

研究会報告

物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会 「計算物質科学の新展開」

物質設計評価施設 野口 博司

日時：2022年5月12日（木）13日（金）

場所：物性研究所本館 6階 大講義室(A632) ハイブリット開催

主催：東京大学物性研究所スーパーコンピュータ共同利用、計算物質科学研究センター

協賛：計算物質科学人材育成コンソーシアム PCoMS

所内組織委員：野口博司、尾崎泰助、川島直輝、杉野修、福島鉄也、井戸康太、河村光晶、春山潤、福田将大、森田悟史

所外組織委員：大場史康（東京工業大学）、小野倫也（神戸大学）、渡辺宙志（慶応義塾大学）、樋口祐次（九州大学）

物性研究所のスーパーコンピュータ共同利用の成果報告と計算物質科学研究センター(CCMS)のシンポジウムを合わせた物性物理の大規模計算に関する研究会をハイブリット形式で開催した。研究会では、特別招待講演2件、招待講演14件、32件のポスター発表が行われ、現地参加は5/12(木)30名、5/13(金)27名(計34名)、オンラインを含む全参加登録者137名(オンラインの最大同時接続者75名)の参加者があった。

招待講演は1名を除き現地発表で行い、ズームで同時配信を行った。ポスター発表はズームのブレイクアウトルームを用いたオンライン形式で行った。質疑応答では、現地参加者だけでなく、オンライン参加者からも多くの質問があり、活発な議論が行われた。

特別講演は最近注目されているマテリアルインフォマティクスについて、物質・材料研究機構の高野義彦先生と東京大学の渡辺悠樹先生にご講演していただいた。高野先生

には第一原理計算や機械学習と実験を効率的に組み合わせた新材料探索について、渡辺先生には対称性指標を用いたトポロジカル絶縁体・超伝導体物質探索について、わかりやすく説明していただいた。また、招待講演では、永久磁石から、複合酸化物材料、グラフェン、準結晶と幅広い対象について最近の研究が報告された。計算手法も第一原理計算や大規模分子動力学計算を始め、量子コンピューティングや機械学習と、幅広い手法において、最近の発展が報告された。

また、物性研スパコンの利用促進のためのソフトウェア高度化プロジェクトを平成27年度から物性研で行なっているが、今回は不規則系で配置サンプリングを実行するためのソフトウェアフレームワーク(abICS)と、量子格子模型のテンソルネットワーク法ソルバー(TeNeS)の開発について、笠松秀輔先生と森田悟史先生による講演が行われた。



5月12日(木)

13:00~13:10	開会挨拶	
13:10~13:35	赤井 久純 (東京大学)	座長 尾崎 泰助
	永久磁石材料の開発 — 第一原理電子状態計算の観点から	
13:35~14:00	新屋 ひかり (東北大学)	
	KKR 法に基づくスピントロニクス材料の理論研究	
14:00~14:25	笠松 秀輔 (山形大学)	
	On-lattice ニューラルネットワークモデルによる複合酸化物材料の第一原理基熱力学解析	
14:25~14:40	休憩	
14:40~15:30	高野 義彦 (物質・材料研究機構)	座長 野口 博司
	【特別講演】マテリアルズインフォマティクスを用いた新材料探索	
15:30~15:55	吉野 元 (大阪大学)	
	深層パーセプトロン学習における熱平衡化	
15:55~16:10	休憩	
16:10~18:10	ポスター発表 (ブレイクアウトルーム)	

5月13日(金)

10:00~10:50	渡辺 悠樹 (東京大学)	座長 川島 直輝
	【特別講演】対称性指標の方法のトポロジカル絶縁体・超伝導体物質探索への応用	
10:50~11:05	休憩	
11:05~11:30	御手洗 光祐 (大阪大学)	座長 杉野 修
	古典シミュレート可能性を用いた古典最適化変分量子アルゴリズム	
11:30~11:55	江上 喜幸 (北海道大学)	
	第一原理電子輸送特性計算の大規模化に向けた高速 Green 関数計算手法の開発と応用	
11:55~12:20	只野 央将 (物質・材料研究機構)	
	自己無撞着フォノン理論による構造相転移温度の第一原理計算	
12:20~13:30	昼食	
13:30~13:55	明石 遼介 (東京大学)	座長 河村 光晶
	高度電子状態計算における一様ガス極限	
13:55~14:20	丸山 実那 (筑波大学)	
	複合構造の低次元物質の物性制御	
14:20~14:45	竹森 那由多 (大阪大学)	
	ハイパーマテリアルにおける弱結合超伝導	
14:45~15:10	大槻 東巳 (上智大学)	
	ritical behaviors of the Anderson transitions in Hermitian and non-Hermitian systems	
15:10~15:25	休憩	
15:25~15:50	浅野 優太 (東北大学)	座長 春山 潤
	大規模分子動力学計算による複雑流体中のカルマン渦と音波伝播	
15:50~16:15	中野 裕義 (慶應義塾大学)	
	一様せん断流によって誘起される非平衡長距離相関の分子動力学シミュレーション	
16:15~16:40	森田 悟史 (東京大学)	
	量子格子模型のテンソルネットワーク法ソルバーTeNeS の開発	
16:40~16:45	閉会挨拶	

- P-01 小野 頌太 (岐阜大学) 動的安定な 2 次元規則合金の 3 次元積層構造も動的安定
- P-02 井戸 康太 (東京大学) 厳密対角化データベース COMPARED の構築
- P-03 Wei-Lin Tu (高麗大学) 磁場誘起で異方性を含む強磁性体の容易軸軟化
- P-04 乾 幸地 (東京大学) 自動微分を用いたハミルトニアン自動設計
- P-05 増木 亮太 (東京大学) 非調和フォノン理論に基づく有限温度における構造最適化
- P-06 岩本 晴道 (鳥取大学) 計測データ解析フレームワーク 2DMAT と 2 次元物質構造解析への応用
- P-07 池田 達彦 (東京大学) 固体における離散時間結晶の臨界性と安定性の解析
- P-08 内藤 翔太 (慶應義塾大学) 分子動力学シミュレーションによる共沸現象の解析
- P-09 菊地 駿太 (慶應義塾大学) 分子動力学を用いた界面張力における自然長依存性の調査
- P-10 春山 潤 (東京大学) Pt 表面の H₂O 吸着層構造の第一原理計算による解析
- P-11 中西 章尊 (山形大学) ニューラルネットワークポテンシャルを用いたジルコニウム酸窒化物と水界面の構造解析
- P-12 四辻 捷 (慶應義塾大学) 分子動力学シミュレーションの並列化におけるロードインバランスの改善
- P-13 飯倉 啓介 (慶應義塾大学) J₁-J₂ フラストレートイジング模型の非平衡緩和解析
- P-14 篠原 康 (東京大学) 高強度光で励起された半導体の電子エネルギー分布の第一原理計算
- P-15 Shibghatullah Muhammady (東京大学) Nitrogen doping and oxygen vacancy effect on the oxygen reduction reaction on monoclinic and tetragonal zirconia surfaces
- P-16 中西 亮 (東京大学) 結合分子を介したクロマチンのクラスター形成
- P-17 諏訪 秀磨 (東京大学) 有向ワームアルゴリズムの開発と古典スピン系への応用
- P-18 柿澤 文哉 (埼玉大学) カゴメ格子上の J₁-J₂ 古典 XY 反強磁性体における新奇相転移
- P-19 石井 浩平 (東京大学) Allen-Heine-Cardona 理論の拡張とバンドギャップ補正への適用
- P-20 Yuansheng Zhao (東京大学) Accelerating Simulated Annealing with Data Assimilation Application to Amorphous Ice
- P-21 品岡 寛 (埼玉大学) sparse-ir: sparse-modeling library for imaginary-time propagators
- P-22 天野 智仁 (東京大学) ルチル型 TiO₂ における格子誘電関数の第一原理的研究
- P-23 石川 卓門 (東京大学) 量子モンテカルロ法を用いたスピンホール磁気抵抗効果の数値計算
- P-24 鈴木 義和 (筑波大学) アルカリメタリン酸およびアルカリ土類メタリン酸化合物の振動スペクトル再評価
- P-25 谷 水城 (東京大学) Vlasov 方程式に基づく高強度レーザー下の金属電子ダイナミクスシミュレータ開発
- P-26 富山 翔平 (東京大学) 分子シミュレーションにおける自由エネルギー計算手法の再重プロセスの二次補間による改良
- P-27 松谷 健太 (山形大学) ニューラルネットワークポテンシャル分子動力学法を用いた GeO₂ ガラス圧力誘起構造転移の密度汎関数依存性
- P-28 河村 光晶 (東京大学) 感受率・遮蔽交換積分・スピン揺らぎ積分のウルトラソフト擬ポテンシャルへの拡張
- P-29 福田 将大 (東京大学) DFT による歪み下の Au₂S 単層の構造・物性の解析
- P-30 櫻井 理人 (埼玉大学) 量子古典融合アルゴリズムを用いた虚時間相関関数の計算
- P-31 片岡 佑太 (東京大学) 第一原理計算による水素の量子表面拡散の研究
- P-32 小田 竜樹 (金沢大学) スピントロニクス材料と磁気形状記憶合金の電子構造計算

