

# ナノテクイニシヤティブ研究会

## 「マテリアルズ・インフォマティクス・ネットワーク」

主催

大阪大学 産業科学研究所 産業科学ナノテクノロジーセンター

共催

大阪大学 データビリティフロンティア機構

物質・材料研究機構 情報統合型物質・材料研究拠点

2017年1月9日 13時– 10日 15時

有馬温泉 メープル有馬(<http://www.the-maple.jp/arima/>)

### プログラム (案)

1月9日 (月)

13:00 – 13:05 開会 小口多美夫

セッション1 座長：三浦良雄

13:05 – 13:35 赤井久純 (東大物性研)

希土類磁石材料の探索

13:35 – 14:05 中村浩次 (三重大工)

磁性金属多層薄膜における磁氣的性質と原子層配列の相関分析

14:05 – 14:35 大谷博司 (東北大多元研)

理論合金状態図の作成への試み

14:35 – 14:55 休憩

セッション2 座長：藤井将

14:55 – 15:25 石河孝洋 (阪大極限)

計算科学とデータ科学の融合による高温超伝導水素化物の探索

15:25 – 15:55 山下智樹 (物材機構)

結晶構造探索手法の開発

15:55 – 16:25 福島鉄也 (阪大ナノ)

遮蔽 KKR グリーン関数法を用いたスピントロニクス材料のデザイン

16:25 – 16:45 休憩

**セッション3**      **座長：中村浩次**  
16:45 – 17:15      常行真司（東大理）  
粉末回折データを援用した物質構造探索  
17:15 – 17:45      北岡良雄（阪大基礎工）  
大阪大学データビリティフロンティア機構の現状とこれから  
17:45 – 18:15      寺倉清之（物材機構）  
情報統合型物質・材料研究：解析型研究から開拓型研究へ  
  
18:15 – 18:30      休憩  
18:30 – 20:00      夕食

**セッション4**      **座長：山内邦彦**  
20:00 – 20:30      島川祐一（京大化研）  
遷移金属酸化物における電荷、スピン、構造相転移：  
最近の実験と理論計算への期待  
20:30 – 21:00      森川良忠（阪大工）  
第一原理シミュレーションによる界面反応過程の研究  
21:00 – 21:30      吉田博（阪大基礎工）  
超室温超伝導体探索のための負の有効交換相関エネルギー系の  
一般的デザイン則と計算機マテリアルデザイン

1月10日（火）

**セッション5**      **座長：梶田浩義**  
09:00 – 09:30      嶋田隆広（京都大）  
強誘電体内余剰電子の力学制御による原子スケールマルチフェロイクス  
09:30 – 10:00      鈴木通人（理研）  
クラスター多極子理論による反強磁性体の巨大非対角応答の物質設計  
10:00 – 10:30      山内邦彦（阪大産研）  
遷移金属酸化物の電子状態計算  
  
10:30 – 11:00      休憩

**セッション6**      **座長：山下智樹**  
11:00 – 11:30      福島孝治（東大）  
交差検証法による圧縮センシングの成功判定

- 11:30 – 12:00 梶田浩義（阪大産研）  
第一原理計算による圧電素子材料デザイン
- 12:00 – 12:30 藤井将（物材機構）  
磁気物性値の第一原理計算と機械学習
- 12:30 – 13:30 昼食
- セッション7 座長：福島鉄也**
- 13:30 – 14:00 石井史之（金沢大理工）  
異常ネルンスト効果の第一原理計算
- 14:00 – 14:30 三浦良雄（京都工繊大）  
ホイスラー合金を用いた磁気接合のスピン依存伝導
- 14:30 – 15:00 小口多美夫（阪大産研）  
ホイスラー合金におけるスピングャップレス物質の探索
- 15:00 閉会 福島鉄也