

プログラム

11月12日（水） 計算物質科学研究センター第4回シンポジウム

- 13:00 - 13:10 Opening
- 13:10 - 13:50 A01 **Stefan Blügel** (Forschungszentrum Jülich)
“Computing Materials: past, present, future”
- 13:50 - 14:30 A02 **島川 祐一** (京都大学)
「秩序構造ペロブスカイト酸化物における磁気相互作用」
- 14:30 - 15:10 A03 **尾崎 泰助** (東京大学)
「第一原理低次スケーリング電子状態計算手法の開発と実問題への応用」
- 15:10 - 15:40 Coffee Break
- 15:40 - 16:20 A04 **澤田 英明** (新日鐵住金)
「計算材料科学の鉄鋼応用」
- 16:20 - 17:00 **藤堂 眞治、尾崎 泰助、赤井 久純、吉本 芳英**
計算物質科学アプリケーション紹介
- 17:00 - 17:40 **常行 真司** (東京大学)
ポスト「京」に対する物性コミュニティからの提案の状況
- 17:40 - 18:20 A05 **朝倉 大輔** (産業技術総合研究所)
「軟X線分光によるリチウムイオン電池電極材料のオペランド解析」
- 18:30 懇親会〈プラザ 憩い〉

11月13日（木） 物性研究所スーパーコンピュータ共同利用報告会

- 10:00 - 10:40 B01 **酒井 志朗** (理化学研究所)【巻頭論文講演】
「銅酸化物の高温超伝導機構 - 隠れたフェルミオンの存在の数値計算による実証」
- 10:40 - 11:05 B02 **鈴木 隆史** (兵庫県立大学)
「2次元一般化 Heisenberg 模型の有限温度転移」
- 11:05 - 11:30 Coffee Break
- 11:30 - 12:10 B03 **柚木 清司** (理化学研究所)
「層状ペロブスカイト構造を持つ
5d 遷移金属イリジウム酸化物における新奇な絶縁体と超伝導」
- 12:10 - 12:35 B04 **新城 一矢** (京都大学)
「拡張したキタエフ・ハイゼンベルク模型の密度行列繰り込み群法による研究」
- 12:35 - 13:40 Lunch
- 13:40 - 14:20 B05 **館山 佳尚** (物質・材料研究機構)【特別講演】
「全固体電池表面界面の第一原理計算解析」
- 14:20 - 14:45 B06 **小谷 岳生** (鳥取大学)
「MTO+APW を用いた混合基底法にもとづく準粒子自己無撞着 GW 法とその応用」
- 14:45 - 16:10 Poster Session 〈6階ラウンジ〉
- 16:10 - 16:50 B07 **星 健夫** (鳥取大学)【巻頭論文講演】
「「京」での100ナノ電子状態計算とその展望」
- 16:50 - 17:15 B08 **斎藤 晋** (東京工業大学)
「グラフェンおよび六方晶窒化ホウ素原子膜からなる系の幾何構造と電子物性」
- 17:15 - 17:40 B09 **渡辺 一之** (東京理科大学)
「時間依存密度汎関数法のナノスケール電子放射と電子回折への応用」

11月14日(金) 物性研究所スーパーコンピュータ共同利用報告会

- 10:00 - 10:25 C01 **渡辺 宙志** (東京大学)
「多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析」
- 10:25 - 10:50 C02 **淵崎 員弘** (愛媛大学)
「変形 Lennard-Jones 系の基準化に向けて」
- 10:50 - 11:15 Coffee Break
- 11:15 - 11:55 C03 **芝 隼人** (東京大学)【巻頭論文講演】
「構造ガラスのダイナミクスの大規模数値計算
— 動的不均一性を視点として —」
- 11:55 - 12:20 C04 **古川 亮** (東京大学)
「モデル微生物系における流体力学的相互作用の効果」
- 12:20 - 12:45 C05 **金 鋼** (新潟大学)
「ガラス転移におけるフラジリティと動的不均一性」
- 12:45 - Closing

- P01 本山 裕一 (東京大学)
「SU(N) 反強磁性 Heisenberg 鎖における Symmetry Protected Topological 相の分類」
- P02 田中 宗 (京都大学)
「クラスタ分析に対する量子アニーリングの性能評価」
- P03 野口 良史 (東京大学)
「うねったナノグラフェンの光学特性に関する第一原理計算」
- P04 大越 孝洋 (東京大学)
「電子-格子相互作用を含む強相関電子系のための多変数変分モンテカルロ法」
- P05 田村 亮 (物質・材料研究機構)
「磁気冷凍における熱吸収能力と磁気構造の関係」
- P06 井町 宏 (鳥取大学)
「固有値問題むけ最適複合化ソルバの構成と「京」コンピュータ上でのベンチマーク」
- P07 大西 弘明 (原子力機構)
「動的 DMRG による強磁性フラストレート鎖のスピンダイナミクスの研究」
- P08 原田 健自 (京都大学)
“Kernel Method for Scaling Analysis of Critical Phenomena and its Implementation”
- P09 原嶋 庸介 (物質・材料研究機構)
「NdFe₁₁Ti における磁化及び磁気異方性への格子間元素の効果に対する第一原理的研究」
- P10 安田 真也 (東京大学)
「非自明な動的臨界指数を持つ系に対する有限サイズスケーリング」
- P11 大久保 毅 (東京大学)
「危険なイレバント場とスケーリング関係式」
- P12 堀田 俊樹 (東京大学)
「長距離相互作用イジング模型の Critical Decay Exponent」
- P13 國貞 雄治 (北海道大学)
「固体表面・界面領域での原子ダイナミクス ～fcc 鉄表面上での水素の吸着状態～」
- P14 西川 宜彦 (東京大学)
「2成分 Biroli-Mézard 模型の重なり分布関数」
- P15 三澤 貴宏 (東京大学)
「多変数変分モンテカルロ法を用いた
鉄系超伝導体の第一原理有効模型における超伝導機構の解析」
- P16 小田 竜樹 (金沢大学)
「スピントロニクス材料界面 Fe/MgO の原子構造、電子状態、磁気状態」
- P17 笠松 秀輔 (東京大学)
「対称テンソル分解 CI 法による BeH₂ 分子の解離過程の解析」
- P18 山地 洋平 (東京大学)
「ハニカム格子イリジウム酸化物 Na₂IrO₃ の低エネルギー励起」
- P19 稲垣 耕司 (大阪大学)
「第一原理分子動力学計算による触媒援用加工プロセスの解明
— SiO₂ のエッチング反応障壁の解析 —」
- P20 森田 悟史 (東京大学)
「多変数変分モンテカルロ法による正方格子 J₁-J₂ Heisenberg 模型の解析」
- P21 桐井 智弘 (東京大学)
「ドロプレット描像に基づく階層的な非一様模型における非自明な臨界現象」