

## 平成 23 年度 計算材料科学研究会

集会名：「計算材料科学のフロンティア勉強会」

主催：金属学会計算材料科学研究会

共催：CMRI 計算材料科学研究拠点、CMSI 物質計算科学イニシアティブ

日時：2012年3月6日(火) 午後1時～3月7日(水) 午後6時半

会場：産業技術総合研究所 関西センター・人間計測棟会議室(大阪府池田市緑が丘 1-8-31、  
阪急宝塚線池田駅下車・徒歩 10 分)

趣旨：計算材料科学の最新の計算手法や理論を基礎からじっくり学ぶ勉強会を開催します。大学・企業・国研の若手研究者や学生・院生の参加を推奨します。講師の先生方には、計算法の基礎理論や手法の概要の理解を主目的に講義いただきます。基礎方程式や参考文献などを含むパウポのプリントを可能な限り配布し、理解を助けます。会員外の方も奮ってご参加ください(参加費無料)。

申込み：2月末日までに、産総研ユビキタス、武 y-take@aist.go.jp まで、  
「勉強会参加希望」という表題のメールで、①名前、②所属(学生・院生の場合は学年)、③懇親会(会費 3000~4000 円程度)への参加の有無、を書いてお申し込みください(多数になった場合先着順)。

問合先：産総研ユビキタスエネルギー研究部門・香山正憲 m-kohyama@aist.go.jp

### プログラム

#### 3月6日(火曜)

1:00-1:30 「Introductory Talk: 計算材料科学の実態と将来像」川添良幸(東北大金研)

1:30-2:30 「レアイベント解析のための原子論的計算手法」尾方成信(阪大基礎工)

2:30-3:30 「結晶の対称性とフォノン計算」東後篤史(京大工)

Break

3:50-4:50 「物質中の双極子相互作用の計算方法」西松毅(東北大金研)

4:50-5:50 「経路積分分子動力学法の概要と応用：ニュートン運動方程式を用いた量子効果の評価」君塚肇(阪大基礎工)

6:10- 7:10 懇親会

#### 3月7日(水曜)

9:40-10:40 「クラスター変分法のフロンティア」毛利哲雄(北大工・東北大金研)

Break

10:50-11:50 「クラスター展開法に基づいた第一原理熱力学計算」世古敦人(京大工)

昼食休憩

1:00-2:00 「全電子混合基底法による GW 計算・TDDFT 計算」大野かおる(横国大工)

2:00-3:00 「スピン軌道相互作用とノンコリニア磁性」石橋章司(産総研ナノシステム)

Break

3:20-4:20 「量子伝導の計算方法」渡邊聡(東大工)

4:20-5:20 「ハイブリッド量子古典シミュレーションとその適用例」尾形修司(名工大工)

Break

5:30-6:30 「平面波基底法における局所エネルギー・局所応力計算」香山正憲(産総研ユビキタス)