

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2016

2016年11月2 (火)

学術総合センター 2F 一橋大学一橋講堂 中会議場1,2

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 2016を開催いたします。開催6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

ポスト京重点課題6「革新的クリーンエネルギーシステムの実用化」

サブ課題B 気液二相流および電極の超大規模解析による燃料電池設計プロセスの高度化

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 2016年11月2日(水) 10:30-15:30

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1,2

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

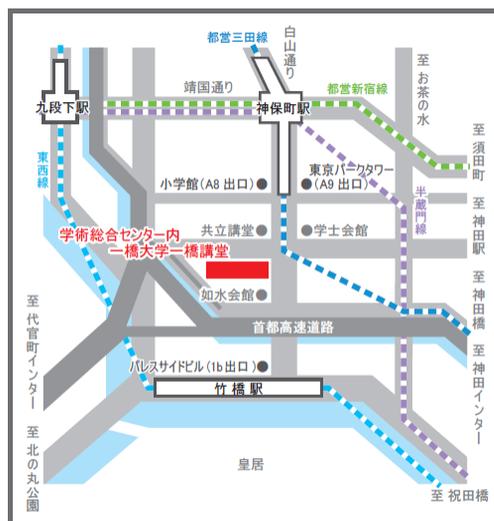
<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2016>

(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2016 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 - 12:30)

- 10:50-11:30 シリコン結晶における空孔型欠陥の熱処理回復過程と不純物の相関  
河合宏樹 (東芝)
- 11:30-12:00 SiO<sub>2</sub>/Si界面に凝集する水素分子とその形態  
加藤弘一 (東京大学生産技術研究所)
- 12:00-12:30 二次元物質h-BNとMoS<sub>2</sub>の原子空孔の安定性と電子状態  
浦崎柊、影島博之 (島根大学)

(昼食休憩: 12:30 - 13:30)

## 研究トピックス (13:30 - 15:20)

- 13:30-14:00 第一原理計算を用いた多結晶薄膜抵抗変化メモリ(ReRAM)の動作機構の検討  
森山拓洋、木下健太郎 (鳥取大学)
- 14:00-14:20 GaN中のGa空孔欠陥による格子変位が引き起こす電子状態変化  
小田将人 (和歌山大学)
- 14:20-14:40 バンド構造の群論に基づく解析  
斎藤峯雄 (金沢大学)
- 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研究  
奈良純 (物材機構)
- 15:00-15:20 XPS 及び XAS 解析機能の事例紹介  
田上勝規 (アスミス)

## 総合討論 (15:20 - 15:25)

- 15:20-15:25 【総合討論】PHASEへの要望・質問、各講演への質問など

## おわりに (15:25 - 15:30)

- 15:25-15:30 ご挨拶  
大野隆央 (物材機構、東大生産研)