

## 第26回 格子欠陥フォーラム 「格子欠陥材料のマルチスケール計算科学」

**主催**：日本物理学会・領域10「格子欠陥・ナノ構造」分科  
**協賛**：日本物理学会（予定），日本金属学会

**日程**：2016年9月8日(木)，9日(金)（2日間）

**場所**：コープイン京都 2階202会議室

[アクセス] JR京都駅下車後，地下鉄烏丸線「四条」駅から徒歩10分  
京都府京都市 中京区柳馬場蛸薬師上ル井筒屋町411  
(<http://www.coopinn.jp/access.html>)

**趣旨**：「格子欠陥材料のマルチスケール計算科学」をテーマに，原子空孔や積層欠陥，転位，界面・表面偏析等の欠陥を含む結晶性材料の物性予測のための，電子・原子・分子～組織レベルに至るマルチスケールでの計算機シミュレーションに関する招待講演を企画する．当該分野における先駆的・独創的な研究を進めている講演者から最先端の刺激的な話題を提供頂き，参加者との議論を通じて，格子欠陥研究の現状と今後の課題について理解を深めることを目指す．

**定員**：50名程度（申込先着順）

**参加費**：一般 5,000円 学生 2,000円（お支払いは当日現金のみでお願いします．）

**懇親会費（希望者のみ）**：5,000円（参加費に懇親会費は含まれていません．）

**申込締切日**：2016年8月31日（水）

**申込方法**：表題を「格子欠陥フォーラム申込」とし，本文に

「① お名前，② ご所属，③ 一般または学生の別，④ 連絡用E-mailアドレス，⑤ 懇親会ご参加の有無」を明記して，下記連絡先（[yuge.koretaka.4r@kyoto-u.ac.jp](mailto:yuge.koretaka.4r@kyoto-u.ac.jp)）宛にE-mailによりお申込みください．

**連絡先**：〒606-8501 京都府京都市左京区吉田本町  
京都大学大学院工学研究科 材料工学専攻  
弓削是貴

E-mail: [yuge.koretaka.4r@kyoto-u.ac.jp](mailto:yuge.koretaka.4r@kyoto-u.ac.jp) [\*ご送信の際は[at]を@に変えて下さい.]

**企画・運営**：日本物理学会・領域 10「格子欠陥・ナノ構造」分科

運営委員 弓削是貴（京都大学），河野日出夫（高知工科大学）

<http://www.r10.div.jps.or.jp/LatticeDefect/>

## プログラム

### 2016年9月8日(木)

- 14:00-14:10 開会挨拶
- 14:10-15:20 香山 正憲 (産業技術総合研究所)  
「計算材料科学の発展：これまでの経験と第一原理局所エネルギー・局所応力法開発」【基調講演】
- 15:20-16:10 世古 敦人 (京都大学)  
「第一原理計算と機械学習手法を使った材料物性予測」
- 休憩(20 分)
- 16:30-17:20 土井 祐介 (大阪大学)  
「原子スケールでの非線形振動・ダイナミクス」
- 17:20-18:10 松中 大介 (信州大学)  
「マグネシウム合金における格子欠陥の第一原理計算」
- 18:10-19:00 椎原 良典 (豊田工業大学)  
「格子欠陥近傍応力場を解明する第一原理原子応力計算法の開発」
- 19:30-21:30 懇親会 (会場付近)

### 2016年9月9日(金)

- 9:30-10:40 小谷 岳生 (鳥取大学)  
「QSGW 法 (準粒子自己無撞着 GW 法) の物質科学への応用」【基調講演】
- 10:40-11:30 池野 豪一 (大阪府立大学)  
「内殻X線吸収分光と第一原理計算によるナノ構造解析」
- 11:30-12:20 東後 篤史 (京都大学)  
「計算機によるフォノン計算：ソフトウェア開発から応用まで」
- 休憩(80 分)
- 13:40-14:30 小泉 雄一郎 (東北大学)  
「フェーズフィールド法を用いた合金中の組織形成と界面偏析の研究」
- 14:30-15:20 譚田 真人 (大阪大学)  
「電子論に基づく鉄中のらせん転位-固溶原子の相互作用解析」
- 15:20-15:30 閉会挨拶

備考:

- ・ 宿泊,食事等につきましては参加者様ご自身でご手配頂きますようお願い致します.
- ・ やむを得ない事情によりプログラムに変更が生じる場合もございます.予めご了承下さい.

以上