

# 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2022

PCoMS Symposium & Annual Meeting of Supercomputing Consortium  
for Computational Materials Science 2022

2023年 2月13日 月 10:00-17:20 • 14日 火 10:00-15:50  
Feb.13(Mon.)10:00-17:20・Feb.14(Tue.)10:00-15:50, 2023

開催方式  
オンライン  
Online virtual  
meeting

|       |   |
|-------|---|
| 申込URL | <a href="http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-SCCMS-Sympo2022/">http://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R04/PCoMS-SCCMS-Sympo2022/</a> |
| 事前登録制 | 2023年2月9日(木)迄 Pre-registration required at the above URL by Feb. 9 (Thu.)   |
| 定員    | 100名 Capacity: 100 persons  |
| 参加料   | 無料 Registration fee : free  |



共 催 : 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS)  
Cohost Professional development Consortium for Computational Materials Scientists (PCoMS)  
計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業 (SCCMS)  
Supercomputing Consortium for Computational Materials Science (SCCMS)

協 賛 : 計算物質科学協議会 (CMSF)  
Cooperation Computational Materials Science Forum (CMSF)



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.

## 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 小谷 元子 理事・副学長(研究担当)  
東北大学 金属材料研究所 古原 忠 所長

Motoko KOTANI [Executive Vice President for Research, Tohoku University]  
Tadashi FURUHARA [Director, Institute for Materials Research, Tohoku University]

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  
Office of Human Resources Development for Science and Technology, Science and Technology Policy Bureau, Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT)

## 10:10-11:50 PCoMS活動報告セッション / PCoMS activity summary session

10:10-10:35 計算物質科学人材育成コンソーシアムの活動全体と次世代研究者育成事業  
: 研究分野コミュニティ主軸の多様性のある若手研究者支援の今後に向けて  
Activity overview of PCoMS and Next-generation researcher development program  
: Towards the future of diverse supporting young researchers based on research field communities

久保 百司 [東北大学]

Momoji KUBO [Tohoku University]

10:35-10:50 PCoMSイノベーション創出人材育成事業: 階層を超える人材の育成のための総合力養成支援

PCoMS Innovative professional development program: Supporting young researchers with pioneering innovation in academic and industrial fields

川勝 年洋 [東北大学]

Toshihiro KAWAKATSU [Tohoku University]

10:50-11:10 PCoMS東大拠点の活動報告: 社会的ニーズに応える人材育成

Annual Report of Activities of PCoMS UTokyo: Human resources development meeting social demands

川島 直輝 [東京大学]

Naoki KAWASHIMA [The University of Tokyo]

11:10-11:30 分子科学研究所におけるPCoMSの活動と今後: 分子シミュレーションおよび量子化学スクールによる人材育成

Activities and Future of PCoMS at IMS: Human resource development through molecular simulation and quantum chemistry schools

齊藤 真司 [分子科学研究所]

Shinji SAITO [Institute for Molecular Science]

11:30-11:50 大阪大学でのPCoMS活動報告 2015-2022と今後について: 計算機マテリアルデザインとHPC技術の教育・普及

PCoMS activity at Osaka University 2015-2022 + Future perspective: Education and dissemination of Computational Materials Design and HPC techniques

森川 良忠 [大阪大学]

Yoshitada MORIKAWA [Osaka University]

## 11:50-13:00 昼休憩 / Lunch break

## 13:00-13:50 招待講演セッション1 / invited talk session 1

13:00-13:50 非金属材料中の点欠陥を対象とした理論計算の進展

Advances in Theoretical Calculations for Point Defects in Nonmetallic Materials

熊谷 悠 [東北大学 金属材料研究所 教授]

Yu KUMAGAI [Professor, Institute for Materials Research, Tohoku University]

## 13:50-14:50 次世代研究者セッション1 / NPD session 1

13:50-14:10 Towards Materials Discovery using Universal Neural Network Potential and Ab-Initio Calculations

Nguyen Tien QUANG\*

[present: Shinshu University / former: Osaka University]

14:10-14:30 擬一次元分子性導体TM分子系における系統的な第一原理有効モデルに基づいた電子状態の解析

Analysis of electronic properties of quasi-one dimensional molecular conductor TM salts on the basis of ab-initio effective models

吉見 一慶\* [東京大学]

Kazuyoshi YOSHIMI\* [The University of Tokyo]

14:30-14:50 分子シミュレーションによる生体分子マシンの機能発現ダイナミクス解明

Elucidating dynamics of biomolecular machines in function by molecular simulation

岡崎 圭一\* [分子科学研究所]

Kei-ichi OKAZAKI\* [Institute for Molecular Science]

## 14:50-15:05 休憩 / break

## 15:05-16:05 次世代研究者セッション2 / NPD session 2

15:05-15:25 グリーン関数のゼロを用いたトポジカル状態の可視化

Visualization of topological states using zeros of Green functions

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]

15:25-15:45 光電変換過程の量子ダイナミクスと時間分解分光

Quantum Dynamics and Time-Resolved Spectroscopy of Charge Photogeneration Processes

藤田 貴敏\* [現: 量子科学技術研究開発機構、元: 分子科学研究所]

Takatoshi FUJITA\* [present: The National Institutes for Quantum Science and Technology / former: Institute for Molecular Science]

15:45-16:05 第一原理計算を用いた不規則系磁性材料の探索

First-principles materials design of disordered magnetic materials

福島 鉄也\* [現: 東京大学、元: 大阪大学]

Tetsuya FUKUSHIMA\* [present: The University of Tokyo / former: Osaka University]

## 16:05-16:20 休憩 / break

## 16:20-17:20 次世代研究者セッション3 / NPD session 3

16:20-16:40 ガラス的動力学への数値的アプローチ — シミュレーションからデータ駆動計算へ

Numerical Approaches to Glassy relaxation dynamics — from simulation to data-driven computing

芝 隼人\* [現: 東京大学、元: 東北大学]

Hayato SHIBA\* [present: The University of Tokyo / former: Tohoku University]

16:40-17:00 X線過渡吸収分光法によるX線光化学反応の実時間追跡を目指して

Toward realtime tracking of x-ray photochemistry via transient x-ray absorption spectroscopy

山崎 馨\* [現: 理化学研究所、元: 東北大学]

Kaoru YAMAZAKI\* [present: RIKEN / former: Tohoku University]

17:00-17:20 Thermodynamic modeling of liquid metal dealloying

Pierre-Antoine GESLIN\* [present: MATEIS Laboratory, INSA-Lyon / former: Tohoku University]

## 2月14日(火) / Feb.14(Tue.)

## 10:00-11:15 イノベーション創出人材育成対象者セッション / IPD session

10:00-10:25 PCoMS Program Experiences and the Computational Thermodynamic of Solid-state Materials

[present: National Institute for Materials Science (NIMS) / former: Tohoku University]

Arkapol SAENGDEEJING\*

10:25-10:50 IPD PCoMSでの活動並びに高分子シミュレーション研究について

Activity in IPD PCoMS Program and Simulation Research on Polymers.

保田 侑亮\* [現: 産業技術総合研究所、前: 東京大学]

Yusuke YASUDA\* [present: National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) / former: The University of Tokyo]

10:50-11:15 Elucidation of reaction mechanisms in NO<sub>x</sub> purification catalysts using knowledge gained from activity in PCoMS IPD Program

Thanh Ngoc PHAM\* [Osaka University]

## 11:15-12:05 招待講演セッション2 / invited talk session 2

11:15-12:05 古典コンピュータを用いた材料探索と量子コンピュータを用いた材料探索

Difference between materials exploration using a classical computer and a quantum computer

松下 雄一郎 [東京工業大学 物質・情報卓越教育院 特任准教授]

/ 株式会社Quemix 代表]

Yu-ichiro MATSUSHITA [Specially Appointed Associate Professor, Tokyo Tech Academy for Convergence of Materials and Informatics, Tokyo Institute of Technology / CEO, Quemix Inc.]

## 12:05-12:10 PCoMSの活動及びセッションに関する講評

12:05-12:10 講 評

山本 恵司 [JST 科学技術人材育成のコンソーシアムの構築事業 プログラム主管 / 千葉大学名誉教授]

Keiji YAMAMOTO [Program Officer, Japan Science and Technology Agency (JST) / Emeritus Professor, Chiba University]

## 12:10-13:10 昼休憩 / Lunch break

## 13:10-13:25 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

13:10-13:25 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

川島 直輝 [東京大学]

Naoki KAWASHIMA [The University of Tokyo]

## 13:25-14:05 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

13:25-13:45 第一原理計算と機械学習法による触媒構造探索と反応性解析

Elucidation of atomic structures and reactivities of heterogeneous catalysts using first-principles simulations combined with machine learning techniques

森川 良忠 [大阪大学]

Yoshitada MORIKAWA [Osaka University]

13:45-14:05 層状ペロブスカイト光触媒Y<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5</sub>S<sub>2</sub>における欠陥の第一原理解析

First-principles analysis of defects in layered perovskite photocatalyst Y<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>5</sub>S<sub>2</sub>

西口 和孝 [神戸大学]

Kazutaka NISHIGUCHI [Kobe University]

## 14:05-14:20 休憩 / break

## 14:20-15:40 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

14:20-14:40 TBA

斎藤 晋 [東京工業大学理学院]

Susumu SAITO [Tokyo Institute of Technology]

14:40-15:00 進化的アルゴリズムによる磁石化合物の探索

Exploration of magnetic compounds by evolutionary algorithm

石河 孝洋 [東京大学]

Takahiro ISHIKAWA [The University of Tokyo]

15:00-15:20 マテリアルズ・インフォマティクスを用いた光触媒材料開発への取り組み

Approaches to development of photocatalytic materials using materials informatics

原嶋 庸介 [奈良先端科学技術大学院大学]

Yosuke HARASHIMA [Nara Institute of Science and Technology]

15:20-15:40 全原子モデルを用いた分子動力学シミュレーションによる高分子ブレンド相溶性予測手法の開発

Chain-Increment Approach to the Mutual Miscibility of Polymers with All-Atom Molecular Simulation and a Solvation Theory

山田 一雄 [大阪大学]

Kazuo YAMADA [Osaka University]

## 15:40-15:50 クロージングアドレス / Closing address

Next Generation Professional Development (NPD) program: supporting the young researchers who lead the future global academic community

Innovative Professional Development (IPD) program: supporting the DC students, posdocs and fixed-term assistant professors who are pioneering innovation on diverse academic and industrial fields