電気化学会関東支部
第53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] 2025年10月22日(水)～ 2025年11月19日(水)
[実践ライブセッション] 2025年11月6日(木) 10:00～16:35

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_202510.html

開催形態 ： オンラインおよび現地開催のハイブリッド形式

・Vimeoによる講義のオンデマンド配信、および、Zoom＋現地開催によるライブセッション

・ライブセッションの現地開場は、中央大学・後楽園キャンパス

近年、マシン性能の飛躍的発展、様々な高精度理論の深化と多様化、さらに昨今のデジタル化大変革の波をあいまって、電気化学の分野においても計算化学の有用性が大きく期待されています。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、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年度のセミナー開始以降、大変なご好評を頂きつつ運営して参りました。**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計算化学セミナーを開催致します**。今回は、近年電気化学分野でも関心が高まっている第一原理計算に関して、オンデマンド配信やライブセッションでの特別講演の企画の追加をし、さらに内容を充実させました。初めて受講の方はもちろん、過去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に参加いただく場合、受講者の皆様にはそれぞれお手元のPCで計算を体験していただくため、事前にご自身のPCにソフトウェアをインストールする必要がございます。計算性能やアプリ動作が各PC環境に依存します(Windows11を推奨します)。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] 30-120分/1動画

1. 計算化学概論	早稲田大学	國本 雅宏氏	120分
2. 量子化学計算	甲南大学	山本 雅博氏	60-80分程度
3. 第一原理計算	筑波大学	大谷 実氏	60-80分程度
4. 分子動力学計算	横浜国立大学	都築 誠二氏	60-80分程度
5. 計算ソフト紹介	アドバンスソフト(株)	西原 慧径氏	30分程度

[ライブセッション](ハイブリッド)

10:00～	実行委員長挨拶、趣旨説明
10:05～	講師座談会 (講師紹介)
11:00～	特別講演 筑波大学 大谷実氏 「電極/電解液界面におけるDFTとRISMのハイブリッドシミュレーション」
12:00～	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！～【前編】
14:40～	小休憩
14:50～	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！～【後編】
16:30～	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。

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

【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　　3,000円

※参加費はいずれも税込です。

【定　員】

先着順、定員に達し次第締切り

※現地参加の方は、ノートPC持参してください

【参加申込期間】

2025年9月3日（水）～2025年10月15日（水）

【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53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_202510.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：シャ）デンキカガクカイカントウシブ
支店名：〇九八店（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17日(金)**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

〒305-8573 茨城県つくば市天王台1-1-1
筑波大学 数理物質系 辻村 清也
Tel:029-853-5358, E-mail : kanto@electrochem.jp
（ライブセッション当日の連絡先）ccs.ecsj.kanto@gmail.com

【個人情報の取扱い】

〇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。
〇本会は、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。
〇本会は、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。