ◆新機能物性を正確に説明する精緻なシミュレーションは困難という認識  
適切な近似は必要に応じて入れるべき(実際は複雑な系が多々:分布,反応)  
⇒使いやすいシミュレーション
- ◆シミュレーションの緻密化に併せ、実験(測定評価技術)も向上すべき  
現実が評価できていないのに、シミュレーションの妥当性は議論できない

新機能の要求レベルが向上し、移り変わりも早い中で、正確な物性シミュレーションは現実的では無いが、適切な近似を入れながら、(個人PCでできるような形での落とし込みで)ぜひ活用していきたい。

# 討議メモ

構造制御か組成制御か？

光学フィルム 液晶材料の配向制御 複屈折のコントロール

記録メディア 磁性体の配列制御

マルチスケールシミュレーション

第一原理計算から、物性や構造設計

塗布のシミュレーションはマクロスケールからのスケールダウン

⇒ どこまでのスケールダウンが必要か？

⇒ 機能によってはナノオーダーの議論になっている

マイクロオーダーは

構造制御はマイクロオーダーが今のところ限界か？

相分離

近似が出来ていることをシミュレーションで証明する

液から核発生で固体化していくような系をどう扱うか？

分布があるようなパラメータをどのように扱うか？

⇒ 平均化してシミュレーション、場合によっては分布が機能発現に必要な場合がありシミュレーションが難しい。

⇒ 粒径分布、表面粗さなどが該当。ある程度モデル化する必要がある。

⇒ 評価手段の精密化がセットで必要。

・ 摩擦

・ 繊維状の物質のシミュレーション ⇒ 粒子の連続体として取り扱くと、粒子系として扱える可能性がある。

高分子の加工条件による構造制御シミュレーションの可能性は？

結晶はある程度わかるが、非晶構造が評価できず、シミュレーション結果の検証が困難

高輝度放射光を用いた分析で、分子オーダーの解析が出来るようになると、シミュレーションも出来るようになるかもしれない。

生産技術の世界でも、平均化、近似によるシミュレーションの手法は重要。

⇒ 現場でのシミュレーション活用においては、インプットの制御が出来ているかも考える必要がある。

⇒ アウトプットが正しく評価出来ているか？