

7月21日(木)

- 12:30 受付開始
- 13:00-13:10 開会のあいさつ  
常行真司(業務受託者/東京大学), 工藤雄之(文部科学省)
- ◎サブ課題E: 高信頼性構造材料 (座長: 香山正憲/産業技術総合研究所)
- 13:10-13:30 大規模第一原理計算の実行(高信頼性構造材料)  
香山正憲(産業技術総合研究所) . . . . . E-1
- 13:30-13:50 粗視化手法への連結法の確立  
大野かおる(横浜国立大学) . . . . . E-2
- 13:50-14:10 凝固粒成長における材料組織の大規模シミュレーション  
澁田靖(東京大学) . . . . . E-3
- 14:10-14:25 \* \* \* \* \* Coffee Break \* \* \* \* \*
- 14:25-14:55 【招待講演I】 原子分解能STEM法による粒界構造解析  
幾原雄一(東京大学) . . . . . E-4
- ◎サブ課題G: 共通基盤シミュレーション手法 (座長: 尾崎泰助/東京大学)
- 14:55-15:15 基盤的第一原理電子状態計算ソフトウェアの開発・整備  
尾崎泰助(東京大学) . . . . . G-1
- 15:15-15:35 Approximate Solutions to the Cluster Variation Free Energies  
by the Variable Basis Cluster Expansion  
毛利哲夫(東北大学) . . . . . G-2
- 15:35-15:55 基盤的超並列計算アルゴリズムの開発  
星健夫(鳥取大学) . . . . . G-3
- 15:55-16:15 大型実験施設との連携  
遠山貴巳(東京理科大学) . . . . . G-4
- 16:15-16:25 諮問委員からのコメント 幾原雄一(東京大学)
- 16:25-17:50 ポスターセッション
- 18:00-20:00 懇親会

■講演時間と質疑応答時間

- 30分講演の場合の発表 25分 質疑応答 5分、  
20分講演の場合の発表 15分 質疑応答 5分

7月22日(金)

9:00 受付開始

◎サブ課題A：高機能半導体デバイス 座長：押山淳（東京大学）

9:30-9:50 ポスト「京」に向けた RSDFT 開発の現状と最近の応用  
岩田潤一（東京大学） . . . . . A-1

9:50-10:10 RS-CPMD による SiC 熱酸化中の炭素消失メカニズムの解明  
松下雄一郎（東京大学） . . . . . A-2

10:10-10:30 新材料からの量子論デバイス創製シミュレータ開発  
森伸也（大阪大学） . . . . . A-3

10:30-10:45 \* \* \* \* \* Coffee Break \* \* \* \* \*

◎サブ課題B：光・電子融合デバイス 座長：矢花一浩（筑波大学）

10:45-11:05 ナノ構造体近接場光励起ダイナミクス  
飯田健二（分子科学研究所） . . . . . B-1

11:05-11:25 ナノ界面高強度パルス光励起ダイナミクス  
矢花一浩（筑波大学） . . . . . B-2

◎サブ課題C：超伝導・新機能デバイス材料 座長：今田正俊（東京大学）

11:25-11:45 高温超伝導体薄膜・界面の理論設計と超伝導転移温度上昇指針の探究  
今田正俊（東京大学） . . . . . C-1

11:45-12:05 遷移金属酸化物を含む物質群でのトポロジカル相実現と純粋スピンキャリア創出  
山地洋平（東京大学） . . . . . C-2

12:05-13:25 \* \* \* \* \* Lunch Time \* \* \* \* \*

13:25-13:55 【招待講演Ⅱ】 情報統合型物質・材料研究の意義  
寺倉清之（物質・材料研究機構） . . . . . C-3

◎サブ課題D：高性能永久磁石・磁性材料 座長：三宅隆（産業技術総合研究所）

13:55-14:15 新規磁石化合物の探索:NdFe<sub>11</sub>MN の安定性と磁性に対する第一原理計算  
原嶋庸介（産業技術総合研究所） . . . . . D -1

14:15-14:35 第一原理に基づく有限温度における結晶磁気異方性の計算  
土居抄太郎（東京大学） . . . . . D-2

14:35-14:55 微量元素添加型 Nd-Fe-B 磁石の電子状態計算による考察  
立津慶幸（東京大学） . . . . . D-3

14:55-15:10 \* \* \* \* \* Coffee Break \* \* \* \* \*

