

# マテリアルズ・インフォマティクスの実践に向けた 第一原理計算の基礎入門

## 講師：野田 祐輔氏

### 岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科 准教授

量子力学に基づいた原子スケールのコンピュータシミュレーションが可能である第一原理計算は産業界でも注目され、材料開発に欠かせないツールとして第一原理計算を導入する企業が増えてきている。世界中で第一原理計算を用いた研究が盛んになっている現在では、様々な第一原理計算ソフトウェアを入手できるが、ソフトウェアの中身を深く理解しなくても計算結果が出てくるため、計算結果に対する正しい判断力が無ければ誤った解釈をしてしまう。したがって、第一原理計算を正しく使用するためには、第一原理計算の基本的な知識や実行手順を理解する必要がある。

本セミナーでは、第一原理計算の初心者・将来的に第一原理計算を活用したい方を対象に、第一原理計算の基礎知識や実行手順、第一原理計算による主な解析手法を解説する。第一原理計算と連携したマテリアルズ・インフォマティクス (MI) 研究の実例も併せて紹介し、第一原理計算をどのように有効活用できるかを述べる。

【講師略歴】2010年3月 横浜国立大学 工学部 知能理工学科 卒業。2012年3月 横浜国立大学 大学院工学府 物理情報工学専攻 物理工学コース博士課程前期 (PEDプログラム) 修了。2014年4月 日本学術振興会 特別研究員 DC2 (受入機関：横浜国立大学)。2015年3月 横浜国立大学 大学院工学府 物理情報工学専攻 物理工学コース博士課程後期 (TEDプログラム) 修了。2015年4月 日本学術振興会 特別研究員 PD (受入機関：理化学研究所)。2016年4月 物質・材料研究機構 統合型材料開発情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 蓄電池材料グループ (名古屋工業大学サテライトオフィス) ポスドク研究員。2018年4月 名古屋大学 大学院工学研究科 物質科学専攻 特任助教 (CREST研究員)。2020年4月 金沢学院大学 経済情報学部 経済情報学学科 講師。2021年4月 岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科 准教授 (現在に至る)。

開催日時	2022年8月23日(火) 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</b> 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。 <b>詳細は裏面をご覧ください。</b> ★受講中の録音・撮影等は固くお断りいたします。
受講料	44,000円(税込) ※資料付 *メルマガ登録者は39,600円(税込) *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、学生に限ります。

★【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いた場合、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】・第一原理計算 (DFT計算) の概要や基礎知識を習得したい方 ・第一原理計算 (DFT計算) とデータサイエンス手法を連携させたMI研究に興味のある方 ★【得られる知識】・第一原理計算とその関連用語の概要や基礎知識 ・第一原理計算の実行に必要な入力パラメータ・計算条件および第一原理計算の実行手順 ・第一原理計算による電子状態・物性解析手法とその用途 ・第一原理計算のMI研究への活用方法

### 【本ウェビナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- |  |  |
|--|--|
| 1. 原子スケールコンピュータシミュレーションの概要<br>1.1 第3の科学「計算科学」<br>1.2 古典的なコンピュータシミュレーション手法<br>1.3 第一原理計算                  | 4. 第一原理計算に基づく電子状態・物性解析手法<br>4.1 一点計算<br>4.2 構造最適化計算<br>4.3 状態密度解析<br>4.4 バンド構造解析<br>4.5 電子密度解析<br>4.6 スーパーセル法<br>4.7 スラブモデル<br>4.8 遷移状態計算・反応経路解析<br>4.9 第一原理分子動力学法 |
| 2. 第一原理計算 (DFT計算) に関連する理論<br>2.1 Born-Oppenheimer 近似<br>2.2 密度汎関数理論<br>2.3 Kohn-Sham 方程式<br>2.4 交換-相関汎関数 | 5. MI研究の実例の紹介 (第一原理計算の活用を中心に)  |
| 3. 第一原理計算の入力パラメータ・計算条件の設定<br>3.1 結晶構造モデルの設定<br>3.2 計算条件の設定<br>3.3 擬ポテンシャルの設定                             | 6. まとめ (質疑応答・個別相談を含む)  |

弊社記入欄		ウェビナー申込書		
セミナー名		マテリアルズ・インフォマティクスの実践に向けた第一原理計算の基礎入門		
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)	TEL :	
		住所 〒	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 2022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。⇒ <http://www.cmcre.com>

参加申込 FAX 番号  
**03-3291-5789**

# マテリアルズ・インフォマティクスの実践に向けた 第一原理計算の基礎入門

**講師：野田 祐輔氏**

**岡山県立大学 情報工学部 情報通信工学科 准教授**

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。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>

- 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。
- 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。