



# 第26回 ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 材料計算セミナー



共催：新学術領域研究「複合アニオン化合物の創製と新機能」

ナノ構造研究所の活動の一環として、下記のセミナーを開催いたします。最新の第一原理計算とその応用の一端を知っていただければ幸いです。今回は、Tamkang University Ming-Hsien Lee 教授をお招きして、最新の第一原理計算技術およびそれを応用した非線形光学材料、EELS スペクトルの理論計算に関する講演を開催いたします。また、当日は日本語によるディスカッションタイムを設けております。皆様のご参加をお待ちしております。

場所（一財）ファインセラミックスセンター

名古屋市熱田区六野2丁目4番1号

JR東海道本線・熱田駅下車・北東へ徒歩5分

所在地の詳細は、[http://www.jfcc.or.jp/22\\_about/index.html](http://www.jfcc.or.jp/22_about/index.html) をご覧ください

**2019年3月5日(火) (定員20名) 参加費無料**

お申し込みは先着順とさせていただきますので、お早めどうぞ。

申し込みは電子メールで 担当(田口) Eメール: [a\\_taguchi@jfcc.or.jp](mailto:a_taguchi@jfcc.or.jp)

13:30 受付開始

14:00 開会挨拶 ナノ構造研究所 森分博紀 グループ長

14:10 最新の第一原理計算とその応用 I

Tamkang University Ming-Hsien Lee 教授

「New Tools Set for Visualising ab initio Physical Properties with Chemical Intuition :  
SHG-density for Non-linear optical crystals, bond-type projected EELS spectra, and  
possible new descriptors for materials informatics」

15:20 休憩

15:50 計算デモ

16:30 ディスカッションタイム

16:55 まとめ (BIOVIA, DASSAULT SYSTEMES)

17:00 終了予定