

# 計算科学研究センター・ナノテクノロジープラットフォーム事業合同ワークショップ —データ科学に基づく理論・計算科学と実験科学の協働を目指して—

## 開催概要

- 開催日: 2021年1月12日(火)～13日(水)
- 主催:
  - 分子科学研究所
  - 計算科学研究センター
  - ナノテクノロジープラットフォーム事業
- 開催方法: Zoom によるオンライン配信
- 参加費: 無料
- 定員: 500 名

近年、理論・計算科学分野ではデータ科学や機械学習に基づく新たな方法が進展し、マテリアルズインフォマティクス分野で

ポスター発表もオンラインにて実施します。ポスター発表では分子科学の幅広い研究分野からの発表を期待しています。

## プログラム(敬称略)

- 1日目(2021年1月12日(火))

|                 |         |       |
|-----------------|---------|-------|
| 13:30-<br>13:40 | 川合真紀 所長 | 開会の挨拶 |
|                 |         |       |

ナノプラット事業におけるデータ創出 [座長: 江原 正博 (計算科学研究センター・分子科学研究所) ]

|                 |                    |                                                |
|-----------------|--------------------|------------------------------------------------|
| 13:40-<br>14:20 | 横山 利彦<br>(分子科学研究所) | 「文科省ナノテクノロジープラットフォームの現状と次期マテリアルDXプラットフォームへの期待」 |
| 14:20-<br>15:00 | 古川 貢<br>(新潟大学)     | 「機能性物質の電子スピン共鳴研究の現状」                           |
| 15:00-<br>15:40 | 高見 剛<br>(京都大学)     | 「磁化計測技術による機能性材料の理解:マテリアルDXに基づいた材料探索に向けて」       |
| 15:40-<br>15:50 |                    | 休憩                                             |
|                 |                    |                                                |

ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクス [座長: 斎藤 真司 (分子科学研究所) ]

|                 |                  |                                                 |
|-----------------|------------------|-------------------------------------------------|
| 15:50-<br>16:30 | 金子 弘昌<br>(明治大学)  | 「ケモインフォマティクス・マテリアルズインフォマティクスにおける直接的モデル逆解析とその応用」 |
| 16:30-<br>17:10 | 袖山 慶太郎<br>(NIMS) | 「マテリアルズ・インフォマティクスによる蓄電池用電解液材料探索」                |

- 2日目(2021年1月13日(水))

## 電子状態理論・データ科学 [座長: 奥村 久士 (生命創成探究センター・分子科学研究所) ]

|                 |                   |                                       |
|-----------------|-------------------|---------------------------------------|
| 9:00-<br>9:40   | 森 寛敏<br>(中央大学)    | 「電子状態インフォマティクスによるイオン液体のガス分離/吸収特性最適化」  |
| 9:40-<br>10:20  | 畠中 美穂<br>(慶應義塾大学) | 「反応経路のデータベースと機械学習を用いる触媒・発光材料の理解・分子設計」 |
|                 |                   |                                       |
| 10:30-<br>12:00 |                   | ポスター発表                                |
| 12:00-<br>13:00 |                   | 昼食                                    |
|                 |                   |                                       |

## 電子状態理論・データ科学・De novo設計 [座長: 岡崎 圭一 (計算科学研究センター・分子科学研究所) ]

|                 |                    |                                                |
|-----------------|--------------------|------------------------------------------------|
| 13:00-<br>13:40 | 南谷 英美<br>(分子科学研究所) | 「電子フォノン相互作用の精密計算とその応用」                         |
| 13:40-<br>14:20 | 小林 正人<br>(北海道大学)   | 「量子化学計算とデータ科学の併用による触媒・表面吸着系の解析と予測」             |
| 14:20-<br>14:30 |                    | 休憩                                             |
| 14:30-<br>15:10 | 田代 基慶<br>(東洋大学)    | 「光学活性を持つ有機小分子のde novo設計」                       |
| 15:10-<br>15:50 | 藤波 美起登<br>(早稲田大学)  | 「運動エネルギー汎関数の開発、反応予測、反応条件最適化に対する量子化学計算と機械学習の応用」 |
| 15:50-<br>16:00 |                    | 閉会の挨拶                                          |

### ポスターセッション

2021年1月13日(水) 10:30-12:00

|   |                                                                                          |                                |
|---|------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|
| 1 | コンピューター化学による有機素反応の解析を通じた高分子合成反応の合理的設計                                                    | ○覚知 亮平、深澤 宏太、網井 秀樹<br>(群馬大院理)  |
| 2 | Electrostatic Potentials around the Proteins Crystallized by Ammonium Sulfate Preferably | ○郭艶 瞽良<br>西田紀貴 星野忠次<br>(千葉大院薬) |

|   |                                                                                            |                                                                                     |
|---|--------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| 3 | Analysis of binding modes of antigen-antibody complexes by molecular mechanics calculation | ○Xinyue Qiao,<br>Liang Qu, Fei Qi,<br>Noritaka Nishida,<br>Tyuji Hoshino<br>(千葉大院薬) |
| 4 | 分子の電気伝導現象における電子テンション密度のスピン依存成分に関する理論的研究                                                    | ○吉田如寛,<br>瀬波大士 (京大院工)                                                               |

## ポスター発表の形式について

mattermost を用いたテキストチャット形式で行います。slack と似たような感覚で操作ができます。

Zoom (無料版を含む), Webex

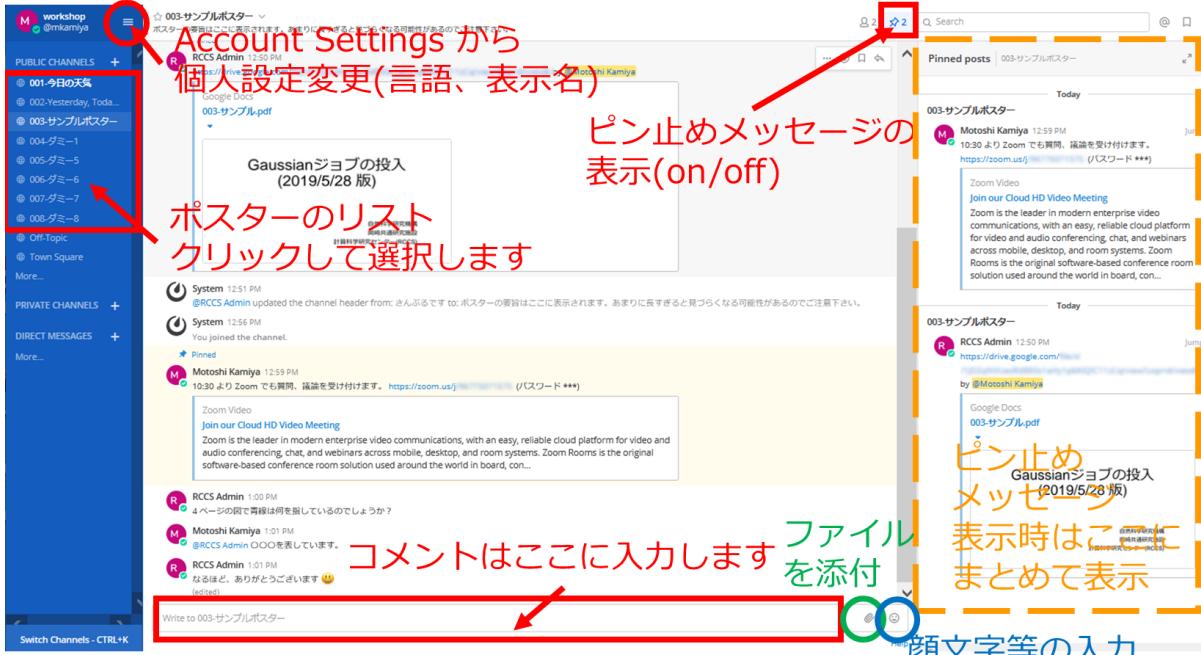
等のソフトの併用も推奨しています。事前に撮影した発表のムービーなどについても積極的にご活用ください。

指定されたチャンネルにリンクを投稿するなどして、情報の周知をお願いします。

- 画面イメージ

The screenshot shows the mattermost application interface. On the left is a sidebar with channels: 'PUBLIC CHANNELS' (001-今日の天気, 002-Yesterday, Today..., 003-サンプルポスター, 004-ダミー1, 005-ダミー5, 006-ダミー6, 007-ダミー7, 008-ダミー8, Off-Topic, Town Square, More...); 'PRIVATE CHANNELS' (DIRECT MESSAGES, More...); and 'Switch Channels - CTRL+K'. The main area shows a '003-サンプルポスター' channel with pinned posts. One pinned post is a Google Doc titled '003-サンプル.pdf' containing a Gaussian job input file. Another pinned post is a Zoom video invitation. The channel has messages from 'RCCS Admin' and 'Motoshi Kamiya' about the poster and a Zoom link. A message input field at the bottom is ready for a new message.

## 操作方法について



Account Settings 画面



- システム言語の切り替えは左上にある設定中、[Display]項目の一一番下にある[Language]から変更できます
- URL をコメントとして入力すると自動的にリンクになります
  - 画像等の場合はプレビューが表示されることもあります
  - Zoom や YouTube 等の URL もそのまま貼り付けてもらえば大丈夫です
- @ を入力することでメンションを飛ばすことができます(@ を入力すると補助用のサブウインドウが開きます)
- わからない点がありましたら mattermost 内に用意した Help 用チャンネルでおたずねください。

???????

- ポスター本体(pdf 形式)は参加登録時にアップロードいただく必要があります。ファイルサイズは 10 MB 以内でお願いします。
  - (10 MB)
 

以上のファイルがどうしても必要な場合や複数ファイルを使いたい場合等ありましたらページ一番下のメール
- ポスターはダウンロード、印刷ができない形で公開します。

- ポスターはモニターで閲覧することになります。プロジェクトを使ってプレゼンをする場合と同様のスタイルでポスターを表示することができます。
  - また、ページ番号や図表の番号を適宜加えるなどすると、議論の際に便利かもしれません。
- ログイン名、パスワードについては後日メールにて案内します。
- チャットサイトはポスター開始時間より前に公開されます。また、会議終了後も1月中は閲覧可能とする予定です。
- 未登録ユーザーの招待はできません。

## 参加登録

申し込み締切 2021年1月5日(火)

<https://registration.ims.ac.jp/scws2020> にて登録下さい。

ポスター発表をされる場合には、登録時に pdf 化したポスター本体のアップロードが必要です。

## お問い合わせ

自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター

愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地

TEL:0564-55-7462 FAX:0564-55-7025

Email : scws2020\_at\_ims.ac.jp (\*メールアドレス内の\_at\_は@に直してお送りください。)