

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2014

2014年9月29 (月)

学術総合センター 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、2011, 2012, 2013年に引き続き、NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2014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報告、計算事例紹介、研究速報、現状報告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 日本表面科学会

日時 2014年9月29日(月) 10:00 - 16:25

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/hall/file/menu-016/file\\_01.pdf](http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file_01.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

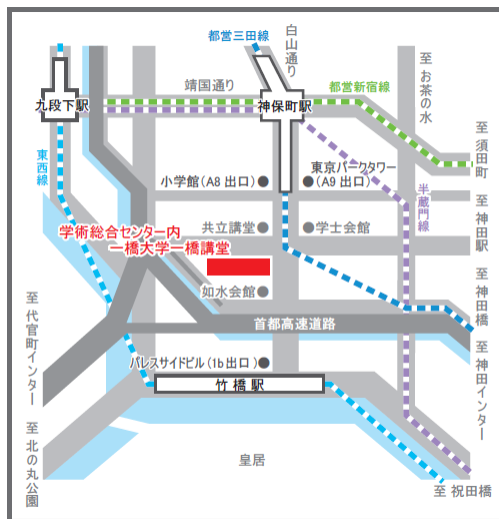
<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2014>

(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2014 プログラム

## はじめに (10:00 - 10:05)

- 10:00-10:05 ご挨拶  
大野隆央 (物材機構、東大生産研)

## PHASEの紹介 (10:05 - 10:25)

- 10:05-10:25 PHASEシステムの概要・機能の紹介および開発状況  
山崎隆浩 (物材機構)

## 研究トピックス (10:25 - 11:25)

- 10:25-11:05 半導体/金属のバンドアライメントとドーピングとの一般的な関係  
加藤弘一 (東芝)  
11:05-11:25 相変化記録膜材料におけるフェムト秒超高速格子ダイナミクス  
長谷宗明 (筑波大学)

## スパコンの産業利用 (11:25 - 12:05)

- 11:25-11:45 FOCUSスパコンにおけるPHASEの産業利用  
西川武志 (計算科学振興財団)  
11:45-12:05 スーパーコンピュータ「京」の産業応用  
伊藤聡 (理化学研究所)

(昼食休憩: 12:05 - 13:00)

## 研究トピックス (13:00 - 15:00)

- 13:00-13:20 二次元原子結晶半導体の物性  
影島博之 (島根大学)  
13:20-13:40 PHASEによるシリコン(111)表面におけるハロゲン拡散の解析  
浅利裕介 (日立製作所)  
13:40-14:00 第一原理DFT+U法による強相関物質の電子状態解析  
濱田智之 (日立製作所)  
14:00-14:20 結晶中陽電子寿命の第一原理計算  
斎藤峯雄 (金沢大学)  
14:20-14:40 セラソームモデルの電子状態  
小田将人 (和歌山大学)  
14:40-15:00 Cuの格子定数最適化のためのCutoff energyと全エネルギーと応力の取り扱い  
○高島光秋、岩井秀和 (宇都宮大学)

(休憩: 15:00 - 15:10)

## プロジェクト研究成果報告 (15:10 - 16:10)

- 15:10-15:25 負極材料LTOの第一原理計算解析  
田中喜典 (物材機構)  
15:25-15:40 パワーデバイス半導体基板SiCの酸化反応  
山崎隆浩 (物材機構)  
15:40-15:55 Cu 表面上のCVD グラフェン成長に関する第一原理計算  
田島暢夫 (物材機構)  
15:55-16:10 グラフェン伝導への高誘電率材料堆積の影響についての第一原理伝導解析  
金子智昭 (物材機構)

## 総合討論 (16:10 - 16:20)

- 16:10-16:20 【総合討論】PHASEへの要望・質問、各講演への質問など  
司会: 大野隆央 (物材機構)

## おわりに (16:20 - 16:25)