

NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2025

2025年12月1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2025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 2025年12月1日(月) 10:30-16:05

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

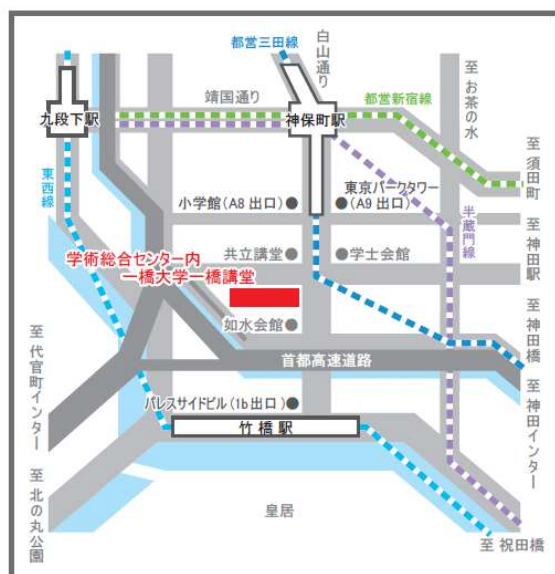
http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file_01.pdf
(オンライン)zoom

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/nsws2025>
(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2025 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 - 10:50)

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 (10:50 - 11:50)

10:50-11:20 マルチスケール解析によるSiCリモートエピタキシー開発研究
前川 拓滋(ローム株式会社)
11:20-11:50 Subtractive Interconnect Metals/SiO₂界面熱抵抗の機械学習分子動力学計算
橋本 修一郎¹, 西村 祐亮², 渡邊 孝信^{1,2} (¹早大SEES、²早大理工)

昼食休憩: 11:50 - 13:00

研究トピックス (13:00 - 14:30)

13:00-13:30 液体の熱力学関数の第一原理計算 (オンライン講演)
白井 光雲(阪大・日越大)
13:30-14:00 Cu(111)上hBNのCVD成長に関する理論検討
影島 博之、今村 僚、Seo Insung (島根大)
14:00-14:30 光触媒ルチルTiO₂の酸素空孔を介した太陽光2段階吸収反応
加藤 弘一(東大生産研)

休憩: 14:30 - 14:50

研究トピックス (14:50 - 16:00)

14:50-15:20 金属有機構造体の放射線劣化機構
齋藤 英碩、木下 健太郎(東京理科大)
15:20-15:40 層状ケイ酸塩鉱物中の層間イオン伝導度の評価
藪田 莉名、小田 将人(和歌山大)
15:40-16:00 積層グラフェンの低エネルギー光吸収に関する理論的研究
奈良 純、濱田 智之、大野 隆央(物質・材料研究機構)

おわりに (16:00 - 16:05)

16:00-16:05 ご挨拶
大野 隆央(物質・材料研究機構)