

## ” 金属の計算材料物性 ” – マルチスケールのアプローチ –

日程：10月7日(火)、14日(火)、21日(火)、11月7日(金) 全4日 (90分\*8回)

会場：10月7, 14, 21日 東北大学青葉山キャンパス 理学合同B棟7階743室

11月7日(配信セミナー) 東北大学青葉山キャンパス 理学合同B棟7階721室(配信元)

CMSI テレビ会議システムによる同時配信での受講可能会場：(会場詳細は別紙を参照ください。)

東北大学(片平)・東京大学(柏)・東京大学(本郷)・金沢大学・豊橋科技大学・分子研・名古屋大学  
京都大学・大阪大学(豊中)・大阪大学(吹田)・CMSI神戸拠点・産総研つくば

受講登録申し込み先 URL：<http://www.cms-initiative.jp/ja/events/20141107-cmrihaishin>

(上記サイトより事前申し込みをお願いいたします。)

### ---各回の題目と講師---

10/07(火) 14:50-	第1回	マルチスケール計算材料科学と金属物性	[ 寺田 弥生(金研 CMRI) ]
10/07(火) 16:30-	第2回	第一原理計算基礎	[ 陳 迎(工学研究科) ]
10/14(火) 14:50-	第3回	材料の粒界・界面の計算科学	[ 香山 正憲(産業技術総合研究所) ]
10/14(火) 16:30-	第4回	強誘電体のマルチスケール計算	[ 西松 毅(金研) ]
10/21(火) 14:50-	第5回	離散系から連続系へ	[ 毛利 哲夫(金研 計算材料科学センター CMRI) ]
10/21(火) 16:30-	第6回	鉄鋼材料の組織形成と変形	[ 山中 晃徳(東京農工大学) ]
11/07(金) 15:20-	第7回	CALPHAD(計算状態図)の基礎と応用*	[ 大沼 郁雄(工学研究科) ]
11/07(金) 17:00-	第8回	鉄鋼材料の魅力と計算材料科学への期待*	[ 潮田 浩作(新日鐵住金) ]

近年の計算材料科学の進展により、ミクロからマクロにいたる時空間のマルチスケールにわたって、材料物性について計算機を用いた研究を行うことが可能となりつつある。そこで、大学院生以上を対象に、全8回のセミナーで、第一原理計算や統計物理学などを基に、ミクロな領域からマクロな領域に関する問題、特に、本年度は、金属物性に関わるマルチスケール計算材料科学の現状と今後について講義と議論を行う。

金属や合金などの材料において、相図や延性や脆性などの材料物性に関わる問題は重要な課題である。これらはミクロな電子状態や原子間力のみならずよりマクロな様々な内部組織も考慮すべき問題である。そこで、理論やコンピュータのハード面・ソフト面の進展とともに、ミクロからマクロにわたるコンピュータシミュレーションを用いたより高精度の材料設計が期待されている。しかし、金属材料の結晶構造や合金の組成・転位・欠陥などや、よりマクロな結晶粒界・界面などの様々な内部組織を考慮した計算は、第一原理計算のみでもよりマクロな連続体モデル計算のみでも、現在の理論や最新のスーパーコンピュータによる計算では定量的な議論が非常に難しい問題である。

本セミナーシリーズでは、第1回にマルチスケール計算材料科学の概要と現在の課題を明らかにし、第2回目以降は様々なスケールにおける理論と計算手法、そこから得られる材料物性の最新の成果や今後の課題などを議論する。また、最終日11月7日の第7, 8回は、東北大学理学合同B棟7階721室を配信元としてテレビ配信システムを利用した学外のCMSI10数拠点でも受講が可能な配信セミナーとして実施する。

問い合わせ先 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点 寺田 弥生

e-mail:terada@imr.tohoku.ac.jp tel: +81-22-215-2840

## 各会場詳細

10月7, 14, 21日 (第1回-第6回)	
会場	定員
東北大学青葉山キャンパス 理学合同B棟7階743室 (第1-6回セミナー会場)	20名

11月7日 (第7, 8回)	
会場	定員
東北大学青葉山キャンパス 理学合同B棟7階721室 (大会議室) (配信元)	20名
東北大学片平キャンパス 金属材料研究所 国際教育研究棟2階セミナー室	20名
東京大学柏キャンパス 物性研究所 A614 セミナー室	24名
東京大学本郷キャンパス工学部6号館207	15名
分子科学研究所 実験棟512号室	8名
名古屋大学 工学部3号館南棟4階454室	9名
京都大学 福井謙一記念研究センター3Fセミナー1室 (予定)	16名
豊橋技科大 F棟2階F-207室 (予定)	10名
大阪大学豊中キャンパス 文理融合棟305セミナー室	25名
大阪大学吹田キャンパス M1棟セミナー室	20名
CMSI 神戸拠点 (AICS 5階 R501) *1	14名
産総研つくば中央第2 D-714-2b *2	10名
金沢大学 自然科学5号館 3F 324A室	10名

\*1 当日、AICS 玄関の警備員にお名前を告げ、入構カードをお受け取り下さい。

\*2 産総研は入館時に受付が必要なため、セミナー当日に、中央第2の玄関での受付をお願いいたします。受付開始時間は別途ご案内します。