

# 分子動力学(MD)法の基本原理・具体的な技法から 高分子材料開発への応用

セミナーURLはこちら→ <https://www.rdsc.co.jp/seminar/2504127>

- ◆日時:2025年10月15日(水) 13:00~17:00
- ◆【アーカイブ配信受講:10/16(木)~10/23(木)】を希望される方は、  
⇒ <https://www.rdsc.co.jp/seminar/2504127A> こちらからお申し込み下さい。
- ◆【WEB限定セミナー】在宅、会社にながらセミナーを受けられます
- ◆受講料:1名につき49,500円(税込、資料付)

会員(案内)登録していただいた場合、通常1名様申込で49,500円(税込)から  
・1名で申込の場合、**46,200円(税込)**へ割引になります。  
・2名同時申込で両名とも会員登録をしていただいた場合、**計49,500円(2人目無料)**です

## 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:福井大学 学術研究院 工学系部門 理工工学講座 教授 博士(工学)玉井 良則 氏

### 【受講対象】

・原子・分子レベルの計算機シミュレーションを用いた材料設計に興味のある方。  
・データ駆動型の材料開発に従事されている方で、より広く周辺技術を学びたい方。  
・若手技術者や新人の基礎教育の一環としての受講にも適しています。

### 【講演の趣旨】

理論、実験に次ぐ第3の手法である「計算科学」は、コンピュータの高性能化に伴い、産業界においても実用的に活用されつつあります。計算科学には種々の手法がありますが、分子動力学(MD)法は、原子レベルのミクロなシミュレーションにより、マクロな熱力学量や各種物理量を直接算出できる特徴があり、分子レベルの材料設計に適した手法です。また、近年発展が著しいデータサイエンス・AIを用いた材料設計手法とは相補的な関係にあり、両者を組み合わせることにより活用の道が広がります。

本セミナーでは、MD法の基本原理、具体的な計算手法、物理量の算出法について、背景も含めて基礎から丁寧に解説します。さらに、高分子材料開発、特に機能性分離膜の設計に関する応用事例を紹介します。

### 【プログラム】

1. 計算科学の方法
  - 1-1 計算科学とは
  - 1-2 各手法の特徴, マルチスケール
  - 1-3 データ駆動型手法との協調
2. 分子動力学(MD)法の基礎
  - 2-1 ポテンシャル関数・力場
  - 2-2 周期境界条件
  - 2-3 運動方程式の解法
  - 2-4 長距離力の計算
  - 2-5 アンサンブルの発生(温度, 圧力制御)
  - 2-6 その他の各種手法
3. 解析方法と得られる物理量
  - 3-1 熱力学量の計算
  - 3-2 静的諸量(分子構造, 動径分布関数, 構造因子)
  - 3-3 ダイナミクス(輸送係数, 時間相関関数, スペクトル)
  - 3-4 自由エネルギー
4. 高分子材料開発への応用
  - 4-1 MDシミュレーションの実際
  - 4-2 アモルファス構造とガラス転移温度
  - 4-3 結晶構造
  - 4-4 機能性分離膜の設計
5. ソフトウェアとMD法活用のポイント

申込書	※ご希望の参加形式にチェックを入れて下さい⇒< <input type="checkbox"/> LIVE / <input type="checkbox"/> アーカイブ >		
会社・大学			
住所	〒		
電話番号		FAX	
お名前	所属・役職	E-Mail	
①			
②			

### ● 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にお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をご覧ください。  
⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/entry>

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