

# ゼロから学ぶ分子動力学シミュレーション

1名分料金で  
2人目無料

## —基礎から材料開発へ— 【LIVE配信】

◆日時:2026年2月12日(火)13:00~16:00

◆会場:自宅や職場など世界中どこでも受講可

◆聴講料:1名につき49,500円(税込、資料付)

※会員登録(無料)をしていただいた方には下記の割引・特典を適用します。

・1名でお申込みされた場合、1名につき46,200円(税込)

・2名同時でお申し込みされた場合、2人目は無料(2名で49,500円(税込))

### セミナーお申込みFAX

03-5857-4812

※お申込み確認後は弊社よりご連絡いたします。

●講師:(国研)産業技術総合研究所 マテリアルDX研究センター 主任研究員 森下 徹也 氏

#### 【受講対象・レベル】

MDシミュレーションを初めて学ぶ方。MDシミュレーションの実行やデータ解析の基礎を習得したい方、など

#### 【趣旨】

分子動力学(MD)シミュレーションは、原子レベルから物質の性質を予測することが可能なコンピュータシミュレーション手法です。近年は学術分野に加えて、ナノスケールの材料開発や創薬など、幅広い産業分野で重要な開発ツールとして位置付けられています。

本講義は、MDシミュレーションについて初めて学ぶ方や、基礎的な理論・アルゴリズムを復習したい方などを対象とします。MDシミュレーションで扱うことのできる現象や、予測できる熱力学量や材料特性について、基礎レベルから講義します。

特に書籍などでは触れられることが少ない、統計力学とMDシミュレーションとの密接な関係を解説し、MDシミュレーションのデータ解析において重要なポイントや注意点を紹介します。

また、産業分野での材料設計に繋がるシミュレーション例も紹介します。

#### 【プログラム】

1. はじめに

#### 2. 基礎編(アルゴリズムと基礎理論)

2-1 ミクロな話1:運動方程式の数値積分

2-2 ミクロな話2:原子間相互作用(力場)と周期境界条件

2-3 マクロな話:MDシミュレーションと統計力学

#### 3. 応用編(温度・圧力制御とデータ解析)

3-1 温度制御手法:カノニカル集合の生成

3-2 温度圧力制御手法:圧力集合の生成

3-3 データ解析:熱力学量や材料特性の評価方法

#### 4. シミュレーションの実例紹介

半導体材料探索や流体特性評価など、時間に応じて話題を選択

【質疑応答】

#### 【LIVE配信セミナーとは?】

- ・本セミナーは「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。「ミーティング用Zoomクライアント」をダウンロードするか、Webブラウザから参加するかの2種類がございます。ZOOM WEBセミナーのはじめかた(<http://www.rdsc.co.jp/files/instruction/zoom.pdf>)をご覧ください。
- ・お申込み後、受理のご連絡メールをさせていただきます。一部メールが通常セミナー形式(受講券、請求書、会場の地図)になっておりますが、LIVE配信のみのセミナーです。
- ・お申込み後、接続テスト用のURL(<https://zoom.us/test>)から「ミーティングテストに参加」を押していただき動作確認をお願いします。
- ・後日、別途視聴用のURLをメールにてご連絡申し上げます。セミナー開催日時の10分前に、視聴サイトにログインしていただき、ご視聴ください。
- ・セミナー資料は前日までには、お送りいたします。タブレットやスマートフォンでも視聴できます。

### 『分子動力学シミュレーション【WEBセミナー】』セミナー申込書

会社・大学		
住所	〒	
電話番号		FAX
お名前	所属・役職	E-Mail
①		
②		

会員登録(無料) ※案内方法を選択してください。複数選択可。  Eメール  郵送

#### ●セミナーの受講申込みについて ●

必要事項をご明記の上、FAXでお申込み下さい。弊社で確認後、必ず受領のご連絡をいたします。受講用URLは後日お送りいたします。

セミナーお申込み後のキャンセルは基本的に受けしておりませんので、ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。

お申込み・振込に関する詳細はHPをご覧下さい。  
⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/entry>

個人情報保護方針の詳細はHPをご覧下さい。  
⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/privacy>



株式会社R & D 支援センター

〒135-0016 東京都江東区東陽3-23-24 VORT東陽町ビル7階  
TEL) 03-5857-4811 FAX) 03-5857-4812 URL) <https://www.rdsc.co.jp/>