

2025年度 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター 国際共同利用・共同研究拠点公募課題 成果報告会

FY2025 Annual Meeting of the Center for Computational Materials Science
on GIMRT Collaborative Research
Institute for Materials Research, Tohoku University

開催
日時

2026年6月8日(月)
10:00-17:35

開催
方法

オンライン開催

・事前登録制 6/5(金)13時締切
・参加無料



https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/anmtg.html

プログラム / Program

オープニングアドレス / Opening Address 10:00-10:10

成果報告 I / Project Reports I 10:10-11:50

欠陥解析と制御によるアモルファス酸化物半導体の合理的設計

熊谷 悠 [東北大学 金属材料研究所]

高度な第一原理計算と機械学習による材料特性解析と新材料探索

陳 迎 [東北大学 高度教養教育・学生支援機構]

ノンパラメータマルチスケール計算による構造・機能材料設計

佐原 亮二 [物質・材料研究機構 構造材料研究センター]

高濃度 Mo 固溶体の物理的・機械的性質に対するマテリアルズインフォマティクス

吉見 享祐 [東北大学 大学院工学研究科]

昼休憩 / Lunch Break 11:50-13:00

特別講演 / Special Lecture 13:00-13:50

国内スパコンのGPU化動向及び文科省によるアプリケーション支援事業について

朴 泰祐 [次世代 HPC・AI 研究開発支援センター]

成果報告 II / Project Reports II 13:50-15:05

一価カチオンと多価カチオンの協奏的相互作用を利用した
蓄電池構築への計算材料学的アプローチ

李 弘毅 [東北大学 金属材料研究所]

天然ゴム由来ポリイソプレン鎖の粗視化モデルの構築と
流動誘起結晶化機構の解明

谷口 貴志 [京都大学 大学院工学研究科]

セメント系材料への新規アミン系添加剤の創製

胡桃澤 清文 [北海道 大学大学院工学研究院]

休憩 / Break 15:05-15:20

成果報告 III / Project Reports III 15:20-17:25

第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの開発

大西 正人 [統計数理研究所 先端データサイエンス研究系]

Theoretical Exploration of High-Entropy Oxide Cathodes and
Anion-Modified Materials for Advanced Lithium-Ion Batteries

Tien Quang NGUYEN [Institute for Aqua Regeneration, Shinshu University]

Explore the pH-Field Coupled Modeling and Machine Learning for
Advanced Electrocatalysis

Hao LI [Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University]

Experimental and Computational Studies on Chemical Reactions
Involving Metal and Metal-Oxide Clusters

荒川 雅 [九州大学 大学院理学研究院]

第一原理計算による有機無機ペロブスカイトの物性研究

王 青 [九州大学 大学院総合理工学研究院]

クロージングアドレス / Closing Address 17:25-17:35

■主催 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター

■協賛 計算物質科学人材育成コンソーシアム <PCoMS>

■お問合せ 東北大学金属材料研究所 計算材料学センター TEL:022-215-2411 E-mail:ccms-anmtg.imr@grp.tohoku.ac.jp

Supercomputing system
MASAMUNE-**炎**

MAaterials science Supercomputing system for Advanced MULTI-scale simulations towards NExt-generation II

