



## 電気化学会関東支部 第50回先端科学セミナー

# 電気化学のための計算化学入門

開催日時 : [講義のオンデマンド配信] 2022年10月17日(月)~ 2022年10月30日(日)  
[実践ライブセッション] 2022年10月27日(木) 10:00~17:00頃

最新情報は関東支部HPの当セミナー案内ページでご確認下さい。

[https://kanto.electrochem.jp/pages/notice/seminar/page-seminar\\_202210.html](https://kanto.electrochem.jp/pages/notice/seminar/page-seminar_202210.html)

開催形態 : オンライン

(Vimeoによる講義のオンデマンド配信とZoomによるライブセッションのリアルタイム配信を併用)

近年、マシン性能の飛躍的発展や様々な高精度理論の深化と多様化を経て、計算化学のプレゼンスはますます高まっており、電気化学の分野においてもその有用性が大きく期待されてきています。またそれを裏付けるように、計算化学を利用した研究例も増えています。さらに昨今のデジタル化大変革の波もあいまって、実験を中心に活動してきた方々の間における、計算化学修得へのニーズは今後さらに高まっていくものと予想します。このような背景の下、電気化学会関東支部では「電気化学のための計算化学入門」と題しセミナーを企画、20年度、21年度と、大変なご好評を頂きつつ運営して参りました。今年度は、従来の講義内容に加え、受講者の皆様に計算を体験して頂き、その操作の実際に触れるキッカケにして頂く、体験型の実践講座を設けた、また新しい形の計算化学セミナーを開催致します。初めて受講の方はもちろん、過去2年に受講された方々も含め、研究者、エンジニア、学生、また産官学問わず、幅広い業種の皆様からの奮ってのご参加をお待ち申し上げます。

※なお体験型実践講座では、受講者の皆様にはそれぞれお手持のPCで計算を体験して頂きますが、計算性能やアプリ動作が各PCに依存します。この事から本セミナーはすべての方々の同等な達成度を保証するものではありません。予めご了承ください。

□当セミナーの目標:

- ・電気化学を扱う学生や研究者・エンジニアが、実験と並行して、自分で計算による結果予測や考察を行うキッカケを得る。
- ・論文等で見掛ける代表的な計算手法の原理と基礎を学び、その効用と可能性、限界を理解できるようにする。

□対象者

- ・計算化学の初心者、および計算化学に興味のある方、実際に計算ソフトを動かしてみたい方
- ・電気化学に関わる研究分野で計算化学の導入を検討されている方  
(化学系の学部卒業程度の物理化学の知識を有することが望ましい)

## プログラム

### [講義のオンデマンド配信]

1. 計算化学概論	早稲田大学	國本 雅宏	120分
2. 量子化学計算	甲南大学	山本 雅博	60-80分程度
3. 第一原理計算	物質・材料研究機構	館山 佳尚	60-80分程度
4. 分子動力学計算	横浜国立大学	都築 誠二	60-80分程度
5. 計算ソフト紹介	アドバンスソフト(株)	西原 慧径	30分程度

※一部の内容は昨年度と重複する場合がございます。昨年受講された方はご注意ください。

### [ライブセッション]

9:55~	実行委員長挨拶、趣旨説明		
10:00~	甲南大学	山本 雅博	
10:30~	物質・材料研究機構	館山 佳尚	
11:00~	横浜国立大学	都築 誠二	
11:30~	アドバンスソフト(株)	西原 慧径	
12:00頃~	昼休憩		
13:00~	チュートリアル・実践計算化学 ~酸化還元電位を計算してみよう! ~		
16:45頃	閉会の挨拶		

・ライブセッションの録画配信は行いません。  
ご注意ください。  
・「計算化学概論」のライブセッションはありません。  
・質問は、講義の配信期間中にwebサイトで常時受け付けますので積極的にご利用下さい。

主催 電気化学会関東支部  
協賛 電気化学会関西支部、電池技術委員会、熔融塩委員会、キャパシタ技術委員会、イオン液体研究会、日本固体イオニクス学会、日本化学会、応用物理学会、表面技術協会、高分子学会、腐食防食学会、日本MRS、大阪科学技術センター、自動車技術会、日本セラミックス協会

【参加費】	・個人会員	15,000円	(協賛学会員を含む)
	・法人会員	20,000円	(協賛学会員を含む)
	・非会員	30,000円	
	・学生(会員)	3,000円	
	・学生(非会員)	5,000円	

※参加費はいずれも税込です。

【定員】 200名 (先着順、定員に達し次第締切り)

【参加申込締切】 2022年 9月 30日(金)

【参加申込方法】 受講規約をご確認いただき、ご同意の上、電気化学会関東支部ホームページの開催案内ページよりお申し込み下さい。

受講規約:

<https://kanto.electrochem.jp/pages/notice/docs/seminar-terms-kecs.pdf>

第50回先端科学セミナー 開催案内ページ

[https://kanto.electrochem.jp/pages/notice/seminar/page-seminar\\_202210.html](https://kanto.electrochem.jp/pages/notice/seminar/page-seminar_202210.html)

【振込先】 ゆうちょ銀行

金融機関名: ゆうちょ銀行(金融機関コード 9900)  
口座名義: シヤデンキカガクカイカントウシブ  
支店名: O九八店(ゼロキュウハチ店)(店番 098)  
預金種目: 普通預金 口座番号: 3104634

※ 請求書は、webで申し込みをいただいた後、事務局から pdfをメールで発行します。

※ ゆうちょ銀行間でお振込みの場合、[記号・番号] 10990-31046341

※ 登録完了後に送信されるメールに記載されている受付番号を振込人名にご記入ください。

※10月3日(月)までに参加費のお振込みをお願いいたします。

【連絡先】 電気化学会関東支部 事務局

〒192-0397 東京都八王子市南大沢1-1  
東京都立大学 都市環境学部環境応用化学科 柳下崇  
Tel:080-7165-6632, E-mail: kanto@electrochem.jp

【個人情報の取扱い】

- 皆様からお預かりした個人情報は、本会からのご案内やご質問に対する回答として、電子メールや資料のご送付にのみ利用いたします。
- 本会は、皆様よりお預かりした個人情報を適切に管理し、許諾なく個人情報を第三者に開示いたしません。
- 本会は、保有する個人情報に関して適用される日本の法令、その他規範を遵守致します。