

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 2020

PCoMS Symposium & Annual meeting of Supercomputing Consortium
for Computational Materials Science 2020

2021年2月15日(月) 10:00-17:20・16日(火) 13:00-16:45

Feb.15(Mon.)10:00-17:20・Feb.16(Tue.)13:00-16:45,2021

<http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R02/PCoMS-SCCMS-Sympo2020/>

開催方式
オンライン

Online virtual
symposium

事前登録制

2021年2月11日(木)迄

Pre-registration required by Feb. 11 (Thu.)

参加費

無料 Registration fee : free



定員: 100名

Capacity: 100 persons

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

協賛

計算物質科学協議会



PCoMS

Professional development Consortium
for Computational Materials Scientists

東北大学 金属材料研究所
計算物質科学人材育成コンソーシアム
<PCoMS>

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1

Tel:+81-22-215-2282 Fax:+81-22-215-2164 Email:pcoms@imr.tohoku.ac.jp

Contact Address: Professional development Consortium for Computational Materials Scientists <PCoMS >

Institute for Materials Research, Tohoku University 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577 Japan

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。

PCoMS is supported by the Project for Establishing a Consortium for the Development of Human Resources in Science and Technology (Program for Training Researchers for the Next Generation) promoted by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT), Japan.

9:40	一般接続開始	
10:00-10:10	オープニングアドレス / Opening address	
10:00-10:10	開会挨拶 東北大学 金属材料研究所 古原 忠 所長 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 Human Resources Policy of Science and Technology Division, Science and Technology Policy Bureau, Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology	Tadashi FURUHARA [Director, Institute for Materials Research, Tohoku University]
10:10-10:55	PCoMS 活動報告セッション / PCoMS activity summary session	
10:10-10:25	「コロナ禍の新常態における計算物質科学人材育成コンソーシアムの後期取組みにむけて」 Towards the late stage activities of PCoMS in the new normal under COVID-19	久保 百司 [東北大学] Momoji KUBO [Tohoku University]
10:25-10:35	「PCoMS 東大拠点の活動報告」 Annual Report of Activities of PCoMS Utokyo	川島 直輝 [東京大学] Naoki KAWASHIMA [The University of Tokyo]
10:35-10:45	「PCoMS 分子科学研究所 活動報告」 Activity Report of PCoMS in IMS	斉藤 真司 [分子科学研究所] Shinji SAITO [Institute for Molecular Science]
10:45-10:55	「大阪大学でのPCoMS 活動報告」 PCoMS activity at Osaka University	森川 良忠 [大阪大学] Yoshitada MORIKAWA [Osaka University]
10:55-11:45	イノベーション創出人材育成対象者セッション / IPD session	
10:55-11:20	「1-12系磁石材料の状態図による熱力学的解析」 Thermodynamic analysis of 1-12 magnet materials by phase diagram	高 成柱* [現:東京工業大学、前:大阪大学] Sonju KOU* [Tokyo Institute of Technology]
11:20-11:45	「散逸粒子動力学法による反応誘起構造転移のダイナミクス」 Dissipative particle dynamics approach to reaction-induced morphological transition	富吉 良徳* [東北大学] Yoshinori TOMIYOSHI* [Tohoku University]
11:45-13:00	昼休憩 / lunch	
13:00-13:50	招待講演セッション1 / Invited talk session 1	
13:00-13:50	「グローバル研究者育成東北イニシアティブの展望とスタートアップ」 Outlook and start-up of TI-FRIS	早瀬 敏幸 [東北大学 学際科学フロンティア研究所 所長] Toshiyuki HAYASE [Director, Frontier Research Institute for Interdisciplinary Sciences (FRIS), Tohoku Univ.]
13:50-14:05	休憩 / break	
14:05-15:25	次世代研究者セッション1 / NPD session 1	
14:05-14:25	「フラグメント分割型GW/BSE法の開発と応用」 Developments and Applications of Fragment-Based GW/BSE Method	藤田 貴敏 [分子科学研究所] Takatoshi FUJITA [Institute for Molecular Science]
14:25-14:45	Carbon clustering in BCC iron: A kinetic Monte Carlo study	Nguyen Tien QUANG* [Osaka University]
14:45-15:05	「分子性導体における第一原理有効Hamiltonianの構築～非経験的解析による電子物性の包括的理解へ向けて」 Construction of First Principle Effective Hamiltonian in Molecular Conductors ~ Toward a comprehensive understanding of electronic properties through ab initio analysis	吉見 一慶* [東京大学] Kazuyoshi YOSHIMI* [The University of Tokyo]
15:05-15:25	「強相関量子多体系の第一原理計算手法開発 - 量子スピン液体と高温超伝導体への適用」 Development of ab initio method for strongly correlated quantum many-body systems - Applications to quantum spin liquids and high-Tc superconductors	三澤 貴宏* [現:北京量子情報科学研究院、元:東京大学] Takahiro MISAWA* [present: Beijing Academy of Quantum Information Sciences/ former: The University of Tokyo]
15:25-15:40	休憩 / break	
15:40-17:20	次世代研究者セッション2 / NPD session 2	
15:40-16:00	「光化学反応の量子化学:可視・紫外領域からX線領域への拡張」 Quantum chemistry toward extending photochemistry from UV/Vis to x-ray regions	山崎 馨* [現:理化学研究所、前:東北大学] Kaoru YAMAZAKI* [present: RIKEN/ former: Tohoku University]
16:00-16:20	「メゾマクロ系への階層的数値計算とデータ駆動モデリングの試み」 Endeavor for heterogeneous computing and data-driven modeling from meso to macrocales	芝 隼人* [現:東京大学、前:東北大学] Hayato SHIBA* [present: The University of Tokyo/ former: Tohoku University]
16:20-16:40	「分子シミュレーションによる生体分子マシンの機能ダイナミクス解明とその制御」 Elucidation and control of functional dynamics of biomolecular machines via molecular simulations	岡崎 圭一* [分子科学研究所] Kei-ichi OKAZAKI* [Institute for Molecular Science]
16:40-17:00	「高速・高精度の第一原理計算を用いたハイスループットスクリーニング手法の開発～不規則系物質への応用～」 Automatic high-throughput calculations for disordered materials	福島 鉄也* [現:東京大学、前:大阪大学] Tetsuya FUKUSHIMA* [The University of Tokyo]
17:00-17:20	Concentrated random alloys: from stress correlations to dislocation depinning Pierre-Antoine GESLIN* [present: Mateis laboratory, Insa-Lyon/ former: Tohoku University]	
2月16日(火) / Feb. 16 (Tue.)		
12:40	一般接続開始	
13:00-13:15	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 / SCCMS activity summary session	
13:00-13:15	「計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告」 Annual Report of Activities of Supercomputing Consortium for Computational Materials Science	久保 百司 [東北大学] Momoji KUBO [Tohoku University]
13:15-14:05	招待講演セッション2 / Invited talk session 2	
13:15-14:05	「パワー半導体エピタキシャル成長機構解明とデバイス界面制御に向けたコンピューティクス・アプローチ」 Computics Approach toward clarification of epitaxial growth and control of device interfaces in power semiconductors	押山 淳 [名古屋大学 未来材料・システム研究所 特任教授] Atsushi OSHIYAMA [Designated Professor, Institute of Materials and Systems for Sustainability, Nagoya University]
14:05-14:20	休憩 / break	
14:20-15:20	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 / SCCMS session 1	
14:20-14:40	Three dimensional quantum spin liquid on pyrochlore lattice	Rico POHLE [Waseda University]
14:40-15:00	「第一原理計算+溶液理論を用いたLiグラファイトの反応解析」 First-principles ESM-RISM simulation for charge-transfer reaction of Li-intercalated graphite	春山 潤 [東京大学] Jun HARUYAMA [The University of Tokyo]
15:00-15:20	「磁気状態に依存するフォノンが磁性に及ぼす熱力学的フィードバック効果とその影響」 Impact of the thermodynamic feedback effect on magnetism originated from magnetism-dependent phonons	田中 友規 [東京工業大学] Tomonori TANAKA [Tokyo Institute of Technology]
15:20-15:35	休憩 / break	
15:35-16:35	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 / SCCMS session 2	
15:35-15:55	Theoretical modelling of a single-phase borophene layer on metal support	Andrey LYALIN [Hokkaido University]
15:55-16:15	「高分子電解質膜および燃料電池電極界面における物質輸送機構解明に向けた分子動力学計算新規手法開発」 Development of a new method of molecular dynamics simulation for understanding mass transport in polymer electrolyte membranes and interfaces of fuel-cell electrodes	永井 哲郎 [東京大学] Tetsuro NAGAI [The University of Tokyo]
16:15-16:35	「2次元原子膜物質の電子輸送特性と電子構造改変研究」 Electronic transport properties and electronic-structure engineering in 2D layered materials	斎藤 晋 [東京工業大学] Susumu SAITO [Tokyo Institute of Technology]
16:35-16:45	クロージングアドレス / Closing address	