



## 【プログラム】

4月3日(月)

- 13:00-13:10 Opening
- 13:10-13:35 笠松秀輔 (東京大学) 縞状ドメイン構造を有する強誘電体薄膜キャパシタにおける「負のキャパシタンス」発現の第一原理シミュレーション
- 13:35-14:00 柚木清司 (理化学研究所) 幾何学的フラストレーションがない正方格子スピン 1/2 反強磁性ハイゼンベルグ模型の励起スペクトル: マグノン vs. スピノン
- 14:00-14:25 濱本雄治 (大阪大学) van der Waals 密度汎関数法による有機-固体界面の鏡像状態の研究
- 14:25-14:50 横田泰之 (理化学研究所) 古典 MD 計算と原子間力顕微鏡によるイオン液体/固体界面の構造評価
- 14:50-15:05 break
- 15:05-15:55 大関真之 (東北大学) 【特別講演】 今日から始めるスパースモデリング-計測革命と計算革命-
- 15:55-16:05 吉見一慶 (東京大学) 東京大学物性研究所2016年度ソフトウェア開発・高度化プロジェクトについて
- 16:05-16:30 三澤貴宏 (東京大学) 多変数変分モンテカルロ法のオープンソフトウェア mVMC の開発
- 16:30-18:00 Poster Session
- 18:30-20:30 懇親会

4月4日(火)

- 10:00-10:50 横山大作 (東京大学) 【特別講演】 大規模ゲーム木探索における並列・分散計算の適用
- 10:50-11:05 break
- 11:05-11:30 石塚良介 (大阪大学) MD/DFT 自己無撞着法を用いたイオン液体の有効電荷解析
- 11:30-11:55 優乙石 (理化学研究所) 全原子細胞質モデルと大規模分子動力学計算による細胞内生体分子ダイナミクスの理論的解明
- 11:55-12:20 原田隆平 (筑波大学) 生物学的レアイベントを再現/予測する効率的構造サンプリング手法の開発
- 12:20-13:30 lunch
- 13:30-13:55 吉田恒也 (京都大学) 強相関トポロジカル絶縁体・超伝導体の研究
- 13:55-14:20 古賀昌久 (東京工業大学)  $SU(N)$ ハバード模型における秩序相の解析
- 14:20-14:45 山門英雄 (和歌山大学) 超球面探索法の結晶構造予測への応用
- 14:45-15:10 森田悟史 (東京大学) テンソルネットワーク法の並列計算ライブラリの開発
- 15:10-15:25 break
- 15:25-15:50 村島隆浩 (東北大学) 複雑流体のための大規模マルチスケールシミュレーションの開発
- 15:50-16:15 徳田直子 (名古屋大学) 3次元ゲノム動力学シミュレーションによる転写活性分布解析
- 16:15-16:40 樋口祐次 (東北大学) 大規模粗視化分子動力学法を用いたポリエチレンにおけるラメラ構造の変形・破壊シミュレーション
- 16:40-16:45 Closing



## 【ポスター発表リスト】

- P-1 “磁化率の計算によるスピングャップ解析” 坂井徹(兵庫県立大学)
- P-2 “金属ナノクラスターの長寿命化を実現するグラフェン担体材料の開発” 長谷川瞬(北海道大学)
- P-3 “相境界決定のための高効率 2-相シミュレーションの提案” 瀧崎員弘(愛媛大学)
- P-4 “高分子材料の破壊と補強に関する粗視化 MD シミュレーション” 萩田克美(防衛大学校)
- P-5 “Pascal と Knights Landing の性能比較” 中川恒 (ISSP)
- P-6 “高強度フェムト秒レーザー照射二層ベンゼンの剥離ダイナミクスの第一原理計算” 内田一樹(東京理科大学)
- P-7 “解析接続の中間表現による虚時間データの圧縮” 品岡寛(埼玉大学)
- P-8 “テンソルネットワーク法における General Entanglement Branching” 原田健自(京都大学)
- P-9 “分子動力学法を用いた希薄高分子溶液の流れ解析” 浅野優太 (ISSP)
- P-10 “GUI 支援ツール C-Tools による第一原理シミュレーションのユーザビリティ向上について” 吉澤香奈子(高度情報科学技術研究機構)
- P-11 “Bi 酸化物ならびに貴金属のヘテロ構造におけるラシュバ効果の第一原理計算” 山口直也(金沢大学)
- P-12 “ドーナツ状ナノ Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 薄膜の磁化特性・ドメイン構造の計算” 小畑修二(東京電機大学)
- P-13 “スパースモデリングによる量子モンテカルロデータの解析接続” 大槻純也(東北大学)
- P-14 “ラシュバ・ドレッセルハウス型スピン軌道相互作用が誘起する六重 Q 磁気秩序” 岡田健(東京大学)
- P-15 “スピントロニクス材料および分子性磁性体の原子構造、磁気状態、電子状態の解析” 小田竜樹(金沢大学)
- P-16 “4 体相関を埋め込んだ AGP 波動関数理論” 川崎愛理 (ISSP)
- P-17 “相関電子系への強電場照射による超伝導秩序の増大とその動的安定性” 井戸康太(東京大学)
- P-18 “Selective segregation at grain-boundary structural units in MgO スピン系の厳密対角化パッケージの並列化と高精度化” 井上和俊(東北大学)
- P-19 “ジルコニア表面における欠陥誘起の酸素還元反応活性” 山本良幸 (ISSP)
- P-20 “半導体中ミュオニウムの電子構造計算” 見波将(金沢大学)
- P-21 “Weak phonon-mediated pairing in BiS<sub>2</sub> superconductor from first-principles” 明石遼介(東京大学)
- P-22 “量子格子模型プログラムパッケージ HΦ と数値ライブラリ Kω の応用：スピン液体近傍における熱励起とスピン励起” 山地洋平(東京大学)
- P-23 “長距離相互作用に近似を用いたモンテカルロ法” 五十嵐亮(東京大学)
- P-24 “ナノグラフェンからの二次電子放出の量子動力学機構” 上田純裕(東京理科大学)
- P-25 “希土類永久磁石における化合物磁性：第一原理計算と有限温度モデル計算” 松本宗久 (ISSP)
- P-26 “フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導” 大西弘明(日本原子力研究開発機構)
- P-27 “テンソルネットワーク法によるカゴメ格子量子スピンモデルの磁化過程計算” 大久保毅 (ISSP)
- P-28 “実空間密度汎関数法にもとづく Car-Parrinello 分子動力学法の GPGPU 実装” 重田育照(筑波大学)
- P-29 “[n]CPP 分子の光学特性” 野口良史 (ISSP)
- P-30 “CO<sub>2</sub> Dynamics from Formate Decomposition on Cu(111)” 森川良忠(大阪大学)