



文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム
「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革命に向けた計算・データ材料科学研究」
理論計算研究フォーラム(第5回)

日時: 2021年9月29日(水) 13:00 ~ 17:30

場所: Webミーティング

プログラム ※1

「富岳」電池課題 理論計算研究フォーラム(第5回)

13:00 - 13:10	東大物性研	杉野 修	第5回理論計算研究フォーラム開催趣旨
13:10 - 13:55	物材機構 NIMSポスドク研究員	Bo Gao	Structure Predictions for Solid-Solid Interface: Methods and Applications to All-Solid-State Batteries
13:55 - 14:35		出席者	討論
14:35 - 14:55	休憩		
14:55 - 15:15	東大物性研 特任研究員	Elvis Arguelles	Active Learning Replica-exchange Monte Carlo Simulations of Zirconium oxynitrides
15:15 - 15:35	東大物性研 特任研究員	Muhammady Shibghatullah	First-principle calculations of oxygen bonding characteristics and oxygen reduction reaction on zirconia and zirconium oxynitrides surfaces
15:40 - 16:20		出席者	討論
16:20 - 16:40	休憩		
16:40 - 17:10		出席者	総合討論
17:10 - 17:30	東大物性研	杉野 修	まとめと次回開催テーマについて

講演は、全て英語での発表となります。

※1 プログラムは、予告なく変更される可能性があります。予めご了承の程よろしくお願い致します。