

ポスト「京」物質科学関連課題検討会

「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」 「基礎科学のフロンティア ー 極限への挑戦」

日時: 平成 26 年 9 月 28 日(日)10:00~17:30
場所: ステーションコンファレンス東京 (東京駅直結) 6階605BC 号室
主催: 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター(CCMS)
東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究拠点(CMRI)
協賛: 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)

<プログラム>

10:00~10:05 ポスト「京」「アプリケーション開発プロジェクト」に向けて 今田正俊(東京大)
◆◆ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」◆◆

◆サブ課題 A: 新機能電子デバイス(7A)

(座長 大野かおる(横浜大))

1) 次世代高性能半導体デバイス

- 10:05~10:20 7A-1 半導体デバイスにおける乱れの理解と制御
○岩田潤一・内田和之・押山淳(東京大)、重田育照(筑波大)、Mauro Boero (IPCMS)
- 10:20~10:30 7A-2 新奇ナノデバイスの欠陥・不純物の拡散・熱力学特性を解明する自由エネルギー計算
斎藤峯尾・○小田竜樹(金沢大)
- 10:30~10:40 7A-3 最先端デバイス用界面原子構造の評価とデザイン
○小野倫也(大阪大)、宮崎剛(NIMS)
- 10:40~10:50 7A-4 内殻電子励起スペクトルの全電子第一原理計算手法の開発
野口良史(東京大)、○杉野修(東京大)
- 10:50~11:00 7A-5 有機デバイス材料の 100 ナノ量子シミュレーション
○星建夫(鳥取大)、多田朋史(東工大)、山本貴博(東京理大)、山本有作(電通大)

(座長 小口多美夫(大阪大))

2) 新奇超伝導体、新機能スピン電荷デバイス材料

- 11:00~11:15 7A-6 新奇超伝導体、機能スピン電荷デバイス材料の開発
○今田正俊・○山地洋平・川島直輝・藤堂眞治・三澤貴宏・求幸年(東京大)、有田亮太郎・酒井志朗(理研)、中村和磨(九工大)

3) 電子デバイスを代替・補完する光・電子デバイス

- 11:15~11:25 7A-7 密度行列繰り込み群法による強相関物質の励起ダイナミクスの研究
遠山貴巳(東京理大)、○曾田繁利(理研)
- 11:25~11:40 7A-8 電子デバイスを代替・補完する光・電子デバイス
信定克幸(分子所)、矢花一浩・朴泰祐(筑波大)

◆サブ課題 B: 高性能永久磁石・磁性材料(7B)

- 11:40~11:55 7B-1 磁性材料における組織形成のマルチスケールモデリングと高性能磁性材料のデザイン
(双極子-双極子相互作用のある系のマルチスケールシミュレーション)
○佐藤和則(大阪大)、○西松毅(東北大)、福島鉄也(大阪大)
- 11:55~13:00 昼休

(座長 押山淳(東京大))

- 13:00~13:10 7B-2 全電子フルポテンシャル線形化補強平面波法によるスピン軌道相互作用が絡むノンコリニア磁性の大規模計算
○中村浩次(三重大)、獅子堂達也(広島大)、小口多美夫(大阪大)
- 13:10~13:25 7B-3 希少金属を代替する永久磁石・磁性材料の開発
○三宅隆・石橋章司(産総研)、合田義弘(東工大)、土浦宏紀・白井正文(東北大)、吉本芳英・宮下精二・尾崎泰助(東京大)、西野正理・大久保忠勝・阿部太一・宮崎剛(NIMS)、前園涼(北陸先端大)、(アドバイザー)寺倉清之(産総研・NIMS)

◆サブ課題 C: 高信頼性構造材料(7C)

- 13:25~13:40 7C-1 大規模第一原理計算とメゾ手法の連携による構造材料の微細組織の解明と設計
○香山正憲・田中真悟・石橋章司(産総研)、澤田英明・川上和人(新日鐵住金)、譯田真人・尾方成信・君塚肇(大阪大)、大野宗一(北海道大)、澁田靖、尾崎泰助(東京大)、高木知弘(京工繊大)、板倉充洋・山口正剛(原研)

13:40～13:50 7C-2 材料製造プロセスにおける組織形成過程の大規模数値計算
大野宗一(北海道大)、澁田靖(東京大)、○高木知弘(京都工繊大)

(座長 信定克幸(分子研))

◆サブ課題D:次世代機能性化学品の分子設計(7D)

13:50～14:00 7D-1 次世代機能性化学品の分子設計
○尾形修司(名古屋大)

14:00～14:15 7D-2 複合分子集合系の大規模計算に基づくソフト材料の評価と探索
○松林伸幸(大阪大)、茂本勇(東レ)

◆サブ課題E:データ駆動型物質科学(7E)

14:15～14:30 7E-1 データ駆動型科学の物質科学への展開
○福島孝治・岡田真人(東京大)

◆特別講演

14:30～14:40 産業界からポスト「京」重点課題プロジェクトへの期待
○茂本勇(東レ)

◆◆ポスト「京」萌芽的課題⑩「基礎科学のフロンティア - 極限への挑戦」◆◆

◆サブ課題A:破壊とカタストロフィ:材料、人工物から地球まで(10A)

14:40～15:00 10A-1 破壊とカタストロフィ、材料、人工物から地球まで
○山口正剛(JAEA)、大野かおる(横浜国大)、○久保百司・陳迎・尾澤伸樹・樋口祐次(東北大)

15:00～15:30 休息

(座長 三宅隆(産総研))

◆サブ課題B:相転移と流体が織り成す大変動:ナノバブルから火山噴火まで(10B)

15:30～15:45 10B-1 複雑流体における物性予測・制御及び機能創発
野口博司・小屋口剛博・○渡辺宙志・芝隼人(東京大)、高木周(東工大)

15:45～16:00 10B-2 ミクロからマクロに渡る複雑流動のマルチスケールシミュレーション手法の開発
○川勝年洋・村島隆浩(東北大)山本量一・谷口貴志(京都大)、
Giuseppe Milano(Univ. Salerno, Italy)、野口博司(東京大)

◆サブ課題C:極限環境での状態変化:物質の理解から惑星深部へ(10C)

16:00～16:10 10C-1 基礎科学の極限のための確率論的手法に基づく量子多成分系手法の高度化
○立川仁典・北幸海・河津励(横浜市大)、

16:10～16:20 10C-2 極限環境での状態変化:物質の理解から惑星深部へ
○土屋卓久(愛媛大)、常行真司(東京大)

16:20～16:35 10C-3 地球惑星物質科学
○飯高敏晃(理研)、梅本幸一郎(東工大)、土屋旬(愛媛大)、池田隆司(JAEA)、宮崎剛(NIMS)、
石河孝洋(大阪大)、前園涼・本郷研太(北陸先端大)、吉本芳英(東京大)、
高木成幸・西松毅(東北大)、A.K. Singh (IIS)

(座長 香山正憲(産総研))

◆サブ課題D:量子力学の基礎と情報:計算限界への挑戦(10D)

16:35～16:50 10D-1 量子ダイナミクスとテンソルネットワーク
○川島直輝・藤堂眞治・宮下精二・今田正俊(東京大)、飯高敏晃(理研)、原田健自(京都大)、
鈴木隆史(兵庫県立大)

16:50～17:05 10D-2 量子もつれネットワークのための量子クラウドメモリーシミュレーション
○小坂英男・大野かおる・堀切智之(横浜国大)、志田和人(東北大)

17:05～17:15 10D-3 ノンコンベンショナル基底表現による厳密量子計算
○関野秀男・濱田信次(豊橋技科大)、Robert J. Harrison(SBU & BNL)

17:15～17:25 10D-4 スピン・フラストレーション系における量子スピン液体の数値対角化による研究
○中野博生(兵庫県立大)、坂井徹(JAEA)

◆ポスト「京」で取り組む計算物質科学に向けて

17:25～17:30 常行真司(東京大 CCMS センター長)
毛利哲夫(東北大 CMRI 拠点代表)