

NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2024

2024年12月2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 (+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2024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

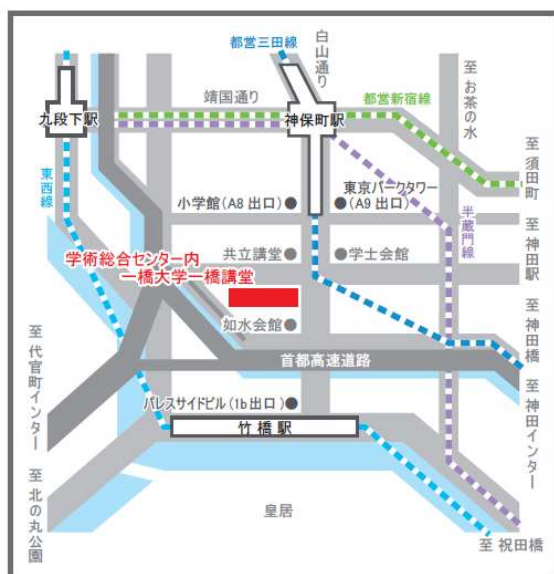
日時 2024年12月2日(月) 10:30-16:00
会場 (オンサイト)学術総合センター(竹橋) 2F
一橋大学 一橋講堂 中会議場3,4
東京都千代田区一ツ橋2-1-2
http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file_01.pdf
(オンライン)zoom

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/nsws2024>
(会議当日も会場受付にてオンサイト参加可能です)

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2024 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システムの紹介 (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
奈良 純 (物質・材料研究機構)

研究トピックス [AMセッション; オンサイト講演] (10:50 - 11:50)

10:50-11:20 窒素飽和吸着Cu(001)面のステップ端状態の起源
小森 文夫 (東大物性研)

11:20-11:50 水素・電子トンネルによる光触媒TiO₂上水素ガス生成と酸素欠陥による光触媒反応活性
加藤 弘一 (東大生産研)

昼食休憩: 11:50 - 13:00

研究トピックス [PM1セッション; オンライン講演] (13:00 - 13:55)

13:00-13:25 ノンコリニアDFT計算によるFe添加Mn₃Snの安定磁気構造評価
田上 勝規 (株式会社アスムス)

13:25-13:55 Si酸化膜中Si輸送に関する原子レベルの考察
影島 博之¹、秋山 亨²、白石 賢二³ (1島根大学、²三重大学、³名古屋大学)

休憩: 13:55 - 14:15

研究トピックス [PM2セッション; オンサイト講演] (14:15 - 15:55)

14:15-14:45 液体のエントロピーの第一原理計算
白井 光雲^{1,2}、靱田 浩義³、佐藤 和則³、Sangil Hyun⁴ (1阪大・産研、²日越大学、³阪大工、⁴韓国KICET)

14:45-15:05 GaSb基板上のInGaSb/AlInGaSb量子カスケードレーザのMBE成長
安田 浩朗、関根 徳彦、寶迫 巖 (情報通信研究機構)

15:05-15:25 風化黒雲母中の層間原子拡散に対する断熱ポテンシャル
小田 将人 (和歌山大学)

15:25-15:55 Al₂O₃ゲート絶縁膜の欠陥低減に向けた過熱水蒸気アニール技術
尾崎 史朗 (富士通株式会社)

おわりに (15:55 - 16:00)

15:55-16:00 ご挨拶
大野 隆央 (物質・材料研究機構)