

第一原理で紐解く、結晶中の点欠陥が編み出す化学結合の正体

First principles insight into chemical bonding in solids viewed from perfect crystals and point defects

6月26日（水）午後：東北大学金属材料研究所 1号館7階セミナー室1（719号室）

支援：東北大学金属材料研究所 国際共同利用・共同研究拠点、計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS

依頼講演：講演時間 45 分＋質疑応答 15 分（●印）

一般発表：講演時間 15, 25, 40 分＋質疑応答 5 分

会議言語：英語

6月26日午後（金研1号館7階セミナー室）

14:00 開会

Vu Thi Ngoc Huyen 14:00～14:20	東北大学金属材料研究所	The First-Principles Study of Point Defects in Bulk TeO_2
Rafael Costa- Amaral 14:20～14:40	東北大学金属材料研究所	Intrinsic Point Defects in Atomically-Thin TeO_2 : Insights from First Principles
清原 慎 14:40～15:00	東北大学金属材料研究所	Bayesian optimization with gaussian process assisted by deep learning for material design
Jan Hempelmann 15:00～16:00	東京工業大学	● Detecting Unusual Bonding in Functional Materials using pFC and COBI
小川 幹太 16:00～17:00	東京工業大学	● Lone pair engineering in Bi based materials
ベ ソンミン 17:00～17:30	東北大学金属材料研究所	Doping strategy of two-dimensional MoS_2
熊谷 悠 17:30～18:45	東北大学金属材料研究所	TBA

会場案内



1号館7階セミナー室1

