

物性研究所スパコン共同利用研究会「計算物質科学
の今と未来」

物性研だより第 66 巻第 2 号 36

4月3日(金)

10:00~10:50	尾崎克久(芝浦工業大学) [特別講演]	低精度計算時代における高精度行列計算 — 尾崎スキームとその展開
10:50~11:05	break	
11:05~11:30	福田将大(物性研)[巻頭論文]	DFTを用いた表面構造解析と原子間力顕微鏡シミュレーション
11:30~11:55	植本光治(神戸大学)	第一原理計算の非線形光学と半導体フォトニクスシミュレーションへの応用
11:55~12:20	小幡正雄(金沢大学)	GPU実装による準粒子自己無撞着GW計算の高速化とInAs/GaSb超格子への応用
12:20~13:30	Lunch	
13:30~13:55	中野晃佑(NIMS)[高度化]	第一原理量子モンテカルロ法のソフトウェア開発の応用展開の未来
13:55~14:20	藤崎弘土(日本医科大学)	重み付きアンサンブル法によるタンパク質構造変化の動的な計算
14:20~14:45	矢ヶ崎琢磨(大阪大学)	高分子ブラシ膜の防汚機構
14:45~15:10	秋葉貴輝(東京大学)	マクロな移流反応拡散系の解析に向けた量子コンピュータの利用
15:10~15:25	break	
15:25~15:50	尾方成信(大阪大学)[共用事業枠]	機械学習ポテンシャルを用いた極限環境下の構造材料の原子シミュレーション
15:50~16:15	藤本和士(関西大学)[共用事業枠]	燃料電池触媒層の物質輸送機構解明に向けた、マルチスケール計算技術構築とその活用
16:15~16:40	三澤貴宏(物性研)[共用事業枠]	厳密対角化ソフトウェア $H\Phi$ を活用したスピンハミルトニアンへのベイズ推定
16:40~16:45	Closing(ポスター賞授賞式)	

ポスター発表

A: ポスター賞選考対象

A-01 MUHAMMADY SHIBGHATULLAH(理化学研究所)

密度汎関数計算による Barium Titanium Oxyhydride の熱力学的安定性とイオン交換の速度論的な解析

A-02 中西 樹(金沢大学)

第一原理計算を用いた Fe/MgO 界面のマグノンモード解析と磁気励起スペクトル

A-03 佐藤 孝太(慶應義塾大学大学院)

不完全情報ゲームを題材とした AI の開発と解析

A-04 李 旭(名古屋大学)

Pt(111)表面上の Ce-Ti-O ハニカム構造超薄膜の構造について実験観察と理論計算

A-05 小林 知暉(東京理科大学)

連結クラスター展開法におけるクラスター次数推定法の考案

A-06 寺澤 雄介(電気通信大学大学院)

臨界指数の系統的な外挿法を用いた相関長による動的臨界指数の評価

A-07 岩崎 龍太(東北大学)

圧力誘起磁気転移を示す有機モット絶縁体 λ -(BEST)2GaCl4 の有効理論構築

A-08 田中 友規(東京科学大学)

Magesty.jl: スピנקラスター展開法に基づく一般化スピンモデル計算パッケージ

B: 一般ポスター

- B-01 小野 頌太 (室蘭工業大学)
非 van der Waals 型 2 次元物質の予測手法の開発と応用

B-02 BAE SOUNGMIN (東北大学)
汎用機械学習ポテンシャルを用いた統合的原子シミュレーション環境「macer」の開発と材料物性解析への応用

B-03 佐藤 龍平 (東京大学)
固体電解質の多体輸送(協奏的な輸送)のグラフ理論による可視化

B-04 坂井 徹 (兵庫県立大学)
低次元量子スピン系の磁場誘起量子相転移の数値的研究

B-05 浅野 優太 (医療創生大学)
1000 億原子分子動力学シミュレーションによる超音波キャビテーション初期過程

B-06 春山 潤 (理化学研究所)
次世代 Li イオン電池用電解液の DFT 汎関数の精度検証と機械学習力場の作成

B-07 村林 史啓 (東京大学)
準粒子トンネリングを伴う分数量子ホール液滴のマイクロ波応答

B-08 森田 悟史 (慶應義塾大学)
テンソルくりこみ群による分配関数比の計算と臨界点上での普遍性

B-09 本山 裕一 (東京大学)
ベイズ最適化パッケージ PHYSBO

B-10 Thomsen Bo (Japan Atomic Energy Agency)
Development of GPU Accelerated Path Integral Molecular Dynamics Code

B-11 久保 祐貴 (東京大学大学院)
データ同化法による HCl-H₂ 化合物高圧相の結晶構造推定

B-12 陸 劭聡 (東京大学大学院理学系研究科)
Spin-Fluctuations in Hydride Superconductors from First Principles

B-13 山地 洋平 (物質・材料研究機構)
数値分光法による銅酸化物高温超伝導体の解析

B-14 船田 宙軌 (近畿大学)
フラーレンが吸着したタングステン表面の電子状態計算

B-15 青山 龍美 (東京大学)
第一原理量子モンテカルロ法パッケージ TurboRVB の高度化

B-16 中島 将吾 (近畿大学)
 π 拡張ジケトピロロピロール誘導体 BIPI の電子状態計算

B-17 笠松 秀輔 (山形大学)
Local perturbation + relaxation 法による遷移金属複合酸化物の charge/spin 配置最適化

B-18 乾 幸地 (東京大学)
自動微分を取り込んだ DFT 計算による物質の逆設計

B-19 山口 直也 (金沢大学)
Wannier 基底に基づく層異常 Hall/Nernst 伝導度計算コード開発と金属系への応用

B-20 河村 光晶 (横浜国立大学)
超伝導密度汎関数理論に基づくコヒーレント長と磁気侵入長の第一原理計算

B-21 高橋 惇 (東京大学)
Nucleation-type criticality with infinite number of free-energy minima beyond mean-field theory

