

PCoMS シンポジウム
&
計算物質科学スパコン共用事業報告会

PCoMS Symposium

&

Keisan Busshitsu Kagaku Supakon Kyouyou Jigyou Houkokukai

会場：東北大学 片平キャンパス 片平さくらホール(宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1)
Venue : Katahira SAKURA Hall, Katahira Campus, Tohoku University (Sendai, Miyagi)

日時：平成 28 年 10 月 17 日 (月) 13 時—10 月 18 日 (火) 18 時

Date : October 17 (Mon.) 13:00 -October 18(Tue.) 18:00, 2016

共催：計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)
計算物質科学スパコン共用事業

—10月17日(月)—

12:30- 受付開始

13:00-13:20

開会挨拶

高梨 弘毅 東北大学 金属材料研究所 所長

来賓挨拶

唐沢 裕之 文部科学省 科学技術・学術政策局 人材政策課 人材政策推進室長

山本 恵司 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

—活動総括—

13:20-13:40

一年を経過して・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1

毛利 哲夫 (東北大学 コンソーシアム長)

13:40-13:55

PCoMS 東大拠点の活動報告・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 2

川島 直輝 (東京大学 運営協議会委員)

13:55-14:10

PCoMS 分子科学研究所活動報告・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 3

斉藤 真司 (分子科学研究所 次世代研究者育成委員会委員)

14:10-14:25

PCoMS 阪大活動報告・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 4

森川 良忠¹, 小口 多美夫², 下司 雅章³, 佐藤 和則^{1*}, 吉田 博⁴

(¹大阪大学大学院 工学研究科, ²大阪大学 産業科学研究所, ³大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター, ⁴大阪大学大学院 基礎工学研究科, *大阪大学 イノベーション創出人材育成委員会委員)

14:25-14:40 休憩

－招待講演セッション1－

14:40-15:10

【招待講演】ポスト「京」萌芽的課題

「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通じた極限の探求」・・・ 5

久保 百司（東北大学 金属材料研究所）

15:10-15:40

【招待講演】情報統合型物質・材料研究の課題・・・ 6

寺倉 清之（物質・材料研究機構）

15:40-15:55 休憩

－次世代研究者セッション1－

15:55-16:20

大規模電子状態計算手法の開発とスピントロニクス材料への応用・・・ 7

福島 鉄也¹, 吉田 博², 佐藤 和則³, 小倉 昌子⁴, Rudolf Zeller⁴, Peter. H. Dederichs⁴, Wei Zhang⁵, Riccardo Mazzarello⁵

(¹大阪大学 ナノサイエンスデザイン教育研究センター, ²大阪大学大学院 基礎工学研究科, ³大阪大学大学院 工学研究科, ⁴Forschungszentrum Juelich and JARA, ⁵RWTH Aachen University)

16:20-16:45

有機光デバイスの計算物質科学・・・ 8

藤田 貴敏（分子科学研究所）

16:45-17:10

「生体分子マシンにおける大規模機能ダイナミクスの

マルチスケール・シミュレーション」・・・ 9

岡崎 圭一（分子科学研究所）

17:10-18:40

ポスターセッション

18:55-20:55

懇親会

—10月18日(火)—

—計算物質科学スパコン共用事業セッション1—

9:00-9:25

**Multi-scale molecular simulation of perfluorosulfonic acid polymer membranes:
from atomistic to coarse-grained simulation 1 0**

An-Tsung Kuo, W. Shinoda, S. Okazaki

(Department of Applied Chemistry, Nagoya University)

9:25-9:50

包接水和物の分子シミュレーション 1 1

矢ヶ崎 琢磨, 松本 正和, 田中 秀樹 (岡山大学 異分野基礎科学研究所)

9:50-10:15

高並列化学反応シミュレーションプログラム

DC-DFTB-K の高機能化と CO₂分離回収過程への適用 1 2

西村 好史¹, 周 建斌¹, Sakti Aditya Wibawa², 中井 浩巳¹⁻⁴

(¹早稲田大学 理工学研究所, ²早稲田大学 先進理工学部, ³京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット, ⁴科学技術振興機構 戦略的創造推進事業)

10:15-10:30 休憩

—計算物質科学スパコン共用事業セッション2—

10:30-10:55

ナノ光応答理論に基づく光高機能物質の計算科学的設計 1 3

信定 克幸 (分子科学研究所)

10:55-11:20

非平衡強相関電子系のための時間依存多変数変分モンテカルロ法とその応用 . . . 1 4

井戸 康太, 大越 孝洋, 今田 正俊 (東京大学大学院 工学系研究科)

11:20-11:45

Fe 系材料の第一原理局所エネルギー・局所応力解析 1 5

香山正憲¹, Vikas Sharma¹, Somesh Kr. Bhattacharya^{1*}, 田中真悟¹, 椎原良典²

(¹産業技術総合研究所 電池技術研究部門, ²豊田工業大学, *現物質・材料研究機構)

11:45-13:40 昼休憩

—招待講演セッション2—

13:40-14:10

【招待講演】「ものづくり企業において博士研究者が活躍するしくみ作り」

—新日鐵住金のポスドク研究員制度— 16

村上 英樹（新日鐵住金株式会社 技術開発本部 プロセス研究所）

14:10-14:40

【招待講演】北海道大学、東北大学、名古屋大学による

連携型博士人材総合育成システムの構築 17

伴戸 久徳（北海道大学 人材育成本部）

14:40-14:55 休憩

—イノベーション創出人材セッション—

14:55-15:15

日本ゼオン株式会社様でのインターンシップ研修の活動報告 18

後藤 高彰¹，川勝 年洋¹，本田 隆²

（¹ 東北大学大学院 理学研究科，² 日本ゼオン株式会社 総合開発センター基盤技術研究所）

15:15-15:35

分散処理による機械学習の高速化 19

越智 裕紀（東京大学 物性研究所）

15:35-15:55

米国ローレンス・リバモア国立研究所でのインターンシップ報告 20

上村 直樹（大阪大学 産業科学研究所）

15:55-16:10 休憩

—次世代研究者セッション2—

16:10-16:35

**Development of Interatomic Potentials of Fe-C Binary System for
Atomistic Materials Design of New Heterogeneous Iron** 2 1

Tien Quang Nguyen^{1,2}, Kazunori Sato², Yoji Shibutani^{2,3}, Masaaki Sugiyama^{2,4}

(¹Institute for NanoScience Design, Osaka University, ²Graduate School of Engineering, Osaka University, ³Center for Atomic & Molecular Technologies, Osaka University, ⁴Nippon Steel & Sumitomo Metal Corporation)

16:35-17:00

大規模計算機用量子格子模型ソルバーHΦを活用した多体電子系の電子状態計算 2 2

吉見 一慶 (東京大学 物性研究所)

17:00-17:25

ソフトゆらぎの材料設計に向けた計算科学

— 低次元アモルファス系の巨大ゆらぎを例として 2 3

芝 隼人¹, 山田 泰徳^{1,*}

(¹東北大学金属材料研究所, *現中国・北京計算科学中心)

17:25-17:50

界面構造を利用した高温超伝導の最適化機構 2 4

三澤 貴宏 (東京大学 物性研究所)

17:50-18:00

全体に対する議論と総括

【PS1】 インターンシップ研修の活動報告

山崎 敏広 (東北大学 金属材料研究所)

【PS2】 Translocation of a droplet and a vesicle through a narrow hole across a membrane

P. Khunpetch¹, X. Man², T. Kawakatsu¹, and M. Doi²

(¹ Dept of Physics, Tohoku University, ² Center of Soft Matter Physics and its Applications, Beihang University)

【PS3】 MateriApps Project – Portal Site to Materials Science Simulation

本山裕一¹、笠松秀輔¹、加藤岳生¹、川島直輝¹、木ノ下良平²、土田成宏²、藤堂眞治^{3,4}、三澤貴宏¹、宮本能雄²、吉澤香奈子⁵

(¹ 東京大学 物性研, ² (株) 揚羽, ³ 東京大学院 理, ⁴ 物質・材料研究機構, ⁵ 高度情報科学技術研究機構)

【PS4】 二次元ハバード模型における d 波超伝導形成に対するフォノン協力機構

大越孝洋, 今田正俊 (東京大学大学院 工学系研究科)

【PS5】 混合 MC/MD 反応法による二次電池被膜形成過程の理論的解析

竹中 規雄^{1,2}、藤江 拓哉¹、高柳 昌芳^{1,3}、長岡 正隆^{1,2,3*}

(¹ 名古屋大学大学院 情報科学研究科, ² 京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット, ³ CREST-JST)

【PS6】 反応経路自動探索法と多変量解析を用いた銅クラスターの触媒活性予測と解析

岩佐 豪^{1,2}、小林 正人^{1,2}、佐藤 貴暁³、高 敏^{1,2}、高木 牧人³、Andrey Lyalin⁴、前田 理^{1,2}、武次 徹也^{1,2,4}

(¹ 北海道大学大学院 理学研究院, ² 京都大学 触媒・燃料電池元素戦略拠点, ³ 北海道大学大学院 総合化学院, ⁴ 物質・材料研究機構 ナノ材料科学環境拠点)

【PS7】 正方晶 $ZrO_2(101)$ 表面における水の構造と酸素還元反応活性

山本良幸, 杉野修 (東京大学 物性研究所)