

第33回講演会

—計算科学によるリチウムイオン電池材料の開発；第一原理バンド計算からの提言—

主催 日本化学会 電気化学ディビジョン 化学電池材料研究会
協賛 日本化学会、電気化学会、日本セラミックス協会

会期 平成25年12月18日（水）

会場 東京理科大学 森戸記念館 第1フォーラム（〒162-8601 東京都新宿区神楽坂1-3）
〔交通〕JR 総武線、地下鉄有楽町線、東西線、南北線飯田橋駅下車 徒歩7分

プログラム：

13：30～14：30

① 「第一原理 XANES 計算で明らかにする正極材料中の局所構造」（名古屋工業大学）田村友幸 先生

14：30～15：30

② 「ナノ構造解析と第一原理計算の連携による Li イオン電池材料研究」（ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所）森分博紀 先生

15：30～15：50 <休憩>

15：50～16：50

③ 「京コンピュータ上での第一原理分子動力学計算を用いたリチウムイオン二次電池の電解液化学反応と SEI 形成過程の微視的解析」（物質材料研究機構、科学技術振興機構、京都大学触媒・電池元素戦略ユニット）館山佳尚 先生

参加申込締切：12月11日（水）ただし会場満席になり次第、締め切ります

参加費：会員（協賛学会会員を含む）2,000円、非会員5,000円、学生無料

参加申込方法 講演会場座席数の関係上、事前登録が必要です。参加者氏名、所属、連絡先を明記し、Eメールにて下記までお申し込みください。

問い合わせ先：〒305-0044 茨城県つくば市並木1-1

（独）物質・材料研究機構 ナノ材料科学環境拠点 界面制御電池材料創製グループ内
化学電池材料研究会事務局

電話/(029) 851-3354 内線 4167、FAX (029) 860-4984、

E-mail: denchi@inorg777.apchem.ues.tmu.ac.jp