

口頭発表

会場:横浜市開港記念会館1号室

Entry No	基調/招待	講演番号	講演日	講演開始時間	講演終了時間	講演者姓(J)	講演者名(J)	所属先(J)	Paper Title(J)	Paper Title(E)
座長:クレイグ・フィッシャー/JFCC										
10136	Invited	R-09-001	12月9日	9:30	10:10	小林	亮	名古屋工業大学	格子欠陥のマルチスケール・シミュレーション	Multiscale Simulation of Defects in Solids
10474		R-09-002	12月9日	10:10	10:30	池田	裕治	京都大学 構造材料元素戦略研究拠点	スピン空間平均法に基づく常磁性結晶に対するフォノン分散の計算	Calculations of Phonon Dispersions for Paramagnetic Crystals based on the Spin Space Averaged Method
10065		R-09-003	12月9日	10:30	10:50	西松	毅	東北大学金属材料研究所	磁気双極子ナノ粒子の高速分子動力学シミュレーション	Fast Molecular-Dynamics Simulations of Dipolar Magnetic Nanoparticles
休憩										
座長:チャタジャー・アビジット/Accelrys										
10805		R-09-004	12月9日	11:00	11:20	福島	鉄也	大阪大学大学院基礎工学研究科	第一原理に基づいた希薄磁性半導体におけるHubbard Uの計算	First Principles Calculations of Hubbard U Parameters in Dilute Magnetic Semiconductors
10193		R-09-005	12月9日	11:20	11:40	竹内	一仁	京都大学大学院工学研究科	「構造積分」を用いた大規模系の自由エネルギー計算	Direct Evaluation of Free Energy for Large System through Structure Integration Approach
昼休み										
座長:大場史康/京都大学										
10133	Invited	R-09-006	12月9日	14:10	14:50	田中	真悟	産総研ユビキタスエネルギー	第一原理計算によるLTO表面・界面構造と化学状態	First-Principles Study of Atomic and Electronic Structures and Chemical States of Lto Surfaces and Interfaces
10015		R-09-007	12月9日	14:50	15:10	渡邊	学	大阪大学大学院 工学研究科 知能・機能創成工学専攻	鉄鋼材料の δ/γ 変態における γ 相核生成への界面エネルギーの寄与	Effect of Interface Energy on γ -Fe Nucleation upon δ/γ Phase Transition of Carbon Steel
10134		R-09-008	12月9日	14:50	15:10	王	昊	産業技術総合研究所		First-Principles Local-Energy and Local-Stress Calculations of Grain Boundaries in Al And Cu: Effects of Impurities
休憩										

Entry No	基調/招待	講演番号	講演日	講演開始時間	講演終了時間	講演者姓(J)	講演者名(J)	所属先(J)	Paper Title(J)	Paper Title(E)
座長: 田中真悟/AIST										
10457	Invited	R-09-009	12月9日	15:40	16:20	笠松	秀輔	東京大学大学院工学系研究科マテリアル工学専攻/東京大学物性研究所	金属/酸化物界面における物性変調の第一原理解析	First Principles Analysis of Materials Properties Modification at Metal/Oxide Interfaces
10423		R-09-010	12月9日	16:20	16:40	浦長瀬	正幸	京都大学大学院工学研究科	マグネシウム単結晶中における転位ループ生成の熱活性化過程	Thermal Activation Process of Nucleation of A Dislocation Loop in a Magnesium Single Crystal
10451		R-09-011	12月9日	16:40	17:00	横井	達矢	大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻	M ₂ O ₃ 添加ZrO ₂ 中の粒界領域における元素配置と局所イオン伝導度の関係性の解明	Modification of Local Oxygen Conductivity by Grain Boundary Segregation in Impurity Doped ZrO ₂
休憩										
座長: 田村友幸/NITECH										
10067		R-09-012	12月9日	17:10	17:30	Sharma	Vikas	AIST		Local Mechanical Properties of Iron-Precipitate Coherent Interfaces using First-Principles Calculations
10464		R-09-013	12月9日	17:30	17:50	藤田	武士	横浜国立大学 大学院 工学府 物理情報工学専攻 物理情報工学コース	n-型、p-型条件における遷移金属添加半導体、絶縁体中の遷移金属群形成	Transition Metal-Cluster Formation in Transition Metal Doped Semiconductors or Insulators for n- or p- Type Doping Conditions
10227		R-09-014	12月9日	17:50	18:10	日沼	洋陽	京都大学	第一原理計算を用いたカルコピライト・閃亜鉛鉱構造半導体におけるイオン化ポテンシャルとバンドオフセットの算出	Obtaining Ionization Potentials and Band Offsets in Chalcopyrite and Zincblende Semiconductors using First Principles Calculations
座長: 笠松 秀輔/東京大学										
10284		R-09-015	12月9日	18:10	18:30	藤井	進	大阪大学大学院 工学研究科 知能・機能創成工学専攻	層状Co酸化物のフォノン熱伝導と層間相互作用の関連性評価	Analysis of Correlation between Interlayer Interaction and Phonon Thermal Conduction in a Layered Cobalt Oxide Ca ₃ Co ₄ O ₉
10076		R-09-016	12月9日	18:30	18:50	祐村	渥人	大阪大学 工学研究科 知能・機能創成工学専攻	第一原理計算による2.5次元層状酸化物の構造安定性と物性の系統的解析	Systematic Study on the Stability and Property of 2.5-D Layered Oxides by <i>ab initio</i> Calculations

Entry No	基調/招待	講演番号	講演日	講演開始時間	講演終了時間	講演者姓(J)	講演者名(J)	所属先(J)	Paper Title(J)	Paper Title(E)
10417		R-O9-017	12月9日	18:50	19:10	森	英喜	産業技術短期大学 機械工学科	磁性を考慮したBond-Order Potential によるBCC鉄中らせん転位の易動度の解析	Analysis of Mobility of Screw Dislocation in Bcc Iron By using Magnetic Bond Order Potential
座長:小林亮/NITECH										
10028	Invited	R-O10-001	12月10日	9:30	10:10	中山	将伸	名古屋工業大学/JSTさきがけ/京都大学 触媒電池元素戦略拠点	第一原理計算と電気化学測定によるリチウムイオン電池正極材料の充放電反応解析	Analysis of Charge-Discharge Reactions in Li-Ion Battery Cathode Materials using First-Principles Calculations and Electrochemical Measurements
10488		R-O10-002	12月10日	10:10	10:30	稲吉	輝	名古屋工業大学大学院	Liイオン二次電池正極固溶体材料のLi拡散に関する第一原理計算	Li-Ion Migration in a Li-Rich Layered Cathode Material: A First-Principles Study
10738		R-O10-003	12月10日	10:30	10:50	屋山	巴	九州大学 稲盛フロンティア研究センター/JST-CREST	Pd系水素吸蔵合金における固溶元素の影響	The Dopant Effect on Hydrogen Storage of Binary Pd Alloy
10481		R-O10-004	12月10日	10:50	11:10	横山	智康	京都大学大学院工学研究科 材料工学専攻	Cu ₂ O基中間バンド型太陽電池の理論変換効率シミュレーション	Photovoltaic Conversion Efficiency Simulations of Impurity Doped Cu ₂ O with an Intermediate Band
10482		R-O10-005	12月10日	11:10	11:30	Chatterjee	Abhijit	Accelrys		Surface Reaction Over Pt-Ru Catalyst for Methanol Fuel Cell - A First Principle Rationalization
昼休み										
座長:世古 敦人/京都大学										
10408	Invited	R-O10-006	12月10日	13:00	13:40	RAEBIGER	Hannes	Yokohama National University		3D Transition Metal Atoms in Small Molecules and Insulators
10411		R-O10-007	12月10日	13:40	14:00	小谷	岳生	鳥取大学	線形化(APW+MTO)法に実装した準粒子自己無同着法とその応用	Quasiparticle Self-Consistent GW Method Implemented in the Linearized Apw+Mto Method
10551		R-O10-008	12月10日	14:00	14:20	服部	達徳	名古屋工業大学大学院工学研究科	分子動力学法を用いたタングステン中ヘリウム誘起欠陥形成機構の研究	A MD Study On Helium-Induced Defect-Formation Mechanism in Tungsten

Entry No	基調/招待	講演番号	講演日	講演開始時間	講演終了時間	講演者姓(J)	講演者名(J)	所属先(J)	Paper Title(J)	Paper Title(E)
座長:レービガー・ハンネス/横浜国立大学										
10318	Invited	R-O10-009	12月10日	14:30	15:10	世古	敦人	京都大学大学院工学研究科	網羅的第一原理計算と統計解析手法による材料物性予測	Efficient Material Exploration Based on Systematic Density-Functional Calculations and Machine Learning Techniques
10386		R-O10-010	12月10日	15:10	15:30	東後	篤史	京都大学構造材料元素戦略研究拠点	自動化に適した材料シミュレーションソフトウェアの開発	Development of Materials-Simulation Software from an Automation Viewpoint
10467		R-O10-011	12月10日	15:30	15:50	高橋	亮	京都大学大学院工学研究科	網羅的第一原理計算とニューラルネットワーク回帰に基づいたAIの高精度原子間ポテンシャル	Accurate Interatomic Potential for Aluminum Based on First Principle Calculation and Neural Network Regression
座長:中山将伸/名古屋大学										
10205		R-O10-012	12月10日	16:00	16:20	大脇	創	日産自動車株式会社 総合研究所	O(N)第一原理計算法における軌道解析手法の開発	An Orbital-Analysis Method for O(N)-DFT Calculation Schemes
10355		R-O10-013	12月10日	16:20	16:40	上杉	徳照	大阪府立大学大学院 工学研究科	第一原理計算によるアルミニウム合金のミスフィットひずみに基づく固溶強化の予測	Design of Solid Solution Strengthening Based on First-Principles Calculations of Misfit Strain in Aluminum Alloys
10084		R-O10-014	12月10日	16:40	17:00	Bhattacharya	Somesh	AIST,Osaka		Mechanical Properties of Fesi Alloys : From The Viewpoint of ab initio Local Energy and Local Stress
10344		R-O10-015	12月10日	17:00	17:20	田村	友幸	名古屋工業大学	第一原理計算によるbcc-W中の希ガスクラスターの形成機構の解明	First-Principles Investigation of Possible Clustering of Noble Gas Atoms Implanted in bcc W