

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2013

2013年9月2日(月)

学術総合センター(竹橋) 2F 一橋大学 一橋講堂 中会議場

物質・材料研究機構(NIMS)では東京大学生産技術研究所革新シミュレーションセンターと協力して、ナノ物質・材料、次世代半導体、有機・バイオ分子などの研究開発のために、第一原理電子状態計算を中心とする物性解析、機能解析、大規模解析、マルチスケール解析等のシミュレーションソフトウェアの開発を進めています。これらのソフトウェアは一般に公開され多くのユーザに利用されています。

ソフトウェアの今後の更なる発展のために、ユーザ同士およびユーザ・開発者間の情報交換の場として、ユーザコミュニティのためのポータルサイトを公開・運用しております。このユーザコミュニティの形成、ユーザとの交流の一環として、研究開発の発表・討論の場として、2011,2012年に引き続き、NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2013を開催いたします。本ワークショップでは、NIMSナノシミュレーション・ソフトウェアに関連する研究トピックス、プログラム開発・研究支援、連携研究などの講演を行います。

ご関心をお持ちの多くの方にご参加いただきますよう、ご案内申し上げます。

主催 独立行政法人物質・材料研究機構

理論計算科学ユニット

高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム

HPCI戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」

次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発

後援 国立大学法人 東京大学 生産技術研究所

革新的シミュレーション研究センター

協賛

日時 2013年9月2日(月) 10:30-16:40

会場 学術総合センター(竹橋) 2F

一橋大学 一橋講堂 中会議場

東京都千代田区一ツ橋2-1-2

<http://www.hit-u.ac.jp/guide/other/pdf/access.pdf>

参加費 無料

参加申込 ワークショップHPより申し込みください

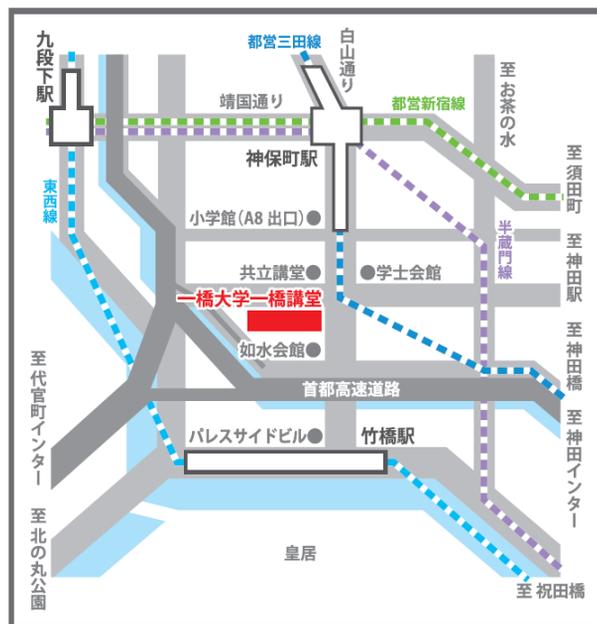
<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2013>

(会議当日も受付にて参加可能です)

問合せ先 物質・材料研究機構 理論計算科学ユニット

[nano\\_ws@nims.go.jp](mailto:nano_ws@nims.go.jp)

ポータルサイト <https://azuma.nims.go.jp>



# NIMSナノシミュレーションワークショップ2013 プログラム

## はじめに (10:30 - 10:35)

- 10:30-10:35 ご挨拶  
大野隆央 (物材機構、東大生産研)

## PHASEの紹介 (10:35 - 11:15)

- 10:35-11:15 PHASE-SYSTEMの概要・基本機能の紹介及び開発状況  
奈良純 (物材機構)

## 研究トピックス (11:15 - 12:35)

- 11:15-11:35 Si(110)表面の五員環構造の起源について  
山崎隆浩 (物材機構)
- 11:35-11:55 First-principles DFT calculations of the SiC surface electronic states  
小山洋 (物材機構)
- 11:55-12:15 グラフェンと金属電極間の電気伝導計算  
金子智昭 (物材機構)
- 12:15-12:35 ヨウ素ドーブしたリチウムフタロシアニンの電子状態  
小田将人 (和歌山大学)

(昼食休憩: 12:35 - 13:35)

## 研究トピックス (13:35 - 15:15)

- 13:35-14:15 Si/SiO<sub>2</sub>界面・絶縁膜の欠陥と電子移動度・酸化膜信頼性への影響  
— 欠陥生成機構の理解と絶縁膜高性能化 —  
加藤弘一 (東芝)
- 14:15-14:35 有機半導体の移動度計算  
小林一 (ソニー)
- 14:35-14:55 Tiアパタイトの構造と光触媒特性  
塚田峰春 (富士通研)
- 14:55-15:15 水素化した炭素ナノ物質の電子状態  
斎藤峯雄 (金沢大学)

(休憩: 15:15 - 15:35)

## プログラム開発・研究支援 (15:35 - 15:55)

- 15:35-15:55 ソフトウェアベンダーの取り組み — PHASEの完成度向上を目指して —  
宇佐見護 (アスミス)
- 15:55-16:15 計算物性(計算事例)データベース、ポータルサイトの構築  
西川宜孝 (みずほ情報総研)

## 総合討論 (16:15 - 16:35)

- 16:15-16:35 【総合討論】PHASEへの要望・質問、各講演への質問など  
司会: 奈良純 (物材機構)

## おわりに (16:35 - 16:40)