

第 31 回 日本 MRS 年次大会
2021 年 12 月 13 日 (月) ~12 月 14 日 (火)、オンライン (Zoom)

C: 計算機シミュレーションによる先端材料の解析・機能創成
Creation and characterization of advanced materials through computer simulation

◆ スコープ

計算材料科学は現在飛躍的に進歩している分野であり、新規材料の解析や機能の創成にとって、不可欠な方法である。高分解能・高精度な実験手法と共に計算機シミュレーションおよび情報科学を活用することで、ナノスケールから新たな材料を生み出すことを可能にし、材料革命を実現することが期待できる。高性能材料の創成はエネルギー、人の健康、地球環境、運輸業、製造業などに関わる分野での問題を解決する手段として、重要な役割を果たす。本シンポジウムでは、新たに生み出される材料の諸特性の相関に焦点を当て、電子・原子レベルから、連続体モデルまで広範囲にわたる計算材料科学的手法（第一原理計算、古典分子動力学、転位動力学、フェーズフィールド法、マルチスケールモデリングなど）による研究成果を基に、材料の特性（機械的特性、電気伝導性、熱伝導性、強誘電性、磁気特性、光学特性、粒成長・焼結など）とその起源について横断的かつ多面的で活発な議論を行う。特に、最近の計算技術の進展あるいはマテリアルズ・インフォマティクスへの展開についての発表を歓迎する。

Computational materials science is a dynamic and rapidly developing field now viewed as essential for the characterization and creation of new materials. Together with high-resolution, high-precision experimental methods, computer simulation combined with information science is facilitating a materials revolution by enabling complex systems to be analyzed and designed from the nano-scale upwards. It thus has a vital role to play in addressing many pressing problems facing society in the areas of energy, health, environment, transport, and manufacturing. This symposium will focus on properties of newly developed materials based on a wide range of computational materials science methods spanning from the electronic and atomic levels to continuum models (including quantum-mechanical calculations, classical molecular dynamics, dislocation dynamics, phase-field modeling, and multiscale methods). Results from these methods will form the basis of lively and multifaceted discussions of materials phenomena such as electrical and thermal conductivities, ferroelectricity, magnetism, catalysis, optics, grain growth and sintering. Contributions relating to new computational techniques or the burgeoning field of materials informatics are particularly welcome.

◆ 招待講演者（50音順、敬称略）及び講演仮題

- ・ 上杉徳照（大阪府大）、「金属材料の顕微鏡画像の深層学習」
- ・ 笠松秀輔（山形大）「複合酸化物バルクおよび界面イオン分布の第一原理基統計熱力学シミュレーション」
- ・ Wilson Agerico Diño（大阪大）、「Surface as a Playground for Exploring Physical Phenomena and a Foundation for Realizing Designer Materials: Hydrogen-Surface Reaction, a Case Study」
- ・ Sergei Manzhos（東工大）、「Machine learning for large-scale ab initio simulations with orbital-free DFT」
- ・ 横山智康（パナソニック/東工大）、「第一原理計算による有機-無機ハイブリッド材料の構造予測および物性予測」
- ・ TBA

◆ 詳細情報、**一般講演申込（口頭発表／ポスター発表）**

<https://www.mrs-j.org/meeting2021/jp/>（シンポジウム C を御指定下さい）

<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/mrsj/>（詳細や**今年の変更点**など：アップデートまだ）

一般講演申込・概要提出締切り：2021年09月03日(金)（おそらく延長あります）

概要差し替え期限：おそらく9月初旬もオーガナイザー経由で可能と予想

（万が一遅れそうになる場合は、事前に下の連絡担当アドレスまで電子メールにてご一報下さい）

◆ シンポジウムオーガナイザー

吉矢真人（大阪大）、大場史康（東京工業大学）、田村友幸（名工大）、Craig A. J. Fisher（JFCC）、小谷岳生（鳥取大学）、田中真悟（産総研）、Hannes Raebiger（横浜国大）

◆ 連絡・問い合わせ先 E-mail: mrsj-organizer@cmdc.ams.eng.osaka-u.ac.jp