

PCoMSシンポジウム& 計算物質科学スーパーコンピュータ 共用事業報告会2018

PCoMS Symposium & Annual meeting of
Supercomputing Consortium for
Computational Materials Science 2018

共催／計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)・計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業

2018年
日時
Date
10月22日(月) 13:00-19:15
10月23日(火) 9:00-18:20

会場
Venue
東北大学 金属材料研究所 2号館講堂(仙台)
Auditorium, Institute for Materials Research, Katahira Campus, TOHOKU Univ., Sendai
参加費
Registration fee
無料
free
交流会費
Banquet fee
4,000円
4,000JPY



10月22日(月) / Oct. 22

12:30-	受付 / registration
オープニングアドレス opening address	
13:00-13:10	開会挨拶 東北大学 金属材料研究所 所長 高梨 弘毅
	来賓挨拶 文部科学省 科学技術・学術政策局 人材政策課 人材政策推進室 国立研究開発法人科学技術振興機構 科学技術プログラム推進部 プログラム主管 山本 恵司
PCoMS&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 活動報告 セッション activity summary session	
13:10-13:35	PCoMS全体及び東北大学活動報告 毛利 哲夫(東北大学 コンソーシアム長)
13:35-13:52	PCoMS 東大拠点の活動報告 川島 直輝(東京大学 運営協議会委員)
13:52-14:08	PCoMS分子科学研究所活動報告 齊藤 真司(分子科学研究所 次世代研究者育成委員会委員)
14:08-14:25	PCoMS 大阪大学活動報告 森川 良忠(大阪大学 運営協議会委員)
14:25-14:35	計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告 齊藤 真司(分子科学研究所)

14:35-14:45	休憩 / break
招待講演セッション1 invited talk session 1	
14:45-15:25	《招待講演》 若手研究者の未来を拓くために ～HIRAKUにおける産学官連携の取組～ 三須 敏幸(広島大学 グローバルキャリアデザインセンター)

15:25-15:35	休憩 / break
次世代研究者セッション1 NPD session 1	
次世代研究者(PCoMS次世代研究者奨励賞 受賞者)活動報告	
15:35-15:57	メソスケール分子集合系の分子シミュレーションー 連続極限の直接計算に向けて 芝 隼人(東北大学 金属材料研究所)
15:57-16:19	トポロジカル物質のスピン트로ニクスへの応用 Applications of topological materials to spintronics 三澤 貴宏(東京大学 物性研究所)
次世代研究者(支援終了)最終活動報告	
16:19-16:41	Coarsening of connected microstructures by surface diffusion Pierre-Antoine Geslin(東北大学 金属材料研究所)

16:41-17:10	計算材料科学センターMASAMUNE-IMR 見学 / MASANUME-IMR tour
ポスターセッション poster session	
17:10-19:15	ショートトーク&展示 / short talk & exhibition
19:15-21:00	交流会 / banquet

10月23日(火) / Oct. 23

計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業セッション1	
9:00-9:22	第一原理計算・レプリカ交換モンテカルロ法結合フレームワークの開発と欠陥を有するイオン結晶への応用 笠松 秀輔(東京大学 物性研究所)
9:22-9:44	複雑混相流動のマルチスケールシミュレーション 川勝 年洋(東北大学大学院理学研究科)
9:44-10:06	経路積分分子動力学法を用いた含水アルミナ水素結合の圧力相転移の再現と課題 河津 励(理化学研究所 情報システム本部)
10:06-10:28	ベイズ最適化と第一原理電子状態計算を用いた磁石化合物の探索 深澤 太郎(産業技術総合研究所)

10:28-10:45	休憩 / break
計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業セッション2	
10:45-11:07	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)計算プログラムの開発・整備と応用 西村 好史(早稲田大学 理工学術院総合研究所)
11:07-11:29	蓄電池の技術課題に対する第一原理計算研究 館山 佳尚(物質・材料研究機構)

11:29-14:05	昼休憩 / lunch break
招待講演セッション2 invited talk session 2	
14:05-14:50	《招待講演》 エネルギー課題に電子、原子、分子のミクロな立場から挑戦するーポスト京重点課題⑤ー 岡崎 進(名古屋大学・ポスト「京」重点課題⑤課題責任者)
14:50-15:30	《招待講演》 アカデミアとインダストリーの垣根を超えて 藤井 幹也(バナソニック株式会社)

15:30-15:45	休憩 / break
次世代研究者セッション2 NPD session 2	
15:45-16:07	量子ドット系のスピン緩和における多体相関効果 Many-body correlation effect on spin relaxation in quantum dots 吉見 一慶(東京大学 物性研究所)
16:07-16:29	生体分子系における機能ダイナミクスのマルチスケール・シミュレーション 岡崎 圭一(分子科学研究所)
16:29-16:51	磁性材料のマテリアルデザイン 福島 鉄也(大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター)

16:51-17:05	休憩 / break
次世代研究者セッション3 NPD session 3	
17:05-17:27	Diffusion Properties of Carbon in α -Fe Nguyen Tien Quang(大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター)
17:27-17:49	Large-Scale Electronic Structure Calculations for Organic Optoelectronic Materials 藤田 貴敏(分子科学研究所)
17:49-18:11	メタン活性化用金属イオン交換 MFI ゼオライト触媒の量子化学計算に基づく設計と反応機構解析 山崎 馨(東北大学 金属材料研究所)

クロージングアドレス closing address	
18:11-18:20	全体に対する議論と総括



計算物質科学
人材育成コンソーシアム
Professional development Consortium
for Computational Materials Scientists

《問い合わせ先》Contact address
計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)事務局/PCoMS Office 〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2丁目1-1 tel:022-215-2282 fax:022-215-2840 email:pcoms@imr.tohoku.ac.jp
計算物質科学人材育成コンソーシアム(Professional development Consortium for Computational Materials Scientists:PCoMS)は、
文部科学省 科学技術人材育成費補助事業 国立研究開発法人科学技術振興機構「科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業(次世代研究者プログラム)」による支援を受けています。
協賛：ポスト「京」萌芽の課題 基礎科学の挑戦ー複合・マルチスケール問題を通した極限の探求
ポスト「京」重点課題(5)エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発
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