

[参考] 2011年度 CMSI 元素戦略 WG 実験計算連携検討会プログラム

CMSI 元素戦略 WG 「磁性の部」 実験計算連携検討会

日時： 2011年7月29日(金) 13:30-17:00

会場： 東大本郷キャンパス理学部4号館3階1320号室 [地図]

【プログラム】

趣旨説明 寺倉 清之(北陸先端大), 常行 真司(東京大学/CMSI)

13:30-14:30 「強力磁石の理論」 金森 順次郎(大阪大学)

14:30-15:00 「元素戦略から考える希土類磁石の技術課題」 宝野 和博(NIMS 磁性材料)

15:00-15:30 「スピントロニクスと元素戦略」 高梨 弘毅(東北大学・金研)

15:30-16:00 「磁気異方性の第一原理計算と制御」 小田 竜樹(金沢大学・計算ナノ科学)

16:00-16:30 「スピン軌道相互作用による磁性と電気伝導の結合の理論」 多々良 源(首都大学東京 都市教養学部)

16:30-17:00 「計算物質科学の元素戦略『磁性』との連携 全体討議」 [進行] 寺倉 清之

CMSI 元素戦略 WG 「構造材料の部」 実験計算連携検討会 (第1回)

日時： 2011年10月4日(火) 13:30-17:00

会場： 東京大学本郷キャンパス 理学部 1号館3階338号室

【プログラム】

13:30-14:00 「元素機能解明が鍵を握る：構造金属材料の組織制御と特性向上」 津崎 兼彰(NIMS)

14:00-14:30 「セラミックスの粒界原子構造と材料設計」 幾原 雄一(東京大学)

14:30-15:00 「構造金属材料における元素戦略と産業界から見た計算科学への期待」 潮田 浩作(新日本製鐵株)

(休憩)

15:15-15:45 「軽合金材料のナノ組織制御法と高強度・高延性化」 里 達雄(東京工業大学)

15:45-16:15 「鉄鋼およびチタン合金の機能向上における軽元素利用」 古原 忠(東北大学)

16:15-16:45 「構造材料の元素戦略における計算材料科学の可能性」 尾方 成信(大阪大学)

16:45-17:00 全体討論

CMSI 元素戦略 WG 「電池材料の部」 実験計算連携検討会

日時： 2011年11月9日(水) 9:30-17:35

会場： 東京大学 本郷キャンパス 理学部1号館 2F 小柴ホール

【プログラム】

ご挨拶・座長： 榊 茂好（京大／分子研）

9:30-9:35 開会の辞 魚崎 浩平（物材機構）

9:35-9:40 ご挨拶（文科省）

<Session-1>

座長：久保 佳実（物材機構）

9:40-10:10 「招待講演：次世代自動車の取り組みー革新電池への期待と課題」 岡島 博司（トヨタ自動車）

10:10-10:40 「招待講演：リチウムイオン電池の現状と限界およびポストリチウムイオン電池の可能性」 宇恵 誠（三菱化学）

10:40-11:05 「招待講演：ポストリチウムイオン電池の基本戦略」 岡田 重人（九大先導物質化学研）

11:05-11:30 「招待講演：高容量ナトリウムイオン電池の材料研究」 駒場 慎一（東京理科大）

11:30-11:55 「招待講演：Na イオン電池における電解液分解反応の自由エネルギー解析」 長岡 正隆（名大院情報）

11:55-13:15 ・ ・ 昼食・休憩 ・ ・

<Session-2>

座長：宇恵 誠（三菱化学）

13:15-13:40 「招待講演：熔融アルカリ金属アミド塩を用いた蓄電池」 萩原 理加（京大院エネルギー科学）

13:40-14:05 「招待講演：電極界面でのイオン輸送と脱溶媒和過程の分子シミュレーション」 森田 明弘（東北大院理）

14:05-14:30 「招待講演：リチウムイオン電池正極材料の電子構造特性と理論設計」 山下 晃一（東大院工）

14:30-14:55 「招待講演：マグネシウム二次電池の考え方」 安部 武志（京大院工）

14:55-15:05 ・ ・ 休憩 ・ ・

<Session-3>

座長：山下 晃一（東大院工）

15:05-15:30 「招待講演：非水溶媒／遷移金属酸化物界面の平衡構造・電子状態：第一原理 MD 解析」 館山 佳尚（物材機構）

15:30-15:55 「招待講演：Li 空気電池の現状と研究課題」 久保 佳実（物材機構）

15:55-16:20 「招待講演：界面反応の第一原理シミュレーション」 森川 良忠（阪大院工）

16:20-16:30 ・ ・ 休憩 ・ ・

座長：魚崎 浩平（物材機構）

16:30-17:30 全体討議

17:30-17:35 閉会の辞 榊 茂好（京大/分子研）

CMSI 元素戦略 WG 「触媒の部」実験計算連携検討会

日時： 2011年11月12日(土) 9:30-17:35

会場： 京都大学 福井謙一記念研究センター

【プログラム】

座長： 山下 晃一 (東大院工)

09:30 - 09:35 開会の辞 榊 茂好 (京大/分子研)

09:35 - 09:40 ご挨拶 (文部科学省)

<Session-1>

09:40 - 10:15 「招待講演：自動車排ガス浄化・有機合成に有効な銀触媒の開発と設計のための作業仮説(仮題)」 清水 研一 (北大触媒セ)

10:15 - 10:50 「招待講演：高分散貴金属ミニマム化触媒の物質設計」 町田 正人 (熊本大工)

10:50 - 11:25 「招待講演：金/酸化物ナノヘテロ触媒：第一原理計算と電子顕微鏡観察によるアプローチ」 香山 正憲 (産総研)

11:25 - 13:00 昼食・休憩

<Session-2>

座長： 中野 雅由 (阪大院基礎工)

13:00 - 13:35 「招待講演：金属クラスターを利用した酸素酸化触媒の合理的開発に向けて」 佃 達哉 (北大触媒セ)

13:03 - 14:10 「招待講演：計算ミュレーションによる酵素触媒の反応設計(仮)」 吉澤 一成 (九大先導研)

14:10 - 14:45 「招待講演：固体表面担持ナノクラスターの電子物性と機能活性」 信定 克幸 (分子研)

14:45 - 15:00 休憩

<Session-3>

座長： 長谷川 淳也 (京大福井謙一研セ)

15:00 - 15:35 「招待講演：鉄触媒クロスカップリング反応」 中村 正治 (京大化研)

15:35 - 16:10 「招待講演：協働金属触媒による新しい炭素-炭素結合形成反応」 中尾 佳亮 (京大院工)

16:10 - 16:45 「招待講演：密度汎関数計算に基づく Ziegler-Natta プロピレン重合触媒の高精度モデリング」 ○谷池 俊明、寺野 稔 (北陸先端大院マテリアルサイエンス)

16:45 - 17:20 「招待講演：電子状態計算を用いた機能設計」 中井 浩巳 (早大先進理工)

17:20 - 17:35 まとめ 榊 茂好 (京大/分子研)

CMSI 元素戦略 WG 「電子材料の部」 実験計算連携検討会

日時： 2011年12月05日(月) 13:00-18:30

場所： 東京大学本郷キャンパス 理学部4号館3階1320号室

【プログラム】

司会：大野かおる(横国大)

13:00-13:20 ご挨拶(文科省)

CMSI 主旨説明 常行真司(東京大学/CMSI)

13:20-13:50 「電子材料の元素戦略に向けて」[実験代表] 細野秀雄(東工大)

【Dirac Cone, トポロジカル絶縁体】

13:50-14:20 「物質の幾何対称性と物性：非調和フォノン、ディラックコーン、トポロジカル絶縁体」
[実験] 谷垣勝己(東北大 WPI-AIMR・理)

【鉛フリー強誘電体】

14:20-14:40 「第一原理計算と分子動力学計算から見える BaTiO₃ と PbTiO₃ の相違」[理論] 西松毅
(東北大金研)

14:40-15:00 「負圧効果による強誘電体相転移の制御」[実験] 符徳勝(静岡大)

15:00-15:30 「界面制御による高性能非鉛系圧電材料の開発」[実験] 和田智志(山梨大)

15:30-16:00 . . . コーヒーブレイク . . .

司会：常行真司(東大)

【半導体(高移動度材料)】

16:00-16:30 「III-V 族化合物半導体材料—GaAs を中心に」[実験] 近藤高志(東大工)

16:30-17:00 「コンピューティクスによる物質デザイン：ナノ形状と機能」[理論] 押山淳(東大工)

【分子エレクトロニクス】

17:00-17:30 「エレクトロマイグレーションを用いた原子スケール電極加工と単一分子トランジスタ」
[実験] 平川一彦(東大生研)

17:30-18:00 「非平衡伝導に伴う局所発熱と緩和過程の理論」 [理論] 浅井美博(産総研)

18:00-18:30 統合討論

CMSI 元素戦略 WG 「構造材料の部」実験計算連携検討会（第 2 回）

（兼 計算材料科学研究拠点 第 2 回シンポジウム）

“計算材料科学の展望：構造用材料の機械的性質・耐熱強度における課題克服と産官学連携推進に向けて”

日時： 2011 年 12 月 06 日（火） - 2011 年 12 月 07 日（水）

場所： 東北大学 金属材料研究所 2 号館講堂

【プログラム】

《12 月 6 日（火）》

司会：毛利哲夫

10:30 開会の挨拶 新家光雄（東北大学 金属材料研究所 所長）

10:40 「京を中核とした HPCI の構築と HPCI 戦略プログラムの概要」 林 孝浩（文部科学省 計算科学技術推進室長）

11:00 「シンポジウム開催にあたって」 毛利哲夫（CMSI 計算材料科学拠点長）

11:20 ◎鉄鋼材料の課題 産業から

「産業界から見た鉄鋼材料における計算科学への期待」 潮田浩作（新日本製鐵(株)フェロー）

12:00 ランチ

司会：田中功

◎材料の機械的性質（強度・延性）

固溶強化／転位強化／析出・分散強化／粒界強化

延性（集合組織／結晶塑性 FEM、延性破壊、脆性破壊）

13:00 実験の立場から

「高強度鋼における材料組織学的課題」 古原 忠（東北大学 金属材料研究所）

13:30 J-PARC 活用の立場から

「鉄鋼材料研究において量子ビームにより新たに観えてきた事実」 友田 陽（茨城大学 工学部物質工学科）

14:00 計算科学の立場から

「材料強度物性と材料強度設計」 毛利哲夫（北海道大学 大学院工学研究科／東北大学 金属材料研究所）

14:30 コーヒーブレイク

司会：大野かおる

14:50 ◆招待講演 「ナノ構造体の熱伝導計算に向けて」 常行真司（東京大学 大学院理学研究科（CMSI 統括責任者））

15:30 ◆招待講演 「共同利用スパコンを利用した物性物理学研究」 川島直輝（東京大学 物性研究所（CMSI 計算物性科学拠点長））

16:10 ◆招待講演 「液体の計算分子科学～化学反応・熱揺らぎ・柔軟性～」 佐藤啓文（京大大学院工学研究科 分子工学専攻）

16:50 コーヒーブレイク

司会 川上和人

◎加工・析出・変態組織形成

17:10 「高転位密度および超微細粒組織をもつ Al-Mg-Si 合金で観察される競合析出現象の実験的ならびに計算科学的研究」 廣澤渉一（横浜国立大学 大学院工学研究院）

17:40 「フェーズフィールド法と有限要素法による熱間加工マルチスケール解析」 高木知弘（京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科）

18:10 終了

《12月7日（水）》

司会：西谷滋人

◎高温強度

9:30 実験の立場から「金属材料の高温強度」 中島英治（九州大学 大学院総合理工学研究院）

10:00 計算科学の立場から（クリープ）

「ナノ結晶のクリープ変形の原子シミュレーション」 尾方成信（大阪大学 大学院基礎工学研究科）

10:30 計算科学の立場から（粒界／界面）

「材料中の粒界・界面の第一原理計算：現象の解明から設計へ」 香山正憲（産業技術総合研究所）

11:00 コーヒーブレイク

司会：渡邊育夢

11:20 ◎粒界／転位

「転位と粒界の相互作用に関する原子シミュレーション」 下川智嗣（金沢大学 工学部）

11:50 ◎固溶強化・溶質の熱力学

「機械的性質における溶質原子の役割の第一原理計算：主に固溶強化を例として」 上杉徳照（大阪府立大学）

12:20 ランチ

司会：松宮徹

産官学連携シンポジウム（「界面と組織制御」がテーマ）

13:10 ○企業での計算材料科学活用例紹介

①「鋼中析出物界面の構造とエネルギー」 澤田英明（新日本製鐵）

②「耐熱鋼中の界面におけるクリープ損傷シミュレーション」 中村馨（電力中央研究所）

③「Phase-Field モデルに基づく転位動力学計算と力学特性評価」 海藤宏志（住友金属工業）

14:25 コーヒーブレイク

14:45 ◆パネル討論◆ 「産官学連携に期待すること（仮題）」

澤田英明、中村馨、海藤宏志、香山正憲、大谷博司（九大）、陳迎（東北大）

15:50 閉会の挨拶 古原忠（東北大学 金属材料研究所 副所長／CMSI 計算材料科学副拠点長）