

# Program

## 12月10日(火)

(†は若手奨励賞対象者)

### 《物性研スパコン共同利用 特別講演》

座長：川島直輝（東京大学）

13:05 - 13:45 **中島 研吾**（東京大学）

「ポストペタスケール・エクサスケールシステムへ向けての東京大学情報基盤センターの取組」

### 《物性研スパコン共同利用》

13:45 - 14:25 **利用者アンケートの紹介・ディスカッション**

《コーヒーブレイク 14:25 - 14:45》

座長：野口良史（東京大学）

14:45 - 15:10 **星 健夫**（鳥取大学）

「数学・計算物質科学・HPC 分野の融合としての超大規模電子状態計算」

15:10 - 15:35 **濱田 幾太郎**（物質・材料研究機構）

「固体と表面のためのファン・デル・ワールス密度汎関数」

15:35 - 16:00 **山内 邦彦**<sup>†</sup>（大阪大学）

「第一原理計算を用いたマルチフェロイック物質の材料設計」

《コーヒーブレイク 16:00 - 16:20》

座長：野口博司（東京大学）

16:20 - 16:45 **荒木 武昭**（京都大学）

「多孔質に閉じ込めたネマチック液晶が示す非線形・非平衡挙動」

16:45 - 17:10 **村島 隆浩**<sup>†</sup>（東北大学）

「高分子流体の階層連携シミュレーション」

17:10 - 17:35 **大槻 東巳**（上智大学）

「3次元トポロジカル絶縁体の半金属-金属転移における状態密度スケーリング」

---

## 12月11日(水)

### 《物性研スパコン共同利用 特別講演》

座長：杉野修（東京大学）

10:00 - 10:40 **廣井 善二**（東京大学）

「フラストレーション格子化合物の物理と化学」

## 《物性研スパコン共同利用》

10:40 - 11:05 **富田 裕介** (芝浦工業大学)  
「誘電体のモデル計算」

## 《コーヒープレイク 11:05 - 11:25》

座長：渡辺宙志 (東京大学)

11:25 - 11:50 **阪野 壘**<sup>†</sup> (東京大学)  
「近藤状態にある量子ドット系での非平衡電流の揺らぎ」

11:50 - 12:15 **森田 悟史**<sup>†</sup> (東京大学)  
「多変数変分モンテカルロ法によるスピン液体の研究」

## 《昼食 12:15 - 13:00》

## 《CMSI 研究課題発表 (第 1 部会)》

座長：水口朋子 (京都大学)

13:00 - 13:05 **第 1 部会 (分子課題) レビュー** [天能精一郎]

13:05 - 13:25 **大西 裕也**<sup>†</sup> (神戸大学)  
「超並列 MP2-F12 法による大規模分子の相互作用エネルギーの高精度計算」

13:25 - 13:45 **大塚 勇起** (神戸大学)  
「モデル空間量子モンテカルロ法の並列実装といくつかの応用例」

13:45 - 14:05 **笹井 理生** (名古屋大学)  
「アクトミオシンモーターの動作機構」

14:05 - 14:25 **河野 裕彦** (東北大学)  
「自在回転部位を有するナノ複合分子の機能評価から制御へ」

## 《コーヒープレイク 14:25 - 14:40》

座長：米原丈博 (東京大学)

14:40 - 14:45 **第 1 部会 (物性課題) レビュー** [今田正俊]

14:45 - 15:05 **遠山 貴己** (京都大学)  
「二次元 DMRG の開発と強相関係への応用」

15:05 - 15:25 **原田 健自** (京都大学)  
「SU(N)ハイゼンベルクモデルで脱閉じ込め転移はあるのか？」

15:25 - 15:45 **三澤 貴宏**<sup>†</sup> (東京大学)  
「多変数変分モンテカルロ法を用いたハバード模型における高温超伝導機構の解析」

15:45 - 16:05 **山地 洋平**<sup>†</sup> (東京大学)  
「新奇量子相の実現・観測へむけた電子状態に基づく理論的予測  
—スピン軌道相互作用と電子相関が生み出すトポロジカル量子相—

## 《ポスターセッション》

16:05 - 18:20 場所：物性研究所 6階ラウンジ

## 《懇親会》

18:30 - 20:00 場所：柏キャンパス カフェテリア

---

# 12月12日(木)

## 《CMSI 研究課題発表(第2部会)》

座長：吉澤香奈子(東京大学)

9:00 - 9:05 **第2部会レビュー** [押山淳]

9:05 - 9:25 **岩田 潤一**<sup>†</sup>(東京大学)

「実空間密度汎関数法コード RSDFT の機能拡張」

9:25 - 9:45 **小野 倫也**<sup>†</sup>(大阪大学)

「RSPACE を用いた電子構造・輸送特性シミュレーション」

9:45 - 10:05 **宮崎 剛**(物質・材料研究機構)

「オーダー*N*法 DFT プログラムの開発と半導体ナノ構造物質に対する応用」

10:05 - 10:25 **土田 英二**(産業技術総合研究所)

「ベリリー位相を用いた電気伝導率の計算」

## 《コーヒープレイク 10:25 - 10:40》

座長：石村和也(分子科学研究所)

10:40 - 11:00 **吉本 芳英**(鳥取大学)

「第一原理電子状態計算ソフトウェア xTAPP の開発と一般公開」

11:00 - 11:20 **尾形 修司**(名古屋工業大学)

「ナノ構造の電子状態から機械的性質までのマルチスケールシミュレーション」

11:20 - 11:40 **信定 克幸**(分子科学研究所)

「ナノ構造体における光誘起電子ダイナミクス」

11:40 - 12:00 **斎藤 峯雄**(金沢大学)

「スラブ系の電子状態計算の開発と応用」

## 《昼食 12:00 - 13:20》

## 《招待講演》

座長：河野貴久(名古屋工業大学)

13:20 - 13:50 **福島 孝治**(東京大学)

「STM 画像データから物理モデルの構成方法 ―データ駆動科学の例として―」

13:50 - 14:20 **加藤 雅治** (東京工業大学)  
「固体中の第2相の形状：エネルギー論を中心にした考察」

《CMSI 研究課題発表 (第3部会)》

14:20 - 14:25 **第3部会レビュー** [岡崎進]

14:25 - 14:45 **小関 史朗** (大阪府立大学)  
「有機 EL 燐光材料分子の理論的設計とシミュレーション」

14:45 - 15:05 **小林 正人<sup>†</sup>** (早稲田大学)  
「ナノ・生体系の反応制御と化学反応ダイナミクス」

《コーヒーブレイク 15:05 - 15:20》

座長：西澤宏晃 (早稲田大学)

15:20 - 15:40 **岡本 祐幸** (名古屋大学)  
「拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明」

15:40 - 16:00 **松林 伸幸** (京都大学)  
「ポリモルフから生起する分子集団機能」

16:00 - 16:20 **北浦 和夫** (神戸大学)  
「フラグメント分子軌道法の開発と創薬への応用」

16:20 - 16:40 **岡崎 進** (名古屋大学)  
「小児マヒウイルスの全原子分子動力学シミュレーション」

16:40 - 17:00 **吉井 範行** (名古屋大学)  
「ポリオウイルスカプシドとレセプター CD155 との相互作用に関する大規模全原子分子動力学計算」

17:00 - 17:20 **安藤 嘉倫<sup>†</sup>** (名古屋大学)  
「汎用分子動力学計算ソフト MODYLAS 開発の最近の進展」

《コーヒーブレイク 17:20 - 17:30》

— 討論会「計算物質科学のためのコンピュータアーキテクチャーとは？」—

モデレータ：藤堂眞治

《招待講演》

17:30 - 18:00 **小柳 義夫** (神戸大学)  
「将来の HPCI 計画推進」

18:00 - 18:15 **SC13 参加報告** [笠松秀輔]

18:15 - 18:30 **FS 進捗, ロードマップ** [藤堂眞治]

18:30 - 18:50 **全体討論**

## 12月13日(金)

### 《CMSI 研究課題発表(第4部会)》

座長：河津 励 (金沢大学)

- 9:00 - 9:05 **第4部会レビュー** [杉野修・山下晃一]  
9:05 - 9:25 **吉田 紀生** (九州大学)  
「3D-RISM による KcsA チャンネル中のカチオン結合モード解析」
- 9:25 - 9:45 **山下 晃一** (東京大学)  
「太陽電池における光電変換の基礎過程の研究と変換効率最適化・長寿命化にむけた大規模数値計算」
- 9:45 - 10:05 **三浦 伸一** (金沢大学)  
「第一原理経路積分インスタントン法の開発とプロトン移動過程への応用」
- 10:05 - 10:25 **矢ヶ崎 琢磨**<sup>†</sup> (岡山大学)  
「メタンハイドレートの分解過程の分子動力学計算」

《コーヒーブレイク 10:25 - 10:40》

座長：大久保 毅 (東京大学)

- 10:40 - 11:00 **Nicephore Bonnet**<sup>†</sup> (東京大学)  
“Enhancement of the Catalytic Activity of Nanoparticles by the Thermal Motion of a Polar Solvent”
- 11:00 - 11:20 **木崎 栄年**<sup>†</sup> (大阪大学)  
「ステップ構造を持つ Pt(322)表面における水バイレイヤー中の OH 吸着及び水の解離 ～第一原理分子動力学シミュレーション～」
- 11:20 - 11:40 **袖山 慶太郎** (京都大学)  
「DFT-MD 自由エネルギー計算によるリチウムイオン電池電解液・添加剤の還元反応解析」
- 11:40 - 12:00 **浅井 美博** (産業技術総合研究所)  
「非平衡量子伝導理論の展開: ナノエレクトロニクスから熱マネジメント材料へ」

《昼食 12:00 - 13:20》

### 《CMSI 研究課題発表(第5部会)》

座長：野田 真史 (分子科学研究所)

- 13:20 - 13:25 **第5部会レビュー** [香山正憲]  
13:25 - 13:45 **澤田 英明** (新日鐵住金)  
「鋼中析出物界面の第一原理計算」
- 13:45 - 14:05 **譯田 真人**<sup>†</sup> (大阪大学)  
「電子論に基づく Fe-Si 合金のマクロな機械的特性の予測」

- 14:05 - 14:25 **寺田 弥生** (東北大学)  
「多分散レナード・ジョーンズ系における相図の粒度分布と温度依存性」
- 14:25 - 14:45 **澁田 靖**<sup>†</sup> (東京大学)  
「合金凝固組織の高精度制御を目指した dendroライト組織の大規模数値計算  
—大規模分子動力学法による高温物性値の導出と固液界面挙動解析—」
- 14:45 - 15:05 **西松 毅** (東北大学)  
「強誘電体の電気熱量効果の分子動力学計算」
- 15:05 - 15:25 **大野 かおる** (横浜国立大学)  
「ナノクラスターから結晶までの機能性材料の全電子スペクトルとダイナミクス」

《コーヒーブレイク 15:25 - 15:40》

《CMSI 支援課題》

座長：五十嵐亮 (東京大学)

- 15:40 - 16:00 **中野 博生** (兵庫県立大学)  
「フラストレート磁性体の計算科学的研究  
—スピン空間に異方性のない系でのスピントロポロジー現象—」
- 16:00 - 16:20 **芝 隼人**<sup>†</sup> (東京大学)  
「界面活性剤系のマルチラメラ高次構造形成の大規模粗視化分子動力学計算」
- 16:20 - 16:40 **大久保 毅**<sup>†</sup> (東京大学)  
「フラストレート磁性体におけるトポロジカル励起の秩序化」
- 16:40 - 17:00 **石村 和也**<sup>†</sup> (分子科学研究所)  
「ナノサイズ分子の新規構造及び機能の探索  
—大規模並列計算プログラムの効率的な開発—」
- 17:00 - 17:20 **土居 抄太郎**<sup>†</sup> (東京大学)  
「Screened KKR 法による永久磁石材料の第一原理電子状態計算」
- 17:20 - 17:40 **茂木 昌都** (日産アーク)  
「HPC を用いた次世代電池の反応機構の解明」

# Poster Session

**12月11日(水)** 16:05 - 18:20 6階ラウンジ (†はポスター賞対象者)

- P-01 **大越 孝洋**<sup>†</sup> (東京大学)  
「冷却原子系の量子モンテカルロ・シミュレーション」
- P-02 **米原 文博**<sup>†</sup> (東京大学)  
「多くの励起状態と輻射場が関わる超高速非断熱化学過程と多階層構造を有する分子系における電子動力学の追跡に向けた計算手法の開発」
- P-03 **Qing-Miao Nie**<sup>†</sup> (名古屋大学)  
“Dynamical energy landscape theory for the force-generation process in actomyosin motor”
- P-04 **小畑 修二** (東京電機大学)  
「磁気双極子相互作用に基づくナノ構造 Fe の磁化過程のシミュレーション」
- P-05 **河津 励**<sup>†</sup> (分子科学研究所)  
「虚時間離散化インスタントン法の虚時間範囲に対する新しい取り扱い方法」
- P-06 **小泉 健一**<sup>†</sup> (東京大学)  
「実空間密度汎関数法に基づいた Car-Parrinello 法(RS-CPMD)の開発」
- P-07 **坂下 あい**<sup>†</sup> (お茶の水女子大学)  
「球状ベシクルに内包されたベシクルの形状決定機構の解明」
- P-08 **Vikas Sharma**<sup>†</sup> (産業技術総合研究所)  
“Local Mechanical Properties of Iron-Precipitate Coherent Interfaces Using First-Principles Calculations”
- P-09 **岡 耕平**<sup>†</sup> (大阪大学)  
「酸化タングステン表面上での水素吸着・拡散機構の解析」
- P-10 **小野 頌太**<sup>†</sup> (横浜国立大学)  
「原子球内ポテンシャル計算における高速高精度 Fourier 変換法の開発」
- P-11 **大脇 創** (日産自動車)  
「高性能蓄電デバイス開発へ向けた理論的基盤研究」
- P-12 **渡辺 宙志**<sup>†</sup> (東京大学)  
「気泡の可視化 ～「無い」ものを可視化する～」

- P-13 **北岡 幸恵**<sup>†</sup> (三重大学)  
「Fe フタロシアニンにおける d 電子配置：単一分子から基板吸着、結晶化に至る電子構造と遷移」
- P-14 **野田 真史**<sup>†</sup> (分子科学研究所)  
「ナノ構造体光励起ダイナミクス並列計算プログラム GCEED の開発とその応用」
- P-15 **新城 一矢**<sup>†</sup> (京都大学)  
「 $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  に対する有効スピン模型の 2 次元密度行列繰り込み群法による研究」
- P-16 **石井 史之**<sup>†</sup> (金沢大学)  
「遷移金属酸化物における Rashba 効果の第一原理計算」
- P-17 **小田 竜樹** (金沢大学)  
「スラブ系電子構造計算の開発と応用」
- P-18 **鈴木 隆史**<sup>†</sup> (兵庫県立大学)  
「SU(N)一般化ハイゼンベルク模型の有限温度転移」
- P-19 **河野 貴久**<sup>†</sup> (東京大学)  
「ハイブリッド量子古典シミュレーションによるシリカガラス中の水分子反応」
- P-20 **Truong Vinh Truong Duy** (北陸先端科学技術大学院大学)  
“A decomposition method with minimum communication amount for parallelization of multi-dimensional FFTs”
- P-21 **田中 宗**<sup>†</sup> (東京大学)  
「フラストレーションが生み出す新奇相転移現象の探求」
- P-22 **田村 亮**<sup>†</sup> (物質・材料研究機構)  
「反強磁性体における磁気熱量効果の特徴」
- P-23 **正木 晶子**<sup>†</sup> (東京大学)  
「ワーム更新による並列化量子モンテカルロアルゴリズム」
- P-24 **明石 遼介**<sup>†</sup> (東京大学)  
「プラズモン支援超伝導のための密度汎関数理論：転移温度計算手法開発とその応用」
- P-25 **水口 朋子**<sup>†</sup> (分子科学研究所)  
「タンパク質の膜内安定性に関する自由エネルギー解析」
- P-26 **西澤 宏晃**<sup>†</sup> (分子科学研究所)  
「DC-DFTB 理論の高度並列化と Hessian への理論展開」
- P-27 **本山 裕一**<sup>†</sup> (東京大学)  
「ゲージ固定ベリー接続の有限サイズスケーリング解析」

- P-28 **安田 真也**<sup>†</sup> (東京大学)  
「量子臨界点における有効アスペクト比への有限サイズ補正とその起源」
- P-29 **小幡 正雄** (金沢大学)  
「ファン・デル・ワールス密度汎関数法の磁性物質への適応」
- P-30 **野口 良史**<sup>†</sup> (東京大学)  
「第一原理  $GW+Bethe-Salpeter$  法の開発と最近の応用例」
- P-31 **稲垣 耕司** (大阪大学)  
「第一原理計算による触媒援用表面エッチングプロセスの解明」
- P-32 **堀田 俊樹**<sup>†</sup> (東京大学)  
「長距離相互作用系のあるイジング模型のユニバーサリティクラス」
- P-33 **吉澤 香奈子**<sup>†</sup> (東京大学)  
「xTAPP と TAPIOCA の開発：統合入力ファイルへの拡張とソフトウェアの公開」
- P-34 **小西 優祐**<sup>†</sup> (産業技術総合研究所)  
「ナノ構造を持つ合金中の熱伝導計算」
- P-35 **高木 紀明** (東京大学)  
「STM トンネル接合における磁性分子の可逆的量子状態操作」
- P-36 **樋口 大志**<sup>†</sup> (東京理科大学)  
「実時間密度汎関数法によるシリセンナノリボンからのレーザー誘起電界電子放出」
- P-37 **胡 春平**<sup>†</sup> (東京理科大学)  
「Tamm-Dancoff 近似に基づいた TDDFT 法による非断熱結合係数の高精度計算」
- P-38 **Bo Xiao** (東京大学)  
“First-Principles Study on the bonding and O diffusion in Amorphous-TaO<sub>x</sub>”
- P-39 **Pavel V. Avramov** (神戸大学)  
“Structural Models and FMO Analysis of Human and Avian Hemagglutinin Protein Interactions with Sialocide Ligands”
- P-40 **坂下 達哉**<sup>†</sup> (東京大学)  
「並列固有値ソルバの統一的インターフェースを用いた厳密対角化パッケージの開発」
- P-41 **榮 慶丈**<sup>†</sup> (名古屋大学)  
「アミノ酸の種類ごとに区別したタンパク質系力場の提案」
- P-42 **Hui-Hai Zhao**<sup>†</sup> (東京大学)  
“Tensor Network Method on Finite Lattice with Periodic Boundary Condition”

- P-43 **西松 毅**（東北大学）  
「3次元FFTのベンチマーク」
- P-44 **澁田 靖**<sup>†</sup>（東京大学）  
「炭素ナノ材料生成過程の第一原理分子動力学法シミュレーション  
—炭素源分子解離機構の解明に向けて—」
- P-45 **笠松 秀輔**<sup>†</sup>（東京大学）  
「強誘電体薄膜キャパシタの第一原理解析」
- P-46 **下司 雅章**（大阪大学）  
「CMSIの人材育成 ～計算科学の将来を見据えて～」
- P-47 **吉井 範行**（名古屋大学）  
「TCCIにおける人材育成・教育活動の報告」
- P-48 **寺田 弥生**（東北大学）  
「2013年度東北大学計算材料科学研究拠点（CMRI）活動報告」
- P-49 **五十嵐 亮**<sup>†</sup>（東京大学）  
「MateriApps: 物質科学シミュレーションのポータルサイト」