

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2018

2018年11月19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 2018を開催いたします。開催8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 2018年11月19日(月) 10:30-15:45

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

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

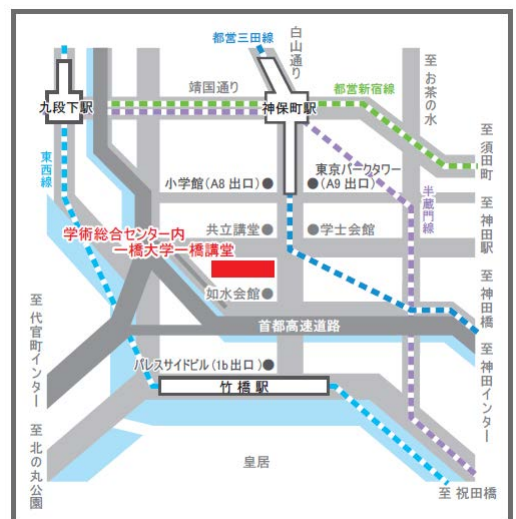
<https://azuma.nims.go.jp/events/nsws2018>

(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2018 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 - 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)
山崎隆浩 (物材機構)

研究トピックス (11:00 - 12:30)

- 11:00-11:30 ZnOナノ結晶の紫外線誘起フォトクロミズム転移
梶山博司(徳島文理大学)、宇田毅(アスミス)
11:30-12:00 量子とじこめ効果により発現するPd(100)超薄膜の強磁性
櫻木俊輔(東大物性研)
12:00-12:30 電子格子相互作用を介した欠陥反応機構
小田将人(和歌山大学)

(昼食休憩: 12:30 - 13:30)

研究トピックス (13:30 - 15:35)

- 13:30-14:00 金属-絶縁体界面コンタクトの第一原理計算
宮田正靖(東芝メモリ)
14:00-14:30 PdAu合金表面における水素の吸収・放出制御
小倉正平(東大生研)
14:30-15:00 4H-SiCのフォノン変形ポテンシャルの決定とパワーデバイスの応力評価への適用
榊間大輝*, 高本聡*, 村上陽一*, 波田野明日可*, 泉聡志*, 牛流章弘^, 廣畑賢治^
*東大工、^東芝
15:00-15:20 HfO₂結晶粒表面における酸素欠陥の凝集・拡散機構
肥田聡太(鳥取大学)、木下健太郎(東京理科大学)
15:20-15:35 PHASE/0の埋もれた機能の紹介
田上勝規(アスミス)ほか

総合討論 (15:35 - 15:40)

- 15:35-15:40 【総合討論】PHASEへの要望・質問、各講演への質問など

おわりに (15:40 - 15:45)

- 15:40-15:45 ご挨拶
大野隆央 (物材機構)