

# 卑金属を用いた水電解用電極の開発： 第一原理計算と機械学習の観点から

講師：大戸 達彦氏 名古屋大学大学院工学研究科  
材料デザイン工学専攻 計算材料設計講座 准教授

水を電気分解するための触媒としてはPtやIrが適していることが知られているが、その希少性のため、ありふれた元素で代替する必要がある。しかし、無数にある元素の組み合わせの中から適切な触媒を見出すことは困難である。本セミナーでは、卑金属をベースに高性能な水分解用電極を探索する試みについて、第一原理計算と機械学習の観点を中心に解説する。

【講師経歴】2013年4月~2013年5月 JSPS 特別研究員 PD、産業技術総合研究所、2013年6月~2023年2月 大阪大学大学院基礎工学研究科 助教、2023年3月~名古屋大学大学院工学研究科 准教授

【専門分野】第一原理計算を主体とした表面・界面科学 特に分子エレクトロニクス・界面分光・不均一触媒

【所属学会】日本物理学会 日本化学会 日本応用物理学会

|      |   |  |
|------|---|--|
| 開催日時 | 2024年2月28日(水) 13:30~16:30   | ※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。<br>詳細は裏面をご覧ください。 |
| 受講料  | 44,000円(税込) ※資料付<br>*メルマガ登録者 39,600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★

【対象者】・元素戦略に興味のある方 ・水電界触媒に興味のある方 ・第一原理計算と機械学習を用いた物質探索に興味のある方

【得られる知識】・「機械学習力場」の概念・作成方法・応用に関する基礎知識・水分解触媒開発への第一原理計算の活用方法

・多数の元素を含む物質を起点とした触媒探索戦略

## 【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

- |                           |                                  |
|---------------------------|----------------------------------|
| 1. 水電界の背景                 | 3-1. 密度汎関数法のごく簡単な説明              |
| 1-1. なぜ卑金属搭載固体高分子型水電界か    | 3-2. 第一原理計算と遷移状態計算               |
| 1-2. 水の電気分解の仕組みと触媒の学術研究動向 | 3-3. 遷移状態計算を用いない触媒活性評価           |
| 1-3. 卑金属と腐食               | 3-4. 水分解反応の活性評価方法                |
| 1-4. 卑金属電極触媒の開発戦略         | 4. 機械学習力場を用いた触媒性能評価の加速           |
| 2. 電極の作製と評価               | 4-1. 機械学習力場の必要性                  |
| 2-1. 作製方法                 | 4-2. 機械学習力場概論：カーネル回帰とニューラルネットワーク |
| 2-2. 構造評価                 | 4-3. 9元合金の機械学習力場の構築              |
| 2-3. 触媒性能評価               | 4-4. 機械学習力場を援用した触媒活性評価           |
| 3. 第一原理計算を用いた触媒性能評価       | その他：質疑応答                         |

弊社記入欄

## ウェビナー申込書

セミナー名 卑金属を用いた水電解用電極の開発：第一原理計算と機械学習の観点から

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Q↓

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

2024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 (order\_7053@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でもご覧いただけます。⇒ <https://cmcre.com>

参加申込 FAX 番号  
03-3291-5789

2024年2月28日（水）開催

## 卑金属のみを用いた固体高分子型水電解用酸素発生電極の開発： 第一原理計算と機械学習の観点から

**講師：大戸 達彦氏** 名古屋大学大学院工学研究科  
材料デザイン工学専攻 計算材料設計講座 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。**講師の要望により、印刷ができない設定で配布する場合がございます。**
- 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。