

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2015

2015年11月27(金)

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、NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2015を開催いたします。開催5年目となる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 国立研究開発法人物質・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 2015年11月27日(金) 10:30-16:15

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

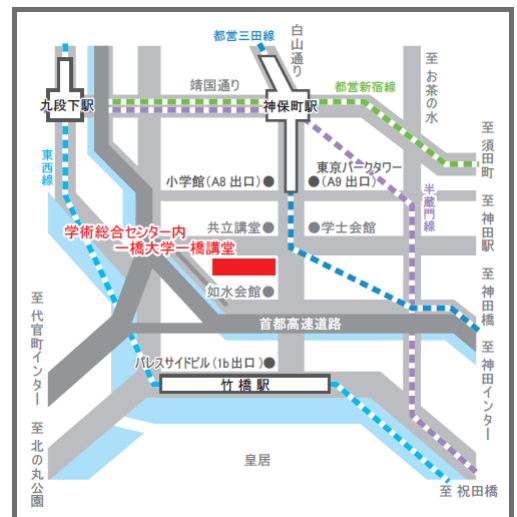
<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2015>

(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2015 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 - 10:50)

- 10:35-10:50 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 (10:50 - 12:10)

- 10:50-11:30 Liイオン二次電池正極材(Li(Ni<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>Co<sub>1/3</sub>)O<sub>2</sub>)の劣化解析への応用  
世木隆 (コベルコ科研)
- 11:30-11:50 強誘電体となるHfO<sub>2</sub>薄膜の結晶構造解析実験と第一原理計算  
井野恒洋 (東芝)
- 11:50-12:10 半導体デバイスを用いた水素センサーの動作機構の解明  
色川芳宏 (物材機構)

(昼食休憩: 12:10 - 13:10)

## 研究トピックス (13:10 - 14:30)

- 13:10-13:30 BおよびPをドーピングしたSi量子ドットの電子状態  
金田千穂子 (富士通研究所)
- 13:30-13:50 第一原理計算による抵抗変化メモリ(ReRAM)動作機構の検討  
森山拓洋 (鳥取大学)
- 13:50-14:10 Cu(001)表面上のアラニン自己組織化構造について  
岩井秀和 (宇都宮大学)
- 14:10-14:30 Ge(100)表面における初期酸化構造  
小田将人 (和歌山大学)

(休憩: 14:30 - 14:40)

## 研究トピックス (14:40 - 16:00)

- 14:40-15:00 SiC表面上のSi熱脱離グラフェン成長機構に関する第一原理計算  
小野裕己 (高度情報科学技術研究機構)
- 15:00-15:20 4H-SiC中の螺旋転位の構造と電子状態  
奈良純 (物材機構)
- 15:20-15:40 PHASEを利用したSi酸化プロセス再現のための電荷移動型ポテンシャルの作成  
高本聡 (東京大学)
- 15:40-16:00 Wannier90 インターフェースの強化  
田上勝規 (アスミス)

## 総合討論 (16:00 - 16:10)

- 16:00-16:10 PHASEへの要望・質問、各講演への質問など

## おわりに (16:10 - 16:15)

- 16:10-16:15 ご挨拶  
大野隆央 (物材機構、東大生産研)