

# 平成 24 年度 計算材料科学研究拠点 (CMRI) 第一回シンポジウム

開催日程：平成 24 年 6 月 18 日 (月)、6 月 19 日 (火)

開催場所：東北大学 金属材料研究所 2 号館講堂

## 【プログラム】

6 月 18 日 (月)

10 : 30 「開会にあたって」毛利 哲夫 計算材料科学研究拠点 (CMRI) 拠点長

## 【重点課題】司会 松宮 徹

10 : 45 重点課題の overview

「金属中の粒界・界面の第一原理計算：力学特性の解明に向けて」

香山 正憲 産業技術総合研究所

11 : 15 「OpenMX によるオーダーN 超並列第一原理計算の現状と展望」

尾崎 泰助 北陸先端科学技術大学院大学

11 : 55 「Fe/NbC の構造とエネルギーの第一原理計算」

澤田 英明 新日本製鐵(株)

12 : 25 \*\*\*\*\* 昼 食 \*\*\*\*\*

13 : 30 「第一原理計算による粒界脆化の研究：鉄の焼戻し脆性と水素脆性」

山口 正剛 日本原子力研究開発機構 (JAEA)

## 【特別支援課題の構築に向けて I】司会 尾方 成信

14 : 00 特別支援課題の構築に向けて

「界面の第一原理計算からフェーズフィールド法へのマッピングについて」

大野かおる 横浜国立大学 大学院工学研究院

14 : 30 「凝固組織の高精度・大規模計算を目指したフェーズフィールド・モデリング」

大野 宗一 北海道大学 大学院工学研究院

「スパコン TSUBAME2.0 による dendroライト凝固成長の超大規模計算」

高木 知弘 京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科

「大規模分子動力学法による凝固過程の固液界面挙動解析と高温物性値導出」

澁田 靖 東京大学 大学院工学系研究科

15 : 30 \*\*\*\*\* コーヒーブレイク \*\*\*\*\*

## 【材料科学の大型プロジェクトとの連携 I】司会 田中 功

16 : 00 科研費・新学術領域プロジェクト「バルクナノメタル 一常識を覆す新しい構造材料の科学」の紹介

辻 伸泰 京都大学 大学院工学研究科

## 【特別支援課題の構築に向けて II】司会 大野 かおる

16 : 30 「物質中の双極子相互作用とその大規模高速計算～強誘電体メモリや強力磁石のシミュレーション～」

西松 毅 東北大学 金属材料研究所

「超大規模第一原理計算によるハイドロートを用いた新規ガス貯蔵材料の評価」

水関 博志 東北大学 金属材料研究所

「全電子混合基底法プログラム TOMBO による水素貯蔵材料開発」

佐原 亮二 東北大学 金属材料研究所

17:30 「Fe-Si 二元合金系の力学と熱力学特性の第一原理計算」

陳 迎 東北大学工学研究科

「第一原理計算手法を用いたナノ材料界面の機能特性の研究」

田中 真悟 産業技術総合研究所

【平成 23 年度 CMRI 若手海外派遣報告】 司会 毛利 哲夫

18:20 「1次元ピーナツ型フラレンポリマーの計算科学シミュレーション」

野田 祐輔 横浜国立大学 大学院工学府

19:00 \*\*\* 懇親会 (ホテルベルエア) \*\*\*

6月19日 (火)

【特別講演】 司会 毛利 哲夫

9:30 「界面の運動を解析する数学的手法」

大塚 岳 群馬大学 大学院工学研究科

【特別支援課題の構築に向けて III】 司会 川添 良幸

10:20 「La-Ni 系水素吸蔵合金中の空孔形成に関する理論計算」

水野 正隆 大阪大学大学院工学研究科

「鉄基合金における結晶磁気異方性エネルギーの第一原理計算」

榎木 勝徳 九州工業大学マテリアル工学科

【材料科学の大型プロジェクトとの連携 II】 司会 香山 正憲

11:20 JST-CREST 研究「軽元素戦略に基づく鉄鋼材料のマルチスケール設計原理の創出」の紹介

古原 忠 東北大学 金属材料研究所

12:00 \*\*\*\*\* 昼食 \*\*\*\*\*

13:30 「第一原理計算に基づく金属結晶の相転移経路」

田中 功 京都大学 大学院工学研究科

14:00 「ハミルトニアンからの材料強度設計」と計算材料科学

毛利 哲夫 北海道大学 大学院工学研究院／東北大学 金属材料研究所

14:30 「大型プロジェクトでシミュレーション計算に期待されること」

川添 良幸 東北大学未来科学技術共同研究センター