高分子のもつ階層構造の形成機構を明らかにして、高分子材料開発へとつなげるには 高分子シミュレーションでよく用いられるソフトウェアについて、最近の研究事例を交えて解説



_ive配信(リアルタイム配信)】 分子シミュレーションの基礎と 高分子材料開発の効率化への展開



日時

2021年6月29日(火) 11:00~16:30

Live配信セミナー ※会社・自宅にいながら学習可能です※

受講料

49,500円 ⇒ テレワーク応援キャンペーン 【Live配信/WEBセミナー受講限定】 1名申込みの場合:受講料 定価:35,200円/※E-Mail案内登録価格 33,440円

資料付

※ E-Mail案内または郵送DM案内の希望を登録の方はE-mail案内登録価格になります。 ※ 同一企業で複数名E-Mail案内登録されている場合は、本割引ではなく「2名同時申込みで1名分無料」割引を適用させて頂きます

講師

京都工芸繊維大学 材料化学系 教授 博士(理学) 藤原 進 氏

趣旨

高分子材料開発を効率的に行う上で、今や分子シミュレーションは極めて重要な役割を担っている。高分子のもつ特徴の一つとして、 凝集構造の階層性を挙げることができる。高分子材料開発においては、このような階層構造の形成機構を明らかにする必要がある。 本セミナーでは、階層的な構造をもつ高分子の構造形成に焦点を当て、その基礎概論を述べたあと、高分子のモデリング手法や分 子シミュレーション手法の基礎を解説する。また、OCTAやLAMMPS、Gromacsなど、高分子シミュレーションにおいてよく用いられるソフ トウェアについても、最近の研究事例を交えながら、その概要を紹介する。

プログラム

- 1. 高分子構造形成の基礎概論
 - 1.1 高分子の結晶化
 - ・高分子の配向構造
 - ポリエチレンの結晶化 ・ポリエチレンの単結晶
 - 1.2 ブロック共重合体のミクロ相分離
 - ・マクロ相分離
 - ・ミクロ相分離
- 2. 高分子のモデリング
- 2.1 階層構造 ~結晶性高分子を例にとって~ 2.2 全原子モデル
- 2.3 粗視化モデル ~2つのアプローチ~
- 3. 高分子のシミュレーション手法
 - 3.1 モンテカルロ(MC)法
- 3.2 分子動力学(MD)法 3.3 ランジュバン動力学(LD)法
- 3.4 散逸粒子動力学(DPD)法

- **4.ソフトウェアの特徴** 4.1 OCTA(COGNACなど)
- 4.2 LAMMPS
- 4.3 NAMD
- 4.4 AMBER
- 4.5 Gromacs

5. 研究事例

- 5.1 高分子の構造形成
- 5.1.1 単一高分子鎖の構造形成
- 5.1.2 単一屈曲 半屈曲 ジブロックコポリマーの折り畳み転移 5.1.3 末端帯電デンドリマーと線状高分子電解質の複合体化 5.1.4 細孔中のシクロヘキサンで観測される相転移
- 5.2 両親媒性分子の自己会合
- 5.2.1 両親媒性分子のミセル形成
- 5.2.2 双頭型両親媒性分子の高次構造形成

□質疑応答□

本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信となります。予め「Zoom」のインストールが可能か、接続可能か等をご確認ください。 ・セミナー資料は電子ファイルにてダウンロードいただきます。詳細はホームページをご確認下さい。

■2名同時申込みで1名分無料■

(1名あたり定価半額の24.750円)

※2名様ともE-Mail案内登録をしていただいた場合に限ります。 ※他の割引は併用できません。 ※同一法人内(グループ会社でも可)による2名同時申込みのみ適用いたします。 ※3名様以上のお申込みの場合、左記1名あたりの金額で受講できます。 ※受講券、請求書は、代表者にご郵送いたします。 ※請求書および領収書は1名様ごとに発行可能です。(通信欄に「請求書1名ごと発行」と記入ください。)

※講師、プログラムの内容が変更になる場合もございます。最新の情報はHPにてご確認ください。※申込用紙が複数枚必要な場合等は、本用紙をコピーしてお使いください。

セミナー申込用紙 B210679(分子シミュレーション) お申し込みには会員の事前登録が必須となります ※太枠の中をご記入下さい。※口にチェックをご記入ください。 ※E-mailアドレスまたはFAX番号を必ずご記入下さい。 会社名 団体名 今後のご案内) □E-mail希望・登録済み | E-Mail案内登録価格 部署 □郵送希望・登録済み を適用いたします。 (E-mailアドレス必須) 口希望しない Ŧ 役 職 お支払方法) ふりがな 住 所 □銀行振込(振込予定日 日) 氏 名 通信欄 TEL FAX ※申込みに関する連絡に使用するため、可能な限りご記入ください。 E-mail

●受講料について 「2名同時申込みで1名分無料」については上記の注意事項をお読みください。

●お申込みについて 申込用紙に必要事項をご記入のうえ、FAXでお申込みください。 また、当社ホームページからでもお申込みいただけます。 お申込みを確認次第、請求書・受講券・会場案内図をお送りします。 ●お支払いについて 受講料は、銀行振込原則として開催日まで)、 もしくは当日現金にてお支払いください。

銀行振込の場合、原則として領収書の発行はいたしません。 振込手数料はお客様がご負担ください。

●個人情報の取り扱いについて ご記入いただいた個人情報は、

こ記入いただいた個人情報は、 事務連絡・発送の他、情報案内等に使用いたします。 詳しくはホームページをご覧ください。 ■キャンセル担定

詳しくはホームページをこ見いたでい。 ●キャンセル規定 開催日から逆算(営業日:土日・祝祭日等を除く)いたしまして、 ・開催日前以前でのキャンセル: キャンセル料はいただきません。 ・開催3日の目前でのキャンセル・交鷹講科の700% ・開催3日~2日前でのキャンセル・交鷹・受講料の100% ※ご注意※ 参加者が最少催行人数に達しない場合など、 事情により中止になることがございます。

サイエンス&テクノロジー株式会社 TEL 03-5733-4188 FAX 03-5733-4187 $\pm 105-0013$

東京都港区浜松町1-2-12 浜松町F-1ビル7F https://www.science-t.com