

高分子構造形成の基礎とシミュレーション手法 【大阪開催】

日時 2016年6月9日(木) 11:00~16:30

主催 (株)R&D支援センター

会場 ドーンセンター 4F 中会議室3 大阪市中央区大手前1丁目3番49号

定員: 30名

受講料 49,980円 ※昼食・資料付

※満席になり次第、

(税込) ※案内会員登録(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。

募集を終了させていただきます。

・1名でお申込みされた場合1名につき47,250円

・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49,980円(2人目無料)です。

※大学生、教員のご参加は、1名につき受講料10,800円です。

(ただし、企業在籍者は除きます。また、2人目無料も適用外です。)

講師 藤原 進 氏 / 京都工芸繊維大学 材料化学系 教授 博士(理学)

このセミナーの

趣旨

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事ができる。例えば、結晶性高分子やブロック共重合体などは、複雑で階層的な構造をとることが知られている。このような階層構造の形成機構を解明するため、高分子シミュレーションの分野においても、マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションが活発に行われており、各階層における計算スケール、異なる階層における計算手法を達成させる取組がもたれている。本セミナーでは、階層的な構造を持つ高分子の構造形成に焦点を当て、その基礎概念を述べたあと、高分子のモデリング手法やシミュレーション手法の要点を解説する。また、OCTAやLAMMPS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、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
- 1-2 ブロック共重合体のマイクロ相分離

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

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 ブラウン動力学(BD)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(+VMD)

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・名刺交換】

『高分子構造形成の基礎とシミュレーション手法【大阪開催】』セミナー申込書

会社・大学			
住所	〒		
電話番号	FAX		
お名前	所属	E-Mail	
①			
②			
案内会員登録(無料) ※案内方法を選択してください。複数選択可。 ・お申込み後の連絡、受講証の発送、請求業務などは(株)R&D支援センターが行います。 ・Eメールまたは郵送でセミナー・書籍ののご案内をお送りします。 ・ご案内は(株)R&D支援センターおよびS&T出版(株)からお送りします。			
		<input type="checkbox"/> Eメール	<input type="checkbox"/> 郵送

※左記ご記入の上、**FAX 03-3261-0238**までお申込みください。

■お申込み方法

左記必要事項をご記入の上、FAXでお申込みください。お申込み後の連絡、受講証の発送、請求業務などは(株)R&D支援センターが行います。折り返し、R&D支援センターから受講証(当日ご持参下さい)、請求書、会場地図をご本人様宛てにお送り致します。お申込み後、5日以内にお手元に届かない場合は必ずR&D支援センター(TEL:03-5857-4811)へご一報下さい。

■お支払

請求書を発行いたしますので、開催日までに銀行振込でお願いいたします。

■個人情報の取り扱い

ご記入の個人情報は、当社および主催者が、事務連絡、ご案内等に使用いたします。

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。