

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2019

## 2019年12月11日(水)

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 2019を開催いたします。開催9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 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点  
PHASEシステム研究会、特定非営利活動法人 物質材料科学ソフトウェア研究会  
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

**日時** 2019年12月11日(水) 10:30-15:50

**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

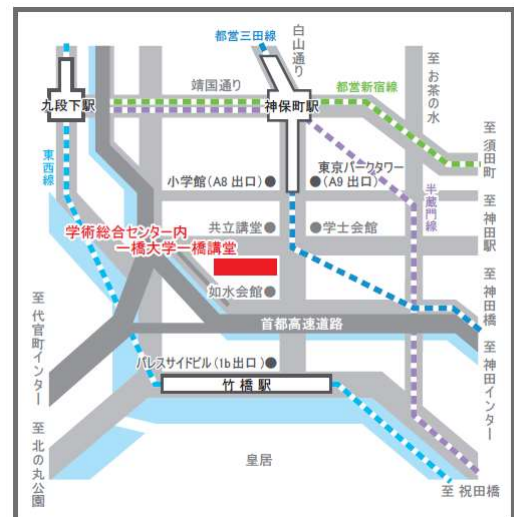
[http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file\\_01.pdf](http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file_01.pdf)

**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/nsws2019>  
(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](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2019 プログラム

## はじめに (10:30 - 10:35)

10:30-10:35 ご挨拶  
大野隆央 (物質・材料研究機構)

## PHASEの紹介 (10:35 - 11:00)

10:35-11:00 PHASEシステムの概要・機能の紹介および開発状況(開発版の紹介)  
奈良純 (物質・材料研究機構)

## 研究トピックス (11:00 - 12:30)

11:00-11:30 同時スパッタリング法によるMg<sub>2</sub>SiSn系薄膜の形成と電気伝導特性  
勝俣裕 (明治大学)  
11:30-12:00 二酸化チタン表面における水素吸着・拡散とポーラロン形成  
長塚直樹 (東京大学)  
12:00-12:30 窒素ドーピンググラフェンモデル触媒における酸素吸着状態  
武安光太郎 (筑波大学)

## 昼食休憩: 12:30 - 13:30

<ポスターセッション同時開催>

## 研究トピックス (13:30 - 15:30)

13:30-14:00 2次元物質のバンド構造: 群論に基づく解析  
斎藤峯雄 (金沢大学)  
14:00-14:30 (ZnO)<sub>1-x</sub>(InN)<sub>x</sub>の初期成長過程  
小田将人 (和歌山大学)  
14:30-14:50 hBNで表面を覆われたCu(100)面でのグラフェン成長初期過程の理論検討  
影島博之 (島根大学)  
14:50-15:10 4H-SiCのO<sub>2</sub>酸化プロセスの第一原理分子動力学解析  
山崎隆浩 (物質・材料研究機構)  
15:10-15:30 SX-Aurora TSUBASAの特長と活用事例のご紹介  
岩田直樹 (NEC)

## 総合討論 (15:30 - 15:45)

15:30-15:45 【総合討論・ユーザー会】PHASEへの要望・質問、各講演への質問など

## おわりに (15:45 - 15:50)

15:45-15:50 ご挨拶  
大野隆央 (物質・材料研究機構)