

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2023

## 2023年12月6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 (+オンラインによるハイブリッド開催)

物質・材料研究機構(NIMS)では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、また、研究開発成果の発表・討論の場として、昨年度に引き続きNIMSナノシミュレーションワークショップ2023を開催いたします。

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 MANA  
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  
株式会社アスミス

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

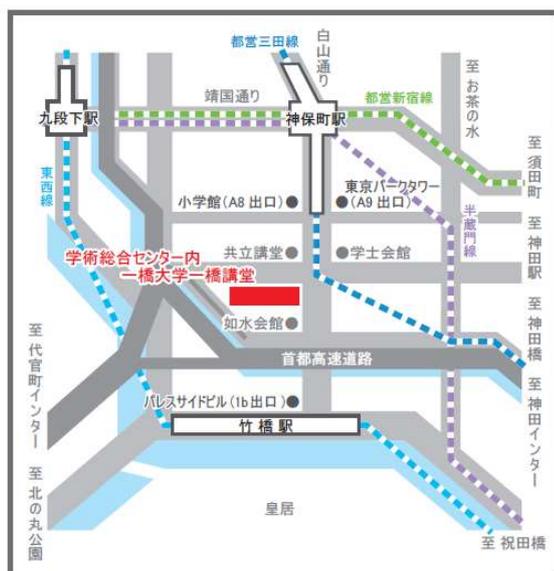
日時 2023年12月6日(水) 10:30-15:55  
会場 (オンサイト)学術総合センター(竹橋) 2F  
一橋大学 一橋講堂 中会議場3,4  
東京都千代田区一ツ橋2-1-2  
[http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file\\_01.pdf](http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file_01.pdf)  
(オンライン)zoom webinar

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/nsws2023>  
(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内 WS事務局  
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2023 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  
奈良 純 (物質・材料研究機構)

## 研究トピックス (11:00 - 12:10)

11:00-11:40 Si量子井戸における谷分離の研究に対する第一原理計算の有用性について  
林 稔晶<sup>1</sup>、影島 博之<sup>2</sup>、登坂 仁一郎<sup>1</sup>、西口 克彦<sup>1</sup> (<sup>1</sup>NTT物性基礎研、<sup>2</sup>島根大学)  
11:40-12:10 Pt(111)面上のCePt<sub>2</sub>単原子層近藤格子のSTM/STS観察とその電子状態  
小森 文夫 (東大生産研)

\*\*\*\*\*  
昼食休憩: 12:10 - 13:10  
\*\*\*\*\*

## 研究トピックス (13:10 - 14:20)

13:10-13:40 Cu 基板上 hBN の CVD 成長の理論研究  
今村 僚、影島 博之 (島根大院自然科学)  
13:40-14:00 GaN中におけるV<sub>Ga</sub>-V<sub>N</sub>複合欠陥移動反応ポテンシャル  
小田 将人 (和歌山大学)  
14:00-14:20 GaAs(111)B上に成長した単層MoTe<sub>2</sub>のエネルギー的安定性  
奈良 純 (物質・材料研究機構)

\*\*\*\*\*  
休憩: 14:20 - 14:40  
\*\*\*\*\*

## 研究トピックス (14:40 - 15:50)

14:40-15:10 ZnDTP由来トライポフィルム用原子間ポテンシャルの開発と摺動現象への適用  
榎間 大輝<sup>1</sup>、岡澤 拓史<sup>1</sup>、久米 一輝<sup>1</sup>、小林 森<sup>2</sup>、河口 健太郎<sup>2</sup>、宮内 勇馬<sup>2</sup>、泉 聡志<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>東大工、<sup>2</sup>マツダ株式会社)  
15:10-15:30 機械学習ポテンシャルを用いたタングステンカーバイドの変形と破壊の分子動力学解析  
佐谷 彩夏 (阪大基礎工)  
15:30-15:50 PHASE/0を用いたセシウム吸着風化黒雲母の熔融塩反応機構解明  
飯野 千秋 (和歌山大学)

## おわりに (15:50 - 15:55)

15:50-15:55 ご挨拶  
大野 隆央 (物質・材料研究機構)