

# 企業での材料研究に使える第一原理計算・マテリアルズインフォマティクス

講師：森分 博紀氏

財団法人ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所  
計算材料グループ グループ長

【セミナー概要】

企業 (Panasonic) における材料研究・第一原理計算による材料研究から製品設計、量産化、数値解析グループ長を務めた経験を有する講演者が、自身の経験に基づき、企業での電子材料研究 (電池材料、誘電体材料等) に使える第一原理計算・マテリアルズインフォマティクスを基礎から応用まで講義致します。また、企業研究への第一原理計算・マテリアルズインフォマティクス応用研究成功のためのノウハウをお伝えします。

【経歴】2001年 博士 (工学) 京都大学 1988年 松下電器産業入社 2006年 財団法人ファインセラミックスセンター入所 主任研究員 2009年 同 ナノ構造研究所 ナノシミュレーション部 部長代行 2011年 同 主席研究員 2011年 同 ナノ構造研究所 ナノシミュレーションG グループ長 2012年 同 ナノ構造研究所 計算材料グループ グループ長

松下電器産業にて電子材料材料研究、材料開発、電子部品開発に従事した後に、社命により京都大学に留学し、第一原理計算研究に従事。2001年博士学位取得後、第一原理計算チームを創設のチームリーダーに就任。2006年財団法人ファインセラミックスセンター入所し計算材料グループを創設しグループ長に就任。マテリアルズインフォマティクスの国家プロジェクトであるMI2I、革新型Liイオン電池国家プロジェクトRISING2など数多くの国家プロジェクトに参画し第一原理計算担当として活躍。現在に至る。

【外部委員、客員教授等】室蘭工業大学 非常勤講師 (平成12年度) 関西学院大学 非常勤講師 (平成15年度) DV-X $\alpha$  研究会 常任幹事 (平成15年度～平成25年度) 関西学院大学 理工学研究員 (平成15年度～20年度) 京都大学 共同研究員 (平成20年度～継続中) 日本物理学会 領域10 誘電体分科運営委員 (平成22年度) 日本セラミックス協会、「セラミックス誌」編集委員 (平成22年度～平成27年度) 日本セラミックス協会、日本セラミックス協会電子材料部会役員 (平成25年度～継続中) 日本セラミックス協会、論文誌電子材料特集ゲストエディター (平成27年度) 物質・材料研究機構 (NIMS) オープンラボ研究員 (平成27年度～平成28年度) 物質・材料研究機構 (NIMS) 招聘研究員 (平成29年度～令和1年) NEDO 調査事業：機能性材料WG委員 (平成27年度) 日本セラミックス協会、「セラミックス誌」編集副委員長 (平成29年度) 日本セラミックス協会、「セラミックス誌」編集委員長 (平成30年度) 日本セラミックス協会 理事 (編集委員長) (平成30年度) 日本セラミックス協会、行事企画委員会 委員 (平成29年度～平成30年度) 日本セラミックス協会、「学術論文誌 Journal of the Ceramic Society of Japan」論文誌編集委員 (平成31年度～) 大阪大学 招聘研究員 (平成31年度～継続中)

|      |  |  |
|------|--|--|
| 開催日時 | 2021年11月25日 (木) 13:30～16:30  | ※本セミナーは、 <b>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。</b> 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。<br><b>詳細は裏面をご覧ください。</b><br>★受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします |
| 受講料  | 49,500円 (税込) ※資料付<br>*メルマガ登録者 44,000円 (税込)<br>*アカデミック価格 26,400円 (税込) |  |

\*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、学生に限りです。

★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込かつ**申込者全員がメルマガ会員登録**していただくと、**1名あたりの参加費がメルマガ会員価格の半額**となります。

★【セミナー対象者】・企業において第一原理計算・マテリアルズインフォマティクス研究グループ立ち上げをお考えの方  
・第一原理計算・マテリアルズインフォマティクスの活用をお考えの技術者・研究者・経営者・企業・研究機関にて電池材料研究に従事する技術者・研究者  
・第一原理計算・マテリアルズインフォマティクスに関する知識・情報を収集したい技術者・研究者 ★【得られる知識】・第一原理計算・マテリアルズインフォマティクスの基礎・理論・第一原理計算・マテリアルズインフォマティクスの電池研究への応用

【本セミナー/ウェビナーのプログラム】 ※適宜休憩が入ります。

|  |                                       |
|--|---------------------------------------|
| 0. 事前質問事項への回答  | 3.1 どのような計算機を用意すべきか 3.2 PC クラスタ       |
| 1. 第一原理計算  | 4. 第一原理計算応用例                          |
| 1.1 第一原理計算とは 1.2 第一原理計算で何ができるか?  | 4.1 どのような計算機を用意すべきか                   |
| 1.3 計算環境の例 1.4 計算スキーム  | 4.2 企業における実用的な第一原理計算                  |
| 2. 計算理論・計算手法   | 4.3 成功する企業における第一原理計算導入例と失敗する第一原理計算導入例 |
| 2.1 波動方程式を解くために 2.2 Born-Oppenheimer (断熱) 近似 2.3 分子の電子状態計算手法 2.4 密度汎関数法 2.5 Kohn-Sham 方程式 2.6 一電子 (平均場) 近似 2.7 局所密度近似 (LDA) 2.8 一般化密度勾配近似 (GGA) 2.9 波動関数をどう表現するか 2.10 領域の分割 2.11 平面波基底 2.12 擬ポテンシャル法とフルポテンシャル法 | 5. マテリアルズインフォマティクス                    |
| 3. 第一原理計算を実施する環境整備   | 5.1 マテリアルズインフォマティクスとは?                |
|  | 5.2 マテリアルズインフォマティクスの問題点               |
|  | 5.3 企業における実用的なマテリアルズインフォマティクス         |
|  | 6. Q&A                                |

|  |           |                                    |           |
|--|-----------|------------------------------------|-----------|
| 弊社記入欄                                    |           | <b>ウェビナー申込書</b>                    |           |
| セミナー名                                    |           | 企業での材料研究に使える第一原理計算・マテリアルズインフォマティクス |           |
| 所定の事項にご記入下さい<br><b>メルマガ会員、登録希望の場合は○↓</b> | 会社名 (団体名) | TEL :                              |           |
|  | 住所 〒      | FAX :                              |           |
|  |           | E-mail :                           |           |
| 会員登録済み                                   | 新規登録希望    | 部署                                 | 役職        |
| お支払方法                                    |           | 銀行振込 ・ その他                         | 氏名        |
|  |           | お支払予定                              | 20 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：(株)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。⇒ <https://cmcre.com/>

**参加申込 FAX 番号**  
**03-3291-5789**

2021年11月25日(木)開催

# 企業での材料研究に使える第一原理計算・マテリアルズインフォマティクス

**講師：森分 博紀氏**

**財団法人ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所  
計算材料グループ グループ長**

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。お申し込み前に、下記 URL より視聴環境をご確認ください。  
→ <https://zoom.us/test>
- 当日は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。
- お手元の PC 等にカメラ、マイク等がなくてもご視聴いただけます。この場合、音声での質問はできませんが、チャット機能、Q&A 機能はご利用いただけます。
- ただし、セミナー中の質問形式や講師との個別のやり取りは講師の判断によります。ご了承ください。
- 「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】

- 開催前日までに、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。
- セミナー開催日時に、参加用 URL よりログインいただき、ご視聴ください。
- 講師に了解を得た場合には資料を PDF で配布いたしますが、参加者のみの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禁じます。
- 資料を冊子で配布する場合は、事前にご登録のご住所に発送いたします。開催日時に間に合わない場合には、後日お送りするなどの方法で対応いたします。

## 【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->

[MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6](https://support.zoom.us/hc/ja/articles/201362023-PC-MacLinux%E3%81%AE%E3%82%B7%E3%82%B9%E3%83%86%E3%83%A0%E8%A6%81%E4%BB%B6)

- Zoom クライアントは最新版にアップデートして使用してください。
- 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、画像や音声が悪くなる場合があります。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。
- 本セミナーはお申し込みいただいた方のみ受講いただけます。  
複数端末から同時に視聴することや複数人での視聴は禁止いたします。
- 受講中の録音・撮影等は固く禁じます。
- Zoom のグループにパスワードを設定しています。お申込者以外の参加を防ぐため、パスワードを外部に漏洩しないでください。  
万が一外部者が侵入した場合は管理者側で部外者の退出あるいはセミナーを終了いたします。