

「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」 報告

物性研だより第 64 巻第 2 号 36

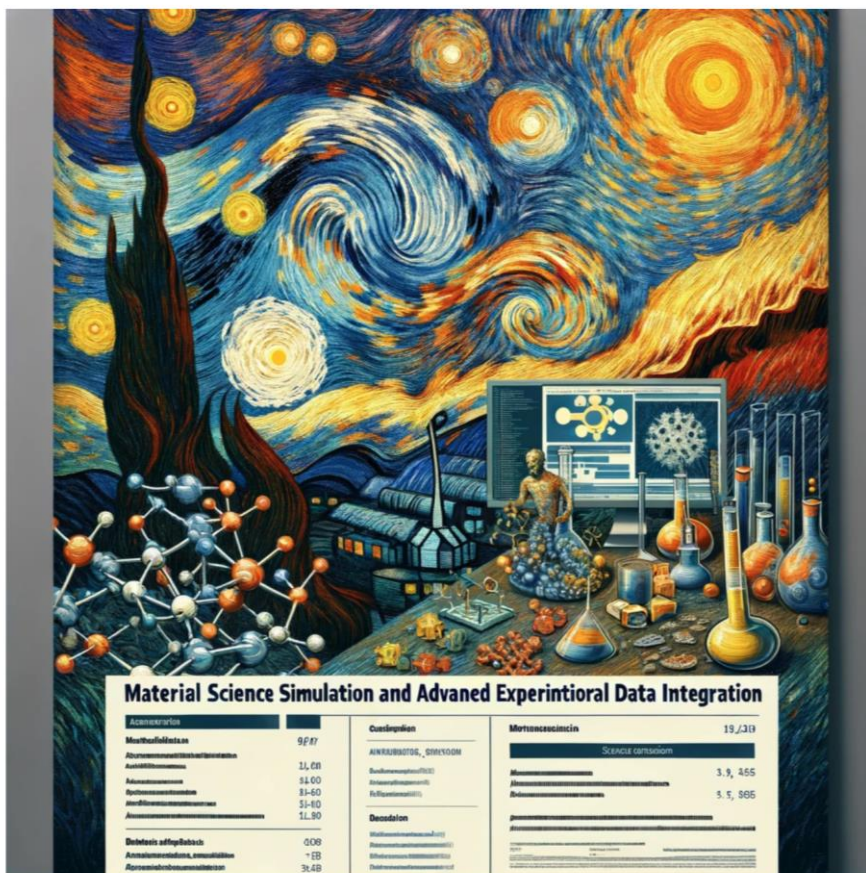
- | | |
|-------------|---|
| 13:30-14:00 | 是常隆（東北大学）
ワニエ有効模型のデータベースと物質設計 |
| 14:00-14:30 | 星健夫（核融合科学研究所/高エネ研/東京大学）
計測データ解析フレームワーク 2DMAT：富岳を用いた 2 次元物質構造解析 |
| 14:30-15:00 | 深谷有喜（原子力研究開発機構）
陽電子回折・光電子分光・データ科学によるシリセンの構造探査 |
| 15:30-16:00 | 虻川匡司（東北大学）
RHEED 測定における高精度データピックアップとフーリエ変換による解析 |
| 16:00-18:00 | ポスター講演（対面のみ） |
| 19:00-21:00 | 懇親会 |

- | | |
|-------------|---|
| 9:50-10:20 | 榊原寛史（鳥取大）
多層系ニッケル酸化物超伝導体の理論計算に基づく物性予測 |
| 10:20-10:50 | 福田将大（東京大学）
AB2 型 2 次元材料の構造探索およびデータベース化とその応用 |
| 10:50-11:00 | coffee break |
| 11:00-11:30 | 柚原淳司（名古屋大学）
14 族元素からなるポストグラフェン物質の創出に向けて |
| 11:30-12:00 | 中川剛志（九州大学）
二次元ホウ素薄膜の作製と構造解析：ホウ化物との共存、分離 |
| 12:00-13:30 | lunch |
| 13:30-14:00 | Shu-Jung Tang (National Tsinghua University)
Enhanced Superconductivity and Rashba Effect in a Buckled Plumbene-Au Kagome Superstructure |
| 14:00-14:30 | 吉澤俊介(NIMS)シリコン表面インジウム原子層における準粒子干渉の観測とシミュレーション |
| 14:30-14:40 | おわりに |

- P01 物性研究所ソフトウェア開発・高度化プロジェクト:大型計算機を活用した物質設計と評価
東大物性研 青山龍美、本山裕一、吉見一慶、川島直輝
- P02 大規模電子状態計算と波束ダイナミクス法による有機薄膜太陽電池の電荷分離シミュレーション
量研機構 藤田貴敏
- P03 計測データ解析フレームワーク 2DMAT による PTRF-XAFS 解析
核融合研¹、東大物性研²、鳥取大³、北大触媒研⁴
星健夫^{1,2}、沢頭孟³、高草木達⁴
- P04 物質科学シミュレーションのポータルサイト MateriApps の紹介
東大物性研¹、山形大²、東大理³、RIST⁴
井戸康太¹、笠松秀輔²、加藤岳生¹、川島直輝¹、藤堂眞治³、福田将大¹、吉澤香奈⁴
- P05 非平衡分子動力学法による欠陥が導入されたタングステン格子熱伝導率の温度依存性への影響のシミュレーション
総研大¹、核融合研²、東大物性研³
金森大悟¹、向井啓祐^{1,2}、星健夫^{1,2,3}、長坂琢也^{1,2}



- P06 強相関第一原理計算手法の擬一元分子性固体への網羅的適用
東大物性研¹、熊大院先導機構²、理研³、理研 CEMS⁴
吉見一慶¹、三澤貴宏¹、圓谷貴夫²、妹尾仁嗣^{3,4}
- P07 文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)データ連携部会中核機関の活動について
物質・材料研究機構(NIMS)¹、東京大学物性研²
石一智¹、吉川英樹¹、源聡¹、木野日織¹、出村雅彦¹、三澤貴宏²、古宇田光²、吉見一慶²、尾崎泰助²
- P08 多軌道系のスパースモデリング解析接続
東大物性研¹、埼玉大理²、岡山大基礎研³
本山裕一¹、品岡寛²、大槻純也³、吉見一慶¹
- P09 Influence of nitrogen doping and oxygen vacancy on the oxygen reduction on tetragonal ZrO₂(101) surface from exhaustive first-principles sampling
東大物性研¹、山形大学理学部²
Shibghatullah Muhammady¹、春山潤¹、笠松秀輔²、杉野修¹
- P10 核融合炉の過酷な中性子照射環境と協奏し長寿命となり得る材料の探索
核融合研¹、九大応力研² 長坂琢也¹、渡邊英雄²
- P11 計測データ解析フレームワーク 2DMAT の低速陽電子回折実験への応用
核融合研¹、KEK 物構研²、東大物性研³
中野陽斗¹、Rezwan Ahmed²、望月出海²、和田健²、星健夫^{1,2,3}
- P12 機械学習ポテンシャルを用いた W 中の原子空孔-水素複合体の構造とダイナミクスの研究
九大院総理工^{1,2}核融合科学研究所 野口湧喜¹、加藤太治^{2,1}
- P13 第一原理強磁性 Wannier 模型の対称性を考慮した構築と結晶磁気異方性への応用
東北大理 齋藤寛人、是常隆
- P14 軟 X 線 XAFS タイコグラフィによる細胞内化学状態分布の可視化
東大物性研¹、JASRI²、東大先端研³、理研⁴
櫻井快^{1,2}、竹尾陽子¹、吉永享太¹、Jordan T. O'Neal¹、島村勇徳^{1,2}、中田勇宇¹、江川悟³、寶本峻輝¹、井上圭一¹、志村まり⁴、木村隆志¹
- P15 蛍光 X 線と透過 X 線を用いた、試料形態再構成と信号補正を行うアルゴリズムの開発
東大物性研¹、高輝度光科学研究センター²、理研³、東大院工⁴、東大先端研⁵
島村勇徳^{1,2,3}、森谷文香⁴、志村まり³、竹尾陽子¹、木村隆志¹、三村秀和⁵
- P16 計測データ解析フレームワーク 2DMAT による多成分プラズマ解析
核融合研¹、Princeton Plasma Physics Laboratory²、東大物性研³
寺地雄真¹、境健太郎¹、Lan Gao²、Hantao Ji²、星健夫^{1,3}
- P17 深層学習を活用したコヒーレント回折パターンノイズ除去
東大物性研¹、JASRI²、理研³、
石川 卓門¹、竹尾 陽子^{1,2}、櫻井 快¹、吉永 享太¹、古谷 登¹、木村 隆志¹、吉見 一慶¹
- P18 大規模共用実験施設におけるクラウドデータ収集システム
東大情報基盤センター¹、東大院工²、東大院情報理工³
華井 雅俊¹、河村 光晶¹、石川 亮²、鈴木 豊太郎^{1,3}、田浦 健次朗^{1,3}

ISSP短期研究会
「物質科学シミュレーションと先端実験のデータ連携」
アブストラクト集

generated by chatGPT

物性研大講義室 (6 階)/Zoom
2024.Feb.19-20

図1 アブストラクト集の表紙



