

## 第一原理計算によるリチウムイオン電池の解析

1名分料金で  
2人目無料

## ～液LIBから全固体電池まで～

セミナーURLはこちら→ <https://www.rdsc.co.jp/seminar/260430>

- ◆日時:2026年04月20日(月) 13:00～15:30
- ◆【アーカイブ配信:4月21日(火)～5月1日(金)(何度でも受講可能)】
- ◆受講料:1名につき49,500円(税込、資料付)

会員(案内)登録していただいた場合、通常1名様申込で49,500円(税込)から  
 ・1名で申込の場合、**46,200円(税込)**へ割引になります。  
 ・2名同時申込で両名とも会員登録していただいた場合、**計49,500円(2人目無料)**です。

## セミナーお申込みFAX

03-5857-4812

※お申込み確認後は弊社よりご連絡いたします。

●講師:富士フイルム(株) 解析技術センター 主席研究員 理学博士 奥野 幸洋 氏

## 【受講対象】

材料研究開発、解析業務(特に計算科学)に携わる技術者の方:初級の方から専門の方まで

## 【習得できる知識】

第一原理計算、古典分子動力学計算などの使い方とその実践。特に電池材料の計算に関する知識。

## 【講演の趣旨】

本講演では、第一原理計算および分子動力学計算を用いた電池材料の解析手法と最新の応用例を紹介する。まず、初心者にも理解しやすい基礎的な計算手法の解説から始め、電池材料に特化した具体的な解析技術を取り上げる。液系リチウムイオン電池の負極・正極界面における電解液の第一原理分子動力学解析や、全固体電池の活物質・電解質界面での界面反応の研究事例を示し、材料界面の挙動理解に寄与するシミュレーションの有用性を説明する。さらに、第一原理計算とマテリアルインフォマティクスを連携させた固体電解質の設計とその結果、機械学習による高精度かつ大規模な計算が可能な機械学習ポテンシャルを用いた高濃度水系電解液中のリチウムイオン伝導解析にも触れる。実務に役立つソフトウェアの操作方法も含め、材料研究開発や解析業務に携わる技術者の理解を深め、実践的な解析技術の習得を目指した内容である。

## 【プログラム】

## 1 はじめに

- 1-1 リチウムイオン電池研究への計算科学の重要性 背景と課題
- 1-2 シミュレーション技術の進歩

## 2 必須となる計算技術の基礎

- 2-1 密度汎関数法
- 2-2 第一原理分子動力学法
- 2-3 機械学習ポテンシャルを利用した分子動力学計算
- 2-4 電池材料の解析・探索で必要となる各種物性(電位窓)等の評価方法

## 3 液体リチウムイオン電池の解析例

- 3-1 第一原理分子動力学法を利用した負極界面での電解液・添加剤の反応計算
- 3-2 正極界面での電解液分解反応の解析
- 3-3 機械学習ポテンシャルによる水系電解液中のリチウム伝導機構の解析

## 4 全固体電池

- 4-1 電解質・活物質固・固界面の物性(Li伝導性、反応性)
- 4-2 マテリアルインフォマティクスを利用した固体電解質探索と合成・評価例

『第一原理計算』セミナー申込書&lt;■LIVE ■アーカイブ&gt; ※いずれかにチェックしてください

会社・大学			
住所	〒		
電話番号		FAX	

## ● セミナーの受講申込みについて ●

必要事項をご明記の上、FAXでお申込み下さい。弊社で確認後、必ず受領のご連絡をいたします。受講用URLは後日お送りいたします。

セミナーお申込み後のキャンセルは基本にお受けしておりませんので、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。

お申込み・振込に関する詳細はHPをご覧ください。

⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/entry>

個人情報保護方針の詳細はHPをご覧ください。

⇒ <https://www.rdsc.co.jp/pages/privacy>

お名前	所属・役職	E-Mail
①		
②		

会員登録(無料) ※案内方法を選択してください。複数選択可。

Eメール 郵送