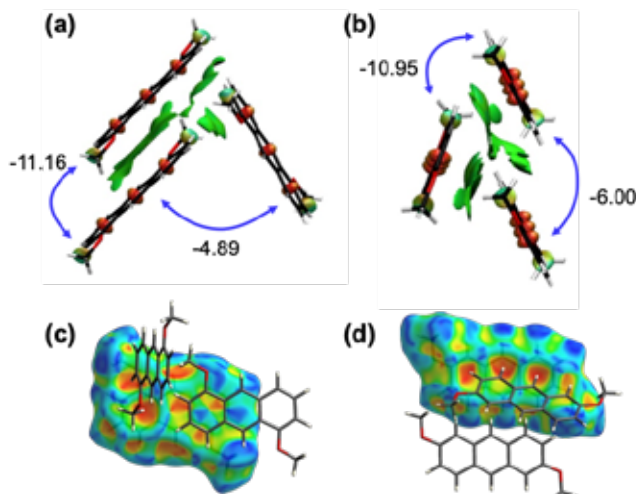


# 計算材料学センターだより



■ Regioselective methoxylation on anthracene enabling to control the packing structure in the solid state

## CONTENTS

- ・ コンパイラ、ライブラリのインストール
- ・ アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ
- ・ アクセラレータサーバにおける共有キューのサービス
- ・ GPGPU 移植サービスの成果
- ・ スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果
- ・ SC20 に本センター技術職員が参加
- ・ パンフレットが新しくなりました
- ・ オンラインパンフレットを作成しました
- ・ 新型コロナウイルス感染症対策
- ・ 見学の受け入れ状況

## 表紙の図について

### ■ Regioselective methoxylation on anthracene enabling to control the packing structure in the solid state

Prediction and control of crystal structures of organic molecules has been considered challenging and formidable, as energetically weak and competitive intermolecular interactions interplay unpredictable manner. Artificial control of packing structures of organic molecules have been thus highly desired, especially in the field of organic materials chemistry. We took an anthracene core, known as a key building block for organic semiconductors, and carried out a systematic study of packing structures of a series of dimethoxy derivatives by experimental and theoretical approaches.

Single-crystal X-ray analyses revealed that the packing structures of dimethoxyanthracenes are classified into two types, a “pitched  $\pi$ -stack” and a “herringbone packing” depending on the position of the methoxy groups. Effects of the substitution position on intermolecular interactions were then theoretically analyzed; noncovalent intermolecular interaction (NCI) method (a and b) and Hirshfeld surface analysis (c and d for 1,5- and 2,6-derivative, respectively) showed that the methoxy groups induce attractive interaction towards the  $\pi$ -surface of the adjacent anthracene core and disrupting the existing intermolecular interactions in the parent system. Furthermore, symmetry-adapted perturbation theory (SAPT) method embedded in the Psi4 program package demonstrated that the intermolecular dispersion force (the numbers in a and b, kcal/mol) is the major attractive force and the local intermolecular stabilization induced by the methoxy group determine the overall packing structure.

□ K. Takimiya, T. Ogaki, C. Wang, and K. Kawabata, Chem. Asian J., **15** (2020), pp: 915-919.

## コンパイラ、ライブラリのインストール

### アクセラレータサーバ

#### 1. PGI コンパイラ

PGI コンパイラ 20.4 をインストールしました。

使用方法は以下のマニュアルの 5.1.2 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

## アプリケーションのインストールおよびバージョンアップ

### 大規模並列計算サーバ

#### 1. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP をバージョン 6.1.1 にバージョンアップしました。VASP では様々な系に対して、密度汎関数理論に基づく電子状態計算を高速で行うことができ、構造最適化・応答関数・化学反応などの計算も可能です。

Wannier90 をリンクした実行モジュールも利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.6 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.vasp.at/>

#### 2. Elk

全電子計算法に基づく第一原理計算アプリケーションである Elk のバージョン 6.8.4 をインストールしました。Elk ではバルク・表面・磁性体などの系の高精度な密度汎関数計算が可能であり、LDA+U 法、スピン軌道相互作用・ノンコリニア磁性の評価、フォノン計算などに対応しています。

実行方法は以下のマニュアルの 6.20 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

Elk の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://elk.sourceforge.net/>

### 3. WIEN2k

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである WIEN2k のバージョン 19.2 をインストールしました。WIEN2k では、(L)APW+lo 法を用いた高精度のバンド構造計算をすることが可能です。また、相対論効果を考慮した全電子計算をすることが可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.7 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

WIEN2k の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://susi.theochem.tuwien.ac.at/>

### 4. QUANTUM ESPRESSO

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである QUANTUM ESPRESSO のバージョン 6.6 をインストールしました。QUANTUM ESPRESSO では全エネルギーや構造最適化計算をすることが可能です。また、フォノンや X 線吸光スペクトルなどを求めることも可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.11 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

QUANTUM ESPRESSO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.quantum-espresso.org/>

### 5. OpenMX

原子局在基底と擬ポテンシャルを用いた第一原理計算プログラムである OpenMX のバージョン 3.9.2 をインストールしました。密度汎関数理論に基づき、高速かつ高精度な電子状態計算をすることが可能です。大規模系に対して分子動力学計算や構造最適化を速やかに実行することも可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.13 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

OpenMX の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.openmx-square.org/>

### 6. SALMON

時間依存密度汎関数理論に基づく実時間・実空間グリッド法を用いた光励起電子ダイナミクスシミュレータである SALMON のバージョン 2.0.0 をインストールしました。線形光応答、パルス光による非線形光応答を計算可能であり、数千原子からなる超並列大規模計算も可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.22 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

SALMON の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://salmon-tddft.jp/>

## 7. Wannier90

VASP や QUANTUM ESPRESSO などの第一原理計算アプリケーションの計算結果から最局在ワニエ関数 (MLWF) を求めるプログラムである Wannier90 のバージョン 1.2、2.1.0、3.1.0 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 6.24 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

Wannier90 の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.wannier.org/>

## 8. ADF

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである ADF を 2019.304 にバージョンアップしました。ADF は相対論効果を含めることができ、遷移金属や重元素を取り扱うことが可能です。また、構造最適化や遷移状態計算、IR スペクトルや紫外・可視吸光スペクトル、NMRなどを求めることも可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.3 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

ADF の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.scm.com/>

## 9. QuantumATK

非平衡グリーン関数法による電子輸送計算アプリケーションである QuantumATK を 2020.9 にバージョンアップしました。QuantumATK では半経験的もしくは第一原理的手法により、材料の電気伝導特性を計算することが可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.5 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/supercomputer_manual_jp.pdf)

QuantumATK の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk.html>

## アクセラレータサーバ

### 1. Materials Studio

分子構造や結晶構造の持つ特性と挙動の関係を予測するための総合的なモデリング・シミュレーション環境である Materials Studio のバージョン 2020 をインストールしました。本センターでは CASTEP、DMol3 などの計算パッケージが利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.11 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

Materials Studio の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://accelrys.co.jp/products/collaborative-science/biovia-materials-studio/>

## 2. VASP

PAW 型擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算パッケージである VASP のバージョン 6.1.1 をインストールしました。

Wannier90 をリンクした実行モジュールも利用可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 6.2 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

VASP の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.vasp.at/>

## 3. WIEN2k

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである WIEN2k のバージョン 19.2 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 6.7 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

WIEN2k の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://susi.theochem.tuwien.ac.at/>

## 4. QUANTUM ESPRESSO

密度汎関数理論に基づく第一原理計算アプリケーションである QUANTUM ESPRESSO のバージョン 6.6 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 6.3 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

QUANTUM ESPRESSO の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.quantum-espresso.org/>

## 5. Wannier90

VASP や QUANTUM ESPRESSO などの第一原理計算アプリケーションの計算結果から最局在ワニエ関数 (MLWF) を求めるプログラムである Wannier90 のバージョン 1.2、2.1.0、3.1.0 をインストールしました。

実行方法は以下のマニュアルの 6.12 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

Wannier90 の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<http://www.wannier.org/>

## 並列計算・インフォマティクスサーバ

### 1. ANSYS Mechanical CFD

有限要素法による解析ツールである ANSYS Mechanical CFD を 2020R1 にバージョンアップしました。

実行方法は以下のマニュアルの 4.1.9 章および 4.2.4 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf)

ANSYS の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.ansys.com/>

### 2. ADF-GUI

ADF 用のグラフィカルユーザインターフェースである ADF-GUI を 2019.304 にバージョンアップしました。ADF-GUI では、エネルギー準位図や 3 次元データの等値面に加え、分子の振動モードなどのアニメーションを簡単に表示することができます。

実行方法は以下のマニュアルの 4.1.2 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf)

ADF-GUI の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.molsis.co.jp/materialscience/ams/adf-gui/>

### 3. Mathematica

技術計算システム Mathematica を 12.1.1 にバージョンアップしました。Mathematica では幅広い分野の技術計算に加え、機械学習や画像処理などにも対応しており、計算結果の可視化も可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 4.2.3 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf)

Mathematica の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.wolfram.com/mathematica/>

### 4. AVS/Express

汎用 3 次元可視化ソフトウェアである AVS/Express を 8.5 にバージョンアップしました。

実行方法は以下のマニュアルの 4.1.4 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf)

AVS/Express の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.cybernet.co.jp/avs/products/avsexpress/>

## 5. QuantumATK NanoLab

QuantumATK 専用グラフィカルユーザーインターフェースである QuantumATK NanoLab を 2020.9 にバージョンアップしました。QuantumATK NanoLab では、分子や材料のモデルをグラフィカルに作成できるほか、3次元データの可視化なども可能です。

実行方法は以下のマニュアルの 4.1.5 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf)

QuantumATK NanoLab の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://www.synopsys.com/ja-jp/silicon/quantumatk/resources/features.html#nanolab>

## 6. MATLAB

数値解析アプリケーション MATLAB を R2020a にバージョンアップしました。MATLAB では数値線形代数の計算が対話的に行えるほか、データの前処理や可視化、モデリングなど、データ解析のための様々な機能を利用できます。

実行方法は以下のマニュアルの 4.2.5 章をご覧ください。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/informaticsserver_manual_jp.pdf)

MATLAB の詳細については、以下の Web サイトをご覧ください。

<https://jp.mathworks.com/products/matlab.html>



スーパーコンピューティングシステム利用研究成果報告書 第 25 巻表紙



## アクセラレータサーバにおける共有キューのサービス

アクセラレータサーバ CS-Storm は、1 ノードの中に 10 基の NVIDIA V100 が搭載されています。マルチ GPU 対応のアプリケーションでは、この 10 基の GPU を利用した高速計算が可能ですが、マルチ GPU 非対応のアプリケーションや自作プログラムのジョブにおいては、ノード内の GPU を 1 基のみ利用し、他の 9 基については利用されない状態となっておりました。そこで、リソースの効率的な利用促進のため、共有キュー CA\_001 および CA\_001g を作成しました。図 1 に示すように共有キューでは、ノードを他のジョブと共有で使用します。これにより、ノード内の GPU に効率よくジョブが割り当てられ、また、要求リソースが少ないジョブに関してはスループットが向上し実行されやすくなります。

ジョブはデフォルトで 1CPU、1GPU が割り当てられます。qsub コマンドのオプションで最大で 18CPU、5GPU まで使用可能です。また、インタラクティブモードでの利用も可能です。

詳細な利用方法については、アクセラレータサーバの利用マニュアル「4.1.4 共有キュー CA\_001・CA\_001g へのジョブ投入方法」をご覧ください。

アクセラレータサーバマニュアル URL

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver\\_manual\\_jp.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/manual/pdf/acceleratorserver_manual_jp.pdf)

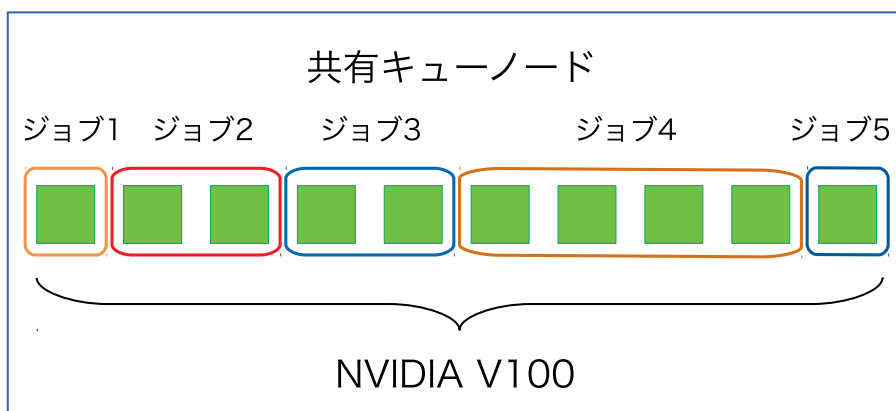


図 1: 共有キューの GPU 利用状況のイメージ

## GPGPU 移植サービスの成果

計算材料学センターでは 2019 年度よりアクセラレータサーバの有効利用を目的として、「GPGPU 移植・高速化支援サービス」を実施しています。このサービスでは、申請者が独自に開発した並列化済みのプログラムで、GPGPU への対応による性能向上が見込まれるものに対して、GPGPU への移植・チューニング（OpenACC/CUDA 化、CUDA 対応ライブラリへの接続など）を行っています。申請は公募制となっており、計算材料学センターで審査を行って採択の可否を判断させていただき、年間最大 2 件を採択しています。2019 年度は 3 件の申請があり、1 件を採択しました。2020 年度は 2 件の申請があり、2 件を採択しました。

2019 年に採択した連続時間モンテカルロ法のプログラムでは、ホットスポットとなっていた関数の最も処理が重いループ部分を CUDA 化し、CPU メモリと GPU メモリ間のデータ通信処理を削減することにより、コアルーチンの性能が約 9 倍向上しました。申請者の方からは大変有益な結果との評価をいただきました。

2020 年度の募集は終了いたしました。来年度も引き続き公募する予定ですので、ご希望の方はぜひご検討いただければ幸いです。詳細につきましては、以下のサイトをご覧ください。

GPGPU 移植・高速化支援サービス：

<https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/service/gpgpu.html>

## スーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」による成果

「MASAMUNE-IMR」を活用した研究成果である「精密な微小機械システムの材料の摩耗量予測式を提案」が、令和2年12月8日に東北大学からプレスリリースされました。

東北大学金属材料研究所の久保百司教授、王楊助教（現：東北大学大学院工学研究科）、東北大学大学院工学研究科の足立幸志教授、および中国上海海洋大学の許競翔副教授のグループは、当センターのスーパーコンピュータ「MASAMUNE-IMR」を活用し、微小機械システムの摩耗メカニズムを明らかにするとともに、その知見に基づき微小機械システムに対する摩耗量の予測式を世界で初めて提案しました。

詳細については、下記の Web サイトをご参照ください。

東北大学 Web サイト

<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2020/12/press20201208-03-masamune.html>

金研 Web サイト

<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1288.html>

また、上記のプレスリリースは、令和2年12月7日に上記の研究成果に関する論文が、Advanced Science 誌に掲載されたことにもとづき行われたものです。

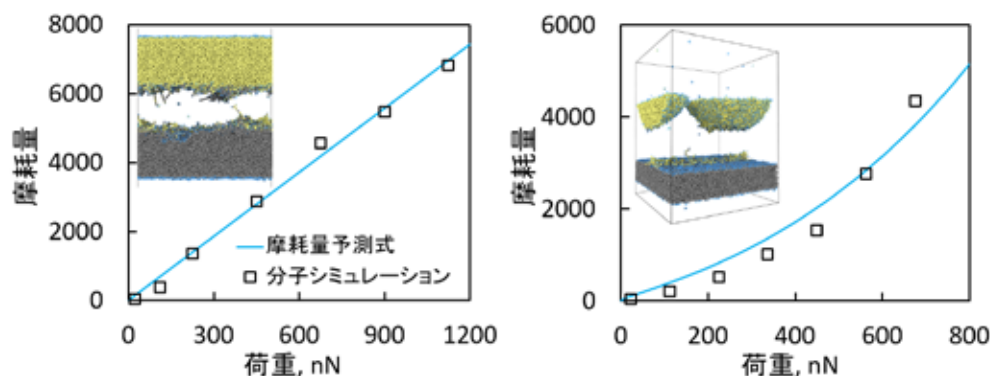
Advanced Science 誌の Web サイト

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/advs.202002827>

このプレスリリースを受けて、令和2年12月8日の日本経済新聞電子版などの複数のメディアで、本研究成果が紹介されました。

日本経済新聞電子版の Web サイト

[https://www.nikkei.com/article/DGXLRSP601391\\_Y0A201C2000000/](https://www.nikkei.com/article/DGXLRSP601391_Y0A201C2000000/)



ダイヤモンドライクカーボンの摩耗量の荷重依存性を、摩耗量予測式（青線）と分子動力学シミュレーション（黒四角形）を用いて求めた結果の比較。

左図は粗い平板同士の摩擦過程、右図はボールオンディスクの摩擦過程の結果を示し、粗い平板同士の摩耗量が示す線形の荷重依存性とボールオンディスクの摩耗量が示す非線形の荷重依存性の両方について、本研究で提案した摩耗量予測式の結果は、分子動力学シミュレーションの結果を的確に再現している。

## SC20 に本センター技術職員が参加

2020年11月9日（月）から19日（木）に開催されたSC20（Supercomputing Conference 2020）に、佐藤和弘技術職員、五十嵐伸昭技術職員、中野倭太技術職員が参加しました。SCは毎年行われるハイパフォーマンスコンピューティング・ネットワークング・ストレージ分野における世界最大の国際会議です。このカンファレンスは各国企業、大学、研究所からの発表や展示で構成されています。今年は新型コロナウイルスの感染拡大を受けバーチャル開催となりましたが、305以上の企業・団体による出展がありました。

本センターは、スーパーコンピューティングシステムおよび本センターの共同利用施設としての役割の紹介、そしてスーパーコンピューティングシステムを利用して得られた研究成果のポスター展示を行いました。また、企業や他大学の展示ブースへ訪問して最新システムの情報収集などを行いました。

今年は昨年に引き続きAI関連の展示が中心であり、またAMDやFujitsu、Intel、NVIDIAといったメーカーの最新のプロセッサや、それらを搭載したサーバなどの展示も見られました。完全オンラインでの開催でしたが、ライブストリーミングによる講演やビデオチャットによる問い合わせ対応など、各社工夫を凝らしたブース展示を行っていました。



自席からSC20の動画を視聴している中野倭太技術職員



SC20WebサイトTOP（左）と東北大学展示サイト（右）

## パンフレットが新しくなりました

2020年版の計算材料学センターパンフレットが完成いたしました。

MASAMUNE-IMR を利用して得られた最新の研究成果4件を掲載しています。

<研究成果タイトル>

- ダイヤモンドライクカーボンの摩耗メカニズムの解明とそれに基づく高耐久性ダイヤモンドライクカーボンの設計指針の提案
- $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$  システムにおける陰イオンの回転再配向運動と  $\text{Li}^+$  イオン伝導：分子動力的研究
- 結晶構造制御を実現するアントラセンの位置選択的メトキシ化
- FCC ハイエントロピー合金  $\text{FeCrNiCoAl}_{0.36}$  におけるナノ変形双晶過程のシミュレーション

・ダウンロード版（PDF版）

当センターのホームページの広報・公開情報より、ご覧いただけます。

[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public\\_info/pdf/2020/pamphlet\\_2020\\_JP.pdf](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/pdf/2020/pamphlet_2020_JP.pdf)

・冊子版（A4冊子）

冊子版のパンフレット（A4冊子）は配布も可能です。

また、パンフレットの郵送をご希望の場合は、返信用封筒（角2：A4版が入るサイズ）に切手140円分を貼り、返信先を明記した封筒を下記宛先までお送りください。

多くの冊数をご希望の場合は、別途お問い合わせください。

宛先：980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1 計算材料学センター パンフレット担当

## オンラインパンフレットを作成しました

計算材料学センターのパンフレットを、タブレットやスマートフォンでも閲覧いただけるように、オンラインパンフレットを作成いたしました。

当センターのスーパーコンピューティングシステム "MASAMUNE-IMR" のオンラインでの見学などで活用していただけます。

スマートフォンやタブレットの方は、右のQRコードからご覧いただけます。



[https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public\\_info/pamphlet.html](https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp/public_info/pamphlet.html)

## 新型コロナウイルス感染症対策

新型コロナウイルスの感染症対策につきまして、計算材料学センターでの取り組みを時系列に沿ってご紹介します。

### ■ 4月上旬～

センター教職員のテレワーク移行  
PCの確保とVPNの申請を早急に行い、テレワーク環境を整えました。職員1名のみ出勤体制とし、基本的にテレワークでの勤務としました。

### ■ 4月20日～

緊急事態宣言発令・金属材料研究所BCPレベル4への引き上げに伴い、完全にテレワーク体制としました。  
教職員間の連絡はメール・Slackで行い、対面での接触を一切行わないようにしました。

### ■ 6月1日～現在 ※12月21日時点

東北大学のBCPレベル緩和に合わせ、出勤とテレワークを併用して対応しています。  
出勤時は時差出勤や自家用車での通勤を一部実施し、教職員全員がマスクを着用しながら勤務しています。

各教職員のデスクにアクリルパーテーションを設置し、飛沫感染防止を行ったり（写真1）、窓やドア入り口付近にサーキュレーターを設置し、換気した空気が滞留せず、循環する仕組みをつくっています。（写真2）

5名以上の会議は対面では行わず、Zoom等のWeb会議ツールを使って行っています。  
プリンター等の多数の人が触れる共用部分のアルコール消毒を毎日行い、外出後やトイレ後は液体せっけんによる手洗いもしくはアルコール消毒を徹底。昼食は個々人で取るようにしています。

この他、毎日の行動記録・体調報告をしており、体調が良くない場合にはテレワークでの対応を取っています。公私を問わず、県外への移動があった場合には計算材料学センター内で報告し、都道府県ごとの10万人当たりの週間新規感染者数が15人以上の地域については帰還後に1週間のテレワークを行うことを義務付けています。

計算材料学センターでは、日々変わっていく状況に臨機応変に対応し、引き続き感染防止策を徹底して参ります。



写真1：アクリルパーテーションの設置



写真2：サーキュレーター

## 見学の受け入れ状況

計算材料学センターでは、豊かで暮らしやすい未来社会の創造、エネルギー問題・環境問題への対応、持続可能な安全・安心社会の構築など人類が直面している課題の解決に向けて、スーパーコンピュータによるアプローチの重要さと計算科学の発展における計算材料学センターの存在意義を伝えていくため、関係する学内外の研究者や海外からの来訪者のみならず、未来を担う中高生への科学への興味の一助や一般公開の見学を通じた上述の理解のため、計算材料学センター発足当時から継続して見学の受け入れに力を入れてきました。

しかし、このコロナ禍において、3月より現在に至るまで見学の受け入れを中断しており、今後の見通しも立たないため、今年度の見学再開は難しい状況です。

計算材料学センターでは職員一同、事態の収束を願い、収束後にはスーパーコンピュータが拓く未来社会創造への研究支援について伝えるために、また多くの方に見学をしていただけるようになる日が早く来ることを望んでいます。

今後ともどうぞご支援をよろしくお願いいたします。



計算材料学センターだより No.34

2020年12月21日 発行

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター



**CCMS**

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター  
Center for Computational Materials Science

TEL (022) 215 - 2411

URL <https://www.sc.imr.tohoku.ac.jp>

E-mail [ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp](mailto:ccms-adm@imr.tohoku.ac.jp)