

# 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

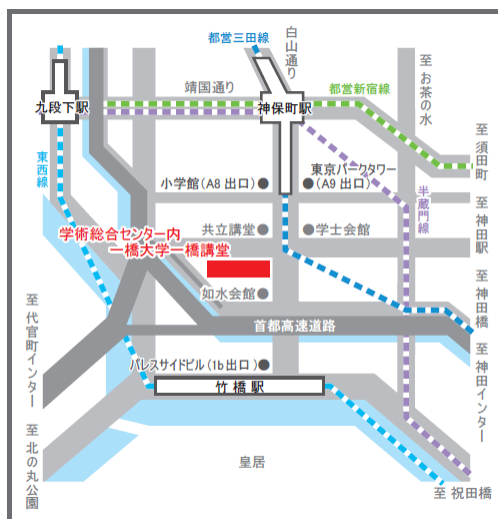
<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2014>

(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(仮)  
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)、田上勝規 (アスミス)  
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 HPCI戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」研究成果報告  
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)