

第 25 回 日本 MRS 年次大会  
2015 年 12 月 8 日 (火) ~ 12 月 10 日 (木)、横浜市情報文化センター、他

## E-2: 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

(当シンポジウム開催日は、おそらく 12/8-9 (未定)。当シンポジウムの懇親会を 12/8 に予定)

### ◆ 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。

Computational materials science is a dynamic and rapidly developing field now viewed as essential for the characterization and creation of new materials. In conjunction with high-resolution, high-precision experimental methods, computer simulation is facilitating a materials revolution by enabling complex systems to be analyzed and fabricated 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 bring together computational materials scientists to discuss the latest advances in this field, from developments in simulation methodologies such as quantum-mechanical calculations, classical molecular dynamics, dislocation dynamics, phase-field modeling, and multi-scale methods, to their use in studying a wide spectrum of materials phenomena, including, but not limited to, electrical and thermal conductivity, ferroelectricity, magnetism, catalysis, optics, grain growth and sintering, based on the influence of point defects, grain boundaries, dislocations, surfaces, and complex interfacial structures on functional and mechanical properties.

### ◆ 招待講演者 (50音順、敬称略)

- ・ 桑原 彰秀 (JFCC)、"First-principles calculations of Li ion migration at interfaces of  $\text{Li}_{1.2}\text{Mn}_{0.567}\text{Ni}_{0.167}\text{Co}_{0.067}\text{O}_2$  cathode"
- ・ 小鍋 哲 (東京理科大)、「原子層材料の第一原理熱電シミュレーション」
- ・ 志賀 元紀 (岐阜大)、「材料科学分野における統計的機械学習」
- ・ 竹内 恒博 (豊田工大)、「精密電子構造解析に基づく熱電物性の理解と高性能熱電材料の設計指針」
- ・ 三成 英樹 (ソニー)、「Application of atomistic simulations to development of advanced semiconductor devices」
- ・ 山口 正剛 (JAEA)、「モバイル水素による鉄鋼の粒界水素脆性：第一原理計算」

### ◆ 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/meeting2015/jp/> (シンポジウム E-2 を御指定下さい)

<http://www.cmdc.ams.eng.osaka-u.ac.jp/mrsj/> (詳細など)

一般講演申込・概要提出締切り：平成 25 年 08 月 12 日(月) 日本時間：期間厳守

(万が一遅れそうになる場合は、事前に吉矢までご連絡ください)

### ◆ シンポジウムオーガナイザー

吉矢真人 (大阪大)、Craig A. J. Fisher (JFCC)、大場史康 (京都大学)、上杉徳照 (大阪府大)、篠嶋妥 (茨城大)、小谷岳生 (鳥取大学)、香山正憲 (産総研)、田村友幸 (名工大)

### ◆ 代表・連絡担当

吉矢 真人：Phone: 06-6879-7473 / Fax: 06-6879-7476 / E-mail: [yoshiya@ams.eng.osaka-u.ac.jp](mailto:yoshiya@ams.eng.osaka-u.ac.jp)

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1 大阪大学大学院工学研究科 知能・機能創成工学専攻