

化学委員会材料化学分科会

(第 23 期・第 3 回)

議 事 次 第

1 日 時 平成 27 年 12 月 25 日 (金) 15 : 00 ~ 18 : 00

2 会 場 日本学術会議5階 5-C(1)会議室
(※東京メトロ千代田線「乃木坂駅」5番出口 徒歩1分)

3 議 題 等

1. 前回議事録(案)の確認
2. 材料化学研究会 ” 複合材料における複雑・階層構造形成の Dynamics ” の開催
 - ・リチウムイオン電池の正極材料の Li イオン挿入脱離に伴う構造変化の放射光 X 線による operando 観察 (小久見善八)
 - ・第一原理計算と原子分解能構造解析との連携による Li イオン電池材料研究 (森分博紀)
 - ・数学と材料科学の融合 - 無秩序構造の表現と新材料創製 - (小谷元子・阿尻雅文)
3. その他

4 配 布 資 料

資料 1 第 23 期日本学術会議第 3 部化学委員会材料化学分科会_第 2 回分科会議事録(案)

資料 2 First-Principles Calculations of Lithium-Ion Migration at a Coherent Grain Boundary in a Cathode Material LiCoO₂

資料 3 原子分解能電子顕微鏡と第一原理計算の連携

資料 4 Domain boundaries and their influence on Li migration in solid-state

資料 5 セラ協解説原子レベル微構造観察と第一原理計算による LLTO

説明資料 1 数学と材料 (小谷先生)

参考資料 1 First-Principles Calculations of Lithium-Ion Migration at a
Coherent Grain Boundary in a Cathode Material LiCoO₂ (森分先生)

参考資料 2 原子分解能電子顕微鏡と第一原理計算の連携

参考資料 3 Domain boundaries and their influence on Li migration
in solid-state

参考資料 4 セラ協解説原子レベル微構造観察と第一原理計算による LLTO