

第一原理計算の基礎と企業での計算科学導入のポイント

～数式なしで学ぶ、材料開発・設計現場への応用～

1名分料金で
2人目無料

【LIVE配信】【アーカイブ配信】 セミナーURLはこちら→<https://www.rdsc.co.jp/seminar/260312>

- ◆日時：2026年06月03日(水) 10:30～16:30
- ◆アーカイブ配信：3/6(金)～3/20(金) 何度でも受講可能
- ◆受講料：1名につき55,000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55,000円(税込)から
 ・1名で申込の場合、**49,500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をしていただいた場合、**計55,000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】 大阪大学 エマージングサイエンス
 デザインR3センター 特任准教授(常勤)
 博士(理学) 下司 雅章氏

【講演の趣旨】 材料開発や製造プロセスの高度化において、物質やその表面・界面のミクロな性質、そしてそれを支える電子の状態を理解することの重要性が高まっています。こうした背景から、第一原理計算をはじめとする計算科学を導入する企業が増えています。本セミナーでは、第一原理計算で「何ができ、何ができないのか」をわかりやすく整理し、導入にあたって必要な体制・人材・環境整備のポイントを解説します。また、実際の入力・出力例を通して計算の流れや結果の読み方を紹介し、企業での実務応用のイメージを具体的につかんでいただきます。さらに、これまでに経験した企業との共同研究や共同研究講座の立ち上げ事例を交え、アカデミアと連携して計算科学を活用する際の実践的なノウハウや注意点についてもお話しします。

- 【プログラム】
- 物質科学・材料科学におけるシミュレーション
 - 物質科学・材料科学におけるシミュレーションの種類
 - 第一原理計算の概要
 - いくつかの応用事例
 - シミュレーションは日本が生き残るための必須事項
 - 密度汎関数理論に基づいた第一原理計算
 - 簡単な理論的背景
 - 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！～
 - 実際の第一原理計算ソフトウェアとはどういうものか ～ソースコードから入手方法まで～
 - 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～
 - 第一原理計算実施の注意点～“ちゃんど”計算しないと意味がない！～
 - 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～
 - 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！～
 - 現在の計算機の動向～スパコンランキングの正しい見方～
 - 外部計算機の利用の仕方
 - 第一原理計算ソフトウェアのインストール
 - 実際に導入する場合のアドバイス
 - 第一原理計算を社内を導入すべきか？
 - 第一原理計算は社内の研究に必要か？
 - どんなソフトウェアを選ぶべきか？～有名ソフトが必ずしも良いのではない！～
 - 誰がやるのか？どうやって学ばばよいのか？
 - アカデミアと共同研究をする時のポイント
 - 実りある成果を得るために。～餅屋は餅屋に任せつつ、修行もする！～
 - 第一原理計算の簡単な実演
 - Linux環境とPCクラスタの例
 - KKR法
 - 擬ポテンシャル法
 - FLAPW法

『第一原理計算』セミナー申込書 FAX:03-5857-4812 ※ご希望の参加形式にチェック下さい⇒< LIVE/ アーカイブ >

会社・大学			
住所	〒		
電話番号		FAX	

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

● 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的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>