

次世代第一原理計算手法の開発・応用

日 程： 平成22年11月10日（水）～11月11日（木）
会 場： 東北大学 電気通信研究所 2号館2階 W214号室
(〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1)

プ ロ グ ラ ム

11月10日（水）

13:50-14:00 開 会

セッション（1）電子相関

14:00-14:30 三宅 隆 （産業技術総合研究所／科学技術振興機構）
「最局在ワニエ関数を用いた電子構造の解析」

14:30-15:00 草部 浩一 （大阪大学 基礎工学研究科）
「物質設計法としての多配置参照型密度汎関数理論：
超伝導と量子デバイス」

15:00-15:30 樋口 克彦 （広島大学 先端物質科学研究科）
「対密度汎関数理論」

（休 憩 30分）

16:00-16:30 前園 涼 （北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科）
「多成分量子モンテカルロ法を用いた電子正孔系の研究」

16:30-17:00 豊田 雅之 （北陸先端科学技術大学院大学 先端融合領域研究院）
「交換ホール関数の汎関数」

17:00-17:30 濱田 幾太郎 （東北大学 原子分子材料科学高等研究機構）
「ファン・デル・ワールズ密度汎関数の応用と改善」

17:30-18:00 Hannes Raebiger （横浜国立大学 工学研究院）
「Theory of transition metal impurities in semiconductors and
insulators: from defect complexes to magnetic interactions」

(次ページにつづく)

11月11日(木)

セッション(2) エキゾチック物質設計

- 9:00-9:30 西松 毅 (東北大学 金属材料研究所)
「強誘電体薄膜キャパシタのインプリント現象の
分子動力学シミュレーション」
- 9:30-10:00 福島 鉄也 (大阪大学 基礎工学研究科)
「マルチフェロイック物質の最近の展望」
- 10:00-10:30 阿部 和多加 (東北大学 電気通信研究所)
「高圧におけるホウ化水素」

(休憩 30分)

セッション(3) 量子伝導現象

- 11:00-11:30 小野 倫也 (大阪大学 工学研究科)
「ナノグラフェンの量子輸送特性計算」
- 11:30-12:00 三浦 良雄 (東北大学 電気通信研究所)
「ノンコリニアスピン系における電気伝導の第一原理計算」
- 12:00-12:30 中西 寛 (大阪大学 工学研究科)
「プロトン・ミュウオンのための次世代第一原理計算手法」

(昼食 90分)

セッション(4) 結晶成長・電極反応ダイナミクス

- 14:00-14:30 森川 良忠 (大阪大学 工学研究科)
「インテリジェント触媒の自己再生機構に関する
第一原理シミュレーション」
- 14:30-15:00 木崎 栄年 (大阪大学 基礎工学研究科)
「ペロブスカイト酸化物表面における NO 分子吸着反応計算」
- 15:00-15:30 真砂 啓 (東北大学 原子分子材料科学高等研究機構)
「ケルビンプローブフォース顕微鏡のシミュレーション方法と
その応用」
- 15:30-16:00 柳澤 将 (大阪大学 工学研究科)
「有機/金属界面における電気二重層と界面相互作用に関する
理論的研究」
- 16:00-16:05 閉会

【アクセスマップ】



【建物配置図】



代表者： 佐藤 和則 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)
 連絡先： 白井 正文 (東北大学 電気通信研究所)
 電話 (022) 217-5074