

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2017

2017年11月20日 (月)

学術総合センター 2F 一橋大学一橋講堂 中会議場3,4

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 2017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  
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** 株式会社アスミス

**日時** 2017年11月20日(月) 10:30-15:40

**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3,4  
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

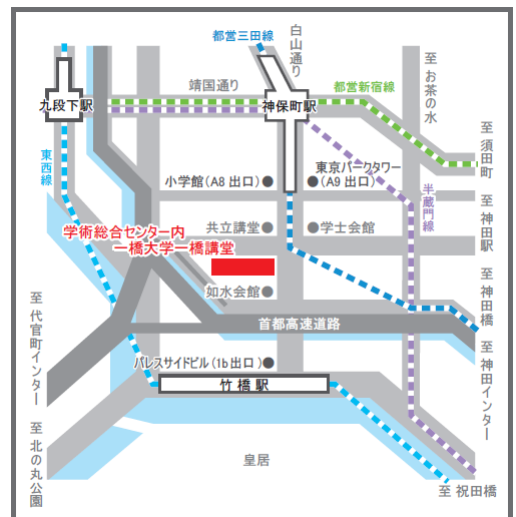
**参加申込** ワークショップHPより申し込みください

<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2017>

(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 MANAナノセオリー分野  
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2017 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)

## 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 リチウムイオン二次電池における劣化解析への応用  
世木隆 (コベルコ科研)
- 11:30-12:00 地球シミュレータでのPHASE/0の性能評価と産業利用への展開  
今任嘉幸 (海洋研究開発機構)
- 12:00-12:30 分子性結晶のテラヘルツ振動モード同定とAINの圧電定数-ボルン有効電荷を利用した解析-  
宇佐見護 (アスミス)、澤田健、岩本敏志 (日邦プレジジョン)

(昼食休憩: 12:30 - 13:30)

## 研究トピックス (13:30 - 15:30)

- 13:30-14:00 抵抗変化メモリ (ReRAM) の動作機構に関する実験および理論的検討  
肥田聡太 (鳥取大学)、木下健太郎 (東京理科大学)
- 14:00-14:20 ZnO中Zn原子空孔の第一原理計算  
斎藤峯雄 (金沢大学)
- 14:20-14:40 2層グラフェンの金属インターカレーション  
金子智昭 (東北大学)
- 14:40-15:00 SiC表面上のグラフェンと水素分子の相互作用に関する研究  
奈良純 (物材機構)
- 15:00-15:30 自己無同着ハイブリッド密度汎関数法のPHASEへの実装と固体バンドキャップの高精度計算  
濱田智之 (物材機構)

## 総合討論 (15:30 - 15:35)

- 15:30-15:35 【総合討論】PHASEへの要望・質問、各講演への質問など

## おわりに (15:35 - 15:40)

- 15:35-15:40 ご挨拶  
大野隆央 (物材機構)