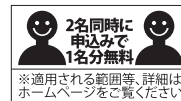




密度汎関数理論(Density Functional Theory : DFT)に基づいた第一原理計算の概要の紹介と、計算科学を導入する時の考え方や具体的な事例を踏まえたステップなどを解説する。

# 【Live(リアルタイム)配信セミナー】 第一原理計算 入門

～計算手法の理解と活用する際の要点、社内導入を検討する際の勘どころの把握～



日時	2021年6月23日(水) 10:30～16:30	会場	Live配信セミナー ※会社・自宅にしながら学習可能です※
----	---------------------------	----	-------------------------------

受講料	49,500円 ⇒ テレワーク応援キャンペーン 【Live配信/WEBセミナー受講限定】 1名申込みの場合: 受講料 定価: 35,200円 / ※E-Mail案内登録価格 33,440円 ※ E-Mail案内または郵送DM案内の希望を登録の方はE-mail案内登録価格になります。 ※ 同一企業で複数名E-Mail案内登録されている場合は、本割引ではなく「2名同時申込みで1名分無料」割引を適用させて頂きます。	資料付
-----	---	-----

講師	大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター 特任准教授 下司 雅章 氏
----	--

**趣旨** 第一原理計算は、量子力学に基づいた原子、分子レベルの挙動を高精度で再現できるツールとして利用されつつあります。2000年以降これらのソフトウェアのパッケージ化が進み、有償無償の多くのものが入手可能になっています。ユーザーフレンドリーなGUIも開発が進み、マウスだけの操作でもかなりのことが出来るようになってきています。しかし、それゆえに中身を詳しく知らなくても結果が出てくるため、かえってその結果の正しさを判断する力がないと間違った結果を信じてしまう可能性もあります。

このセミナーでは第一原理計算というものはどういふものか、どのようなことが出来るのか、実際にそれを使うための準備や手順、それを正しく使うための知識などについて、実際にやる内容を中心に説明します。普通の講習会では扱われない擬ポテンシャル法、FLAPW法、KKR法それぞれの特徴や比較についても紹介し、それらを正しく使い分けるためのポイントを、スパコンの最新の現状も踏まえて紹介します。さらに、企業内へのPCクラスタのような計算機の導入や、それを運用する上での注意など、現場に即した内容を提供します。

<b>プログラム</b>	<p>1. 物質科学・材料科学におけるシミュレーション</p> <p>1.1 物質科学・材料科学におけるシミュレーションの種類</p> <p>1.2 第一原理計算の概要</p> <p>1.3 いくつかの応用例</p> <p>1.4 シミュレーションは日本が生き残るための必須事項 ～ICTスキルの向上、人間は同じことを繰り返すと間違える!～</p> <p>2. 密度汎関数理論に基づいた第一原理計算</p> <p>2.1 簡単な理論的背景</p> <p>2.2 計算手法の種類と特徴 ～一つの方法で全てのことが出来るのではない!～</p> <p>2.3 実際の第一原理計算ソフトウェアとはどういふものか ～ソースコードから入手方法まで～</p> <p>2.4 具体的計算の手順 ～入力ファイルから出力ファイルの中身について</p> <p>2.5 第一原理計算実施の注意点</p>	<p>～“ちゃんと”計算しないと意味がない!～</p> <p>3. 第一原理計算を実施する環境整備～ソフトウェア、PCクラスタからスパコンまで～</p> <p>3.1 どんな計算機を用意すべきか ～スパコンを使えば何でも出来るのではない!～</p> <p>3.2 現在の計算機の動向 ～スパコンランキングの正しい見方～</p> <p>3.3 外部計算機の利用の仕方</p> <p>3.4 第一原理計算ソフトウェアのインストール</p> <p>3.5 実際に導入する場合のアドバイス</p> <p>4. 第一原理計算を社内に導入すべきか?</p> <p>5. 第一原理計算の簡単な実演</p> <p>☐ 質疑応答 ☐</p>
--------------	---	---

本セミナーはビデオ会議ツール「Zoom」を使ったライブ配信となります。予め「Zoom」のインストールが可能か、接続可能か等をご確認ください。  
・セミナー資料は電子ファイルにてダウンロードいただけます。詳細はホームページをご覧ください。

■2名同時申込みで1名分無料■  
(1名あたり定価半額の24,750円)

※2名様ともE-Mail案内登録をいただいた場合に限りです。 ※他の割引は併用できません。  
※同一法人内(グループ会社でも可)による2名同時申込みのみ適用いたします。  
※3名様以上のお申込みの場合、左記1名あたりの金額で受講できます。  
※受講券、請求書は、代表者にご郵送いたします。  
※請求書および領収書は1名様ごとに発行可能です。(通信欄に「請求書1名ごと発行」と記入ください。)

※講師、プログラムの内容が変更になる場合もございます。最新の情報はHPにてご確認ください。 ※申込用紙が複数枚必要な場合等は、本用紙をコピーしてお使いください。

セミナー申込用紙	B210623 (第一原理計算)	お申し込みには会員の事前登録が必須となります
----------	------------------	------------------------

会社名 団体名		
部署		
役職	〒	
ふりがな	住所	
氏名		
TEL	FAX	
E-mail	※申込みに関する連絡に使用するため、可能な限りご記入ください。	

※太枠の中をご記入下さい。 ※☐にチェックをご記入ください。  
※E-mailアドレスまたはFAX番号を必ずご記入下さい。

<b>今後のご案内</b>	
<input type="checkbox"/> E-mail希望・登録済み	E-Mail案内登録価格を適用いたします。(E-mailアドレス必須)
<input type="checkbox"/> 郵送希望・登録済み	
<input type="checkbox"/> 希望しない	
<b>お支払方法</b>	
<input type="checkbox"/> 銀行振込 (振込予定日 月 日)	
<b>通信欄</b>	

●受講料について  
「2名同時申込みで1名分無料」については上記の注意事項をお読みください。

●お申込みについて  
申込用紙に必要事項をご記入のうえ、FAXでお申込みください。  
また、当社ホームページからでもお申込みいただけます。  
お申込みを確認次第、請求書・受講券・会場案内図をお送りします。

●お支払いについて  
受講料は、銀行振込(原則として開催日まで)、もしくは当日現金にてお支払いください。  
銀行振込の場合、原則として領収書の発行はいたしません。  
振込手数料はお客様がご負担ください。

●個人情報の取り扱いについて  
ご記入いただいた個人情報は、事務連絡・発送の他、情報案内等に使用いたします。  
詳しくはホームページをご覧ください。

●キャンセル規定  
開催日から逆算(営業日・土日・祝祭日等を除く)いたしまして、  
・開催7日前以前のキャンセル: キャンセル料はいただきません。  
・開催3～6日前でのキャンセル: 受講料の70%  
・開催当日～2日前でのキャンセル・欠席: 受講料の100%  
※ご注意※ 参加者が最少催行人数に達しない場合など、事情により中止になる場合がございます。

**サイエンス & テクノロジー**  
研究・技術・事業開発のためのセミナー/書籍

サイエンス&テクノロジー株式会社  
TEL 03-5733-4188 FAX 03-5733-4187  
〒105-0013  
東京都港区浜松町1-2-12 浜松町F-1ビル7F  
https://www.science-t.com