CMCリサーチウェビナー【ライブ配信】

第一原理計算によるマテリアル・デバイス設計

講師：小野 倫也氏

神戸大学 大学院工学研究科 電気電子工学専攻 教授

計算機の高性能化が進むなか、第一原理に基づく電子状態計算は、新規マテリアルの開発やデバイスの設計に有力なツールとなりつつある。近年では、機械学習や AI と結びつき、多くのパラメータ空間の中から要求される物性を持つマテリアルや機能を示すデバイスを見つけ出すことも可能になりつつある。本セミナーでは、物性解析・機能予測の根幹をなす第一原理計算の基礎知識と応用例を紹介する。

【講師経歴】1997/3 大阪大学工学部精密工学科卒業、2001/3 大阪大学大学院工学研究科精密科学専攻博士後期課程修了、2001/4 大阪大学大学院工学研究科 助手、2007/2 ドイツ・ユーリッヒ研究センター フンボルト研究員(兼任)、2007/4 大阪大学大学院工学研究科 助教、2013/10 科学技術振興機構 さきがけ研究員(兼任)、2014/10 筑波大学計算科学研究センター准教授、2019/4 神戸大学大学院工学研究科教授

【研究歴】1997 年～第一原理計算をデバイス設計に応用すべく、これまでの第一原理計算法とは異なる新しい第一原理数値計算手法として、実空間差分法に基づく計算手法とこれに基づく計算コード RSPACE の開発に従事。2007 年～RSPACE をスピントロニクスデバイスのシミュレーションに使えるようにすべく、高精度化に従事。2013 年～RSPACE を用いて SiC-MOS の界面電子状態・伝導特性解析に従事し、SiC-MOS のキャリア移動度低下が、界面欠陥準位だけでなく伝導帯端の空間的な揺らぎでも起こることを発見。2014 年～RSPACE を京コンピュータや Oakforest-PACS で実行し、大規模第一原理伝導計算を実現。2019 年～RSPACE を用いたマテリアル・デバイスデザインに従事。

【所属学会】日本物理学会、応用物理学会、日本表面真空学会

【著書】K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, S. Tsukamoto: First-Principles Calculations in Real-Space Formalism - Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures -, Imperial College Press, London, (2005). 計算機マテリアルデザイン入門, 大阪大学出版会, (2005), 分担執筆。超精密加工と表面科学, 大阪大学出版会, (2014), 分担執筆

開催日時	2020 年 10 月 7 日(水) 12：30～16：30	※本セミナーは、当日ビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。推奨環境は当該ツールをご参照ください。後日、視聴用の URL を別途メールにてご連絡いたします。
受 講 料	42,000 円 + 税 ※ 資料付 ＊ メルマガ登録者 37,000 円 + 税 ＊ アカデミック価格 24,000 円 + 税	

＊アカデミック価格:学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】2 名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、2 名目は無料、3 名目以降は半額です。

★【セミナー対象者】企業の研究開発部門において、第一原理計算コードを使う研究者、実験的手法を用いて、ナノ構造の構造・機能解析、新規マテリアル・デバイス設計に携わる研究者★【得られる知識】ナノ構造の電子状態と電気伝導に関する知識、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態・電気伝導特性計算法に関する基礎とその応用例に関する知識、第一原理計算に用いられる最先端計算機に関する知識

【本セミナーのプログラム】 ※適宜休憩が入ります。

I. 物質の電子状態と電子状態計算法
- I-1. 物質の電子状態
- I-2. 密度汎関数理論
- I-3. 電子状態の数値計算法

II. ナノ構造の電子状態と電気伝導
- II-1. ナノ構造の電子状態
- II-2. 結晶中の電気伝導
- II-3. ナノデバイス中の電気伝導

III. 第一原理計算によるマテリアル・デバイス機能解析と予測の応用例
- Ⅲ-1. 表面・界面系の電子状態解析と予測
- Ⅲ-2. 分子デバイスの電気伝導特性解析と予測
- Ⅲ-3. 表面・界面におけるキャリア散乱解析と予測

ウェビナー申込書

弊社記入欄			
セミナー名	第一原理計算によるマテリアル・デバイス設計		
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、登録希望の場合は○↓	会社名（団体名） 住 所 〒	TEL： FAX： E-mail：	
会員登録済み / 新規登録希望	部署 役職	氏 名	
お支払方法	銀行振込 ・ その他	お支払予定	2020 年 月 日頃

■申込方法：セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail(re@cmcre.com)でお申し込みください。
■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、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。
■申込先 ：㈱シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町 2-7 TEL 03-3293-7053
■本セミナーの関連情報は、弊社ＨＰでもご覧になれます。⇒ http://www.cmcre.com

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789

2020 年 10 月 7 日（水）開催

第一原理計算によるマテリアル・デバイス設計

講師：小野 倫也氏

神戸大学 大学院工学研究科 電気電子工学専攻 教授

当該セミナーは、ライブ配信のウェビナー（オンラインセミナー）です！

【ライブ配信対応セミナー】
・本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信セミナーとなります。
・セミナー開催日時に、視聴サイトにログインしていただき、ご視聴ください。
・事前配布資料は、当日までに届くように事前に郵送をいたします。開催日時に間に合わない場合には、後日郵送するなどの方法で対応いたします。
・講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布する場合もございますが、参加者のみご利用に限定いたします。他の方への転送、WEB への掲載などは固くお断りいたします。
・開催日時にリアルタイムで講師へのご質問も可能です。
・タブレットやスマートフォンでも視聴できます。
・「Zoom」についてはこちら↓をご参照ください。
https://zoom.us/jp-jp/meetings.html

【お申込み後の流れ】
・開催日時前に、ウェビナー事前登録用のメールをお送りいたします。
お手数ですがお名前とメールアドレスのご登録をお願いいたします。
・事前登録完了後、ウェビナー参加用 URL をお送りいたします
※参加用 URL はご登録者様専用のため、他の人との共有はできません。

【注意事項】
・本セミナーの受講にあたっての推奨環境は「Zoom」に依存します。受講者の方のお手元の PC などの設定や通信環境が受信の状況に大きく影響いたしますので、ご自分の環境が対応しているか、お申し込み前の確認をお勧めいたします。
https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC-Mac-Linux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6

・インターネット経由でのライブ中継ですので、回線状態などにより、画像や音声が乱れる場合があります。また、状況によっては、講義を中断し、再接続して再開する場合がありますが、予めご了承ください。
・万が一、当社や講師側（開催側）のインターネット回線状況や設備機材の不具合により、開催を中止した場合には、受講料の返金や、状況により後日録画を提供すること等で対応させていただきます。
・受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします。