

オンラインセミナー ナノシミュレーションセミナー 新材料の探索を加速する第一原理計算

新材料の研究・開発において、実験による材料の物性や特性評価だけでなく、シミュレーションによる物性予測も活用することで新材料の探索が加速しています。

その中でも特に、高度な物性予測が可能な「第一原理計算」は核となるシミュレーション手法であり、その重要性や活用頻度はますます増加していくことが予想されます。

本セミナーでは、材料の研究・開発の最前線でご活躍されている東北大学 多元物質科学研究所 教授 山田 高広 様に「極性金属間化合物の合成と物性・材料開拓 ～熱電材料とトポロジカル物質～」というタイトルで、第一原理計算を使用した材料開発に関してご講演いただきます。

またナノシミュレーションやマテリアルインフォマティクスの導入をご検討中の皆様向けの内容として、第一原理計算手法の概要の説明や、弊社の第一原理計算ソフトの最新情報もご紹介いたします。

材料開発に携わる皆さま、ご関心をお持ちの皆さまのご参加を心よりお待ちしております。

2024年**10月18日(金)**

14:00～16:00 無料

オンラインセミナー/zoom

招待講演

**東北大学
多元物質科学研究所
教授 山田 高広 様**

「極性金属間化合物の合成と物性・材料開拓 ～熱電材料とトポロジカル物質～」

電気陰性度差の大きな元素の組み合わせで構成される金属間化合物は、極性金属間化合物やジントル化合物と呼ばれ、イオン結合性と共有結合性を併せ持った多種多様な結晶構造を有し、金属から半金属、半導体、また超伝導性と多岐にわたる電気的特性を示す物質群です。

本セミナーでは、講演者の新規物質を含む多元系極性金属間化合物の合成と結晶構造解析、および物性・材料特性評価に基づく物質・材料科学に関する研究を紹介します。

具体的には、トンネル骨格構造を有する狭ギャップ半導体化合物に着目した新規熱電材料の開拓、ならびにトポロジカル物質（ノードルライン半金属）として注目されている2次元構造化合物の単結晶育成とそれらの低温物性に関する研究を中心に、最近の成果や研究事例について述べます。

アドバンスソフト株式会社 営業部
〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング17階西
TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580
URL: <https://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp



phase_s20240924

14:00-14:05 (5分)	アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ ご講演内容についてのご案内（先生のご経歴・研究内容の紹介） 営業部 佐藤 琴美
14:05-14:50 (45分)	招待講演 「極性金属間化合物の合成と物性・材料開拓 ～熱電材料とトポロジカル物質～」 東北大学 多元物質科学研究所 教授 山田 高広 様
14:50-15:10 (20分)	「材料開発における第一原理計算手法の概要」 技術第1部 主管技師長 岡崎 一行
15:10-15:55 (45分)	「第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 最新動向」 技術第1部 主任研究員 胡 春平
15:55-16:00 (5分)	関連サービス紹介、閉会のあいさつ 営業部 佐藤 琴美

※プログラムは変更となる可能性があります。

お申し込み方法

セミナーページの「参加申し込みフォーム」からお申し込みください。
<https://www.advancesoft.jp/seminar/27738/>



第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE

Advance/PHASE は、密度汎関数理論と擬ポテンシャルを用いた平面波展開による国産の第一原理計算ソフトウェアです。

1993年から複数の国プロによる開発を経て2004年にアドバンスソフト株式会社から商用版をリリースし、その後も現在まで30年以上の開発により進化し続けています。金属・半導体、触媒等の材料分野の研究開発を中心に多くの企業、研究機関、教育機関にご利用いただいております。

周期表全ての元素の擬ポテンシャルを揃えているため、金属・絶縁体・半導体・磁性体・誘電体・ハーフメタル・有機材料・有機半導体など様々な材料の結晶などの3次元系だけでなく、表面・界面や分子の孤立系のシミュレーションができます。

