

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(CDMSI)

プログラム

2019年8月9日(金)

会場:伊藤謝恩ホール

| | | |
|-----------------------------|---|----|
| 10:00 | 開会の辞 常行真司 (東京大学) | 7 |
| プロジェクトで取り組む全研究課題の成果をポスターで報告 | | |
| 10:00 - 10:30 | フラッシュトーク (1分間のプレゼンテーション) | |
| 10:30 - 11:50 | ポスターセッション(会場:多目的スペース) | 7 |
| *ポスターは意見交換会終了時まで展示します。 | | |
| 11:50 - 13:00 | 休憩 | |
| 13:00 - 13:10 | 挨拶 文部科学省・五神 真 (東京大学総長)・ 森 初果 (物性研究所長) | |
| 13:10 - 13:30 | プロジェクト概説 常行真司 (東京大学・CDMSI課題責任者) | 3 |
| 座長 常行真司 (東京大学) | | |
| 13:30 - 14:30 | 特別講演: 天野 浩 (名古屋大学) 「産業競争力の鍵を握るプロセスインフォマティクスの展開とスパコン『富岳』の役割」 | 1 |
| 14:30 - 15:00 | サブ課題A 高機能半導体デバイス 押山 淳 (名古屋大学) 「第一原理物質計算と量子論デバイス・プロセスシミュレーション」 | 11 |
| 15:00 - 15:15 | 休憩 | |

本紙掲載
ページ

本紙掲載
ページ

| | | |
|------------------------|--|----|
| 座長: 毛利哲夫 (東北大学) | | |
| 15:15 - 15:35 | サブ課題B 光・電子融合デバイス 矢花一浩 (筑波大学) 「第一原理計算に基づく光科学ソフトウェアSALMONの開発と応用」 | 13 |
| 15:35 - 15:55 | サブ課題C 超伝導・新機能デバイス材料 今田正俊 (早稲田大学) 「強相関電子系の超伝導、トポロジカル相」 | 15 |
| 座長: 赤井久純 (東京大学) | | |
| 15:55 - 16:15 | サブ課題D 高性能永久磁石・磁性材料 三宅 隆 (産業技術総合研究所) 「大規模シミュレーションと機械学習による永久磁石開発」 | 17 |
| 16:15 - 16:35 | サブ課題E 高信頼性構造材料 香山正憲 (産業技術総合研究所) 「金属材料の微細組織の高精度マルチスケール計算技術」 | 19 |
| 座長: 川島直輝 (東京大学) | | |
| 16:35 - 16:55 | サブ課題F 次世代機能性化学品 松林伸幸 (大阪大学) 「ポリマー系の物質分配と相溶性の全原子解析」 | 21 |
| 16:55 - 17:15 | サブ課題G 共通基盤シミュレーション手法 尾崎泰助 (東京大学) 「汎用第一原理大規模電子状態計算ソフトウェアOpenMXの開発と応用」 | 23 |
| 17:15 - 17:20 | 総括 高田 章 (ロンドン大学) クロージング 常行真司 (東京大学) | |
| 17:20 - 19:20 | 意見交換会 *計算物質科学の「見える化」技術を展示します。 | |

ポスターセッション

2019年8月9日(金)

会場:多目的スペース

サブ課題 **A** 高性能半導体デバイス

本紙掲載
ページ

| | | |
|-----------|--|----|
| A1 | RSPACE を用いた電子デバイス用高性能界面のデザイン 小野倫也 (神戸大学) | 27 |
| A2 | オーダー N 法第一原理計算による Si/Ge コアシェルナノワイヤの理論研究 宮崎剛 (物質・材料研究機構) | 28 |
| A3 | 転位および不純物がある GaN の第一原理計算とリーク電流モデルの構築 原嶋庸介 (名古屋大学) | 29 |
| A4 | 第一原理計算と熱力学的解析による GaN MOVPE 成長中の炭素取り込みの考察 大河内勇斗 (名古屋大学) | 30 |
| A5 | 第一原理計算による超格子型相変化メモリのスイッチング機構の考察 小川湧太郎 (名古屋大学) | 31 |
| A6 | 第一原理計算による GaN らせん転位中の Mg 不純物の研究 中野崇志 (名古屋大学) | 32 |
| A7 | 量子輸送デバイスシミュレータ開発 森 伸也 (大阪大学) | 33 |
| A8 | デバイスシミュレーションによる Si ナノシートトランジスタの解析 鎌倉良成 (大阪工業大学) | 34 |
| A9 | ナノスケールデバイスにおける離散不純物モデルの構築とその実装 吉田勝尚 (筑波大学) | 35 |

サブ課題 **B** 光・電子融合デバイス

本紙掲載
ページ

| | | |
|-----------|---|----|
| B1 | 第一原理計算によるシリコンの波数励起 野田真史 (筑波大学) | 36 |
| B2 | 大規模計算をもちいた極限パルス光・固体物質相互作用の第一原理シミュレーション 植本光治 (筑波大学) | 37 |
| B3 | A64FX プロセッサに対する電子動力学アプリケーション SALMON のコデザイン 廣川祐太 (筑波大学) | 38 |

サブ課題 **C** 超伝導・新機能デバイス材料

| | | |
|-----------|---|----|
| C1 | 第一原理ダウンフォールディング法と高精度量子多体計算手法を用いた銅酸化物高温超伝導体の解析 大越孝洋 (早稲田大学) | 39 |
| C2 | ボルツマン機械で迫る高温超伝導の起源 山地洋平 (東京大学) | 40 |
| C3 | 強相関トポロジカル物質の励起スペクトル 山地洋平 (東京大学) | 41 |
| C4 | テンソルネットワーク法の開発とキタエフスピン液体への適用 大久保毅 (東京大学) | 42 |
| C5 | パイロクロア格子上のイリジウム酸化物における量子スピン液体の数値的研究 Rico Pohle (早稲田大学) | 43 |

サブ課題 **D** 高性能永久磁石・磁性材料

| | | |
|-----------|--|----|
| D1 | ベイズ最適化を利用した高効率な結晶構造探索 佐藤 暢哉 (産業技術総合研究所) | 44 |
| D2 | 磁性材料の高性能化—大規模電子状態計算による探索 合田 義弘 (東京工業大学) | 45 |

サブ課題 **E** 高信頼性構造材料

本紙掲載
ページ

- E1** 大規模第一原理計算による鉄中の粒界特性の解明と機械学習との連携
徐 卓 (産業技術総合研究所) ————— 46
- E2** 第一原理(FP) フェーズフィールド(PF)法の開発
PHAM Thi Nu (横浜国立大学) ————— 47
- E3** 一方向凝固過程における柱状粒の競合成長:フェーズフィールド法による研究
Chunwen Guo (京都工芸繊維大学) ————— 48

サブ課題 **F** 次世代機能性化学品

- F1** 分子動力学シミュレーションを用いた長鎖高分子化学ポテンシャルの高速計算手法の開発
山田一雄 (大阪大学) ————— 49
- F2** 有機/無機界面シミュレータの接着への適用
浦長瀬正幸 (名古屋工業大学) ————— 50

サブ課題 **G** 共通基盤シミュレーション手法

- G1** 全電子 FLAPW 計算コード HiLAPW の開発
小口多美夫 (大阪大学) ————— 51
- G2** 不完全な実験データを用いたデータ同化による結晶構造探索
吉川誠司 (東京大学) ————— 52
- G3** 第一原理ベースの新 CALPHAD 相図計算手法の探索と開発
Theresa Davey (東北大学) ————— 53
- G4** コデザインに基づく数理アルゴリズムとライブラリの開発
星 健夫 (鳥取大学) ————— 54
- G5** 超並列 100 ナノメートル電子状態計算と有機デバイス材料研究の産業展開
星 健夫 (鳥取大学) ————— 55
- G6** 革新的表面構造解析に向けた超並列データ駆動科学と測定技術の融合
星 健夫 (鳥取大学) ————— 56
- G7** 大型実験施設との連携 — 強相関電子系・量子スピン系の磁気・電荷励起 —
遠山貴巳 (東京理科大学) ————— 57

口頭発表