



大阪大学 大学院工学研究科 テクノアリーナ 「インキュベーション部門:連携融合型」
令和7年度 第一回 「先読みシミュレーション」グループ フォーラム

「表面と分子 —ナノ分光と理論解析の協奏— 」

2025年4月4日(金) 大阪大学吹田キャンパス 工学研究科 M1-214 講義室
※ どなたでもご参加できます。また参加登録の必要はありません。
直接、会場にお越し下さい。この会議は英語で行われます。

プログラム

4月4日(金)

15:00 – 15:45

依頼講演「よく規定されたモデル触媒における表面反応の微視的解明」

吉信 淳 (東京大学物性研究所・教授)

15:45 – 16:30

依頼講演「化学から見た分子スピンの量子ビット応用」

米田忠弘 (東北大学多元物質科学研究所・教授)

16:30 – 16:50

「材料科学における実験と理論の橋渡し—機械学習力場を用いたマルチ
スケールシミュレーション—」

Halim Harry Handoko (大阪大学大学院工学研究科・助教)

16:50 – 17:10

「分子動力学シミュレーションによるチアヘテロヘリセン誘導体のキラル
認識メカニズム評価」

Changing Ye (大阪大学大学院工学研究科・D3)

17:10 – 17:30

総合討論



Center for Future Innovation (CFi), Grad. Sch. Engineering, the University of Osaka
“Computational Prediction and Design” Group First Forum in 2025

"Surfaces and Molecules – A Symphony of Nano-Spectroscopy and Theoretical Analysis -"

April 4, 2025 (Friday)

The University of Osaka, Suita Campus, Grad. Sch. Engineering, Lecture Room M1-214
(The official language of this meeting is English.)

Program

15:00 – 15:45

Invited Lecture:

“Microscopic Elucidation of Surface Reactions on the Well-defined Model Catalysts”

Prof. Jun Yoshinobu (Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo)

15:45 – 16:30

Invited Lecture:

“Chemist's View of Molecular Spin as Qubit of Quantum Information Process”

Prof. Tadahiro Koneda (Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University)

16:30 – 16:50

"Bridging Experiment and Theory in Materials Science through Multi-Scale Simulations with Machine Learning Force Fields"

Asst. Prof. Halim Harry Handoko (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)

16:50 – 17:10

"Chiral Recognition Mechanism of Thiaheterohelicene Derivatives Studied by Molecular Dynamics Simulation"

Changing Ye (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)

17:10 – 17:30

General Discussion