



第14回 ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所 材料計算セミナー

ナノ構造研究所の活動の一環として、以下のようなセミナーを開催いたします。最新の第一原理計算とその応用の一端を知っていただければ幸いです。今回は世界中で最も広く使われている第一原理計算コードの一つである VASP -MedeA-の開発グループから Erich Wimmer 博士をお招きして最新の第一原理計算を応用した材料特性予測に関する講演を開催いたします。また、当日は VASP code を中心とした第一原理計算などについてのディスカッションタイムを設けております。

場所 (一財) ファインセラミックスセンター

名古屋市熱田区六野 2 丁目 4 番 1 号

JR東海道本線・熱田駅下車・北東へ徒歩 5 分

所在地の詳細は、http://www.jfcc.or.jp/22_about/index.html をご覧ください

2014年12月2日(火) (定員20名) 参加費無料

お申し込みは先着順とさせていただきますので、お早めどうぞ。

申し込みは電子メールで 担当 小西:Email a_konishi@jfcc.or.jp

13:30 受付開始

14:00 開会挨拶 ナノ構造研究所 計算材料 G グループ長 森分博紀

14:10 最新の第一原理計算とその応用 I

Materials Design 社長 Erich Wimmer 博士

"The cluster expansion method UNCLE in MedeA"

15:10 休憩

15:40 最新の第一原理計算とその応用 II

Materials Design 社長 Erich Wimmer 博士

"From Buckingham-type potentials to reactive many-body potentials: assessment and applications"

16:40 ディスカッションタイム

17:00 終了予定