

# NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2012

2012年10月29日(月)

学術総合センター(竹橋) 2F 中会議場

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、研究開発の発表・討論の場として、2011年に引き続き、NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2012を開催いたします。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トピックス、プログラム開発・研究支援、連携研究などの講演を行います。

ご関心をお持ちの多くの方にご講演、ご参加いただきますよう、ご案内申し上げます。

主催 独立行政法人物質・材料研究機構  
理論計算科学ユニット  
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

協賛 公益社団法人日本表面科学会

日時 2012年10月29日(月) 10:30-16:35

会場 学術総合センター(竹橋) 2F 中会議場  
東京都千代田区一ツ橋2-1-2

アクセス : <http://www.nii.ac.jp/access/>

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/nsws2012>  
(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 理論計算科学ユニット  
[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2012 プログラム

はじめに(10:30-10:35)

基調講演 (10:35-10:45)

10:35-10:45 プロジェクトの研究開発報告と今後の展開  
大野隆央 (物材機構、東大生産研)

研究トピックス (10:45 - 12:00)

10:45-11:05 Si(001)表面におけるDAT分子の吸着構造及びSTM像探針バイアス依存性  
小田将人 (和歌山大学)

11:05-11:20 Conducting-Bridge Memoryにおける原子拡散経路の特定  
由良翔、木下健太郎 (鳥取大学)

11:20-11:40 時間依存DFT計算による有機分子/二酸化チタン界面の光吸収スペクトル解析  
舩田浩義 (大阪大学産業科学研究所)

11:40-12:00 4H-SiC中の螺旋欠陥に関する研究  
奈良純 (物材機構)

(昼食休憩: 12:00-13:00)

プログラム開発・研究支援 (13:00 - 14:40)

13:00-13:20 「京」での利用に向けたPHASEの超並列化  
黒田明義 (理化学研究所計算科学研究機構)

13:20-13:40 PHASEの性能最適化  
加藤季広 (NEC HPC事業部)

13:40-14:00 計算物性(計算事例)データベース、ポータルサイトの構築  
西川宜孝 (みずほ情報総研)

14:00-14:20 ソフトウェアベンダーの取り組みー商用版PHASEのご紹介ー  
宇佐見護 (株式会社アスミス)

14:20-14:40 解析シミュレーションのクラウドサービス TCクラウドのご紹介  
高橋篤也 (富士通株式会社)

(コーヒーブレイク: 14:40-15:00)

研究トピックス (15:00 - 16:00)

15:00-15:20 ステップのついたSiC(0001)表面上でのグラフェン成長に関する研究  
小野裕己 (東大生産研)

15:20-15:40 ニッケル表面上のCVDグラフェン成長に関する理論計算  
田島暢夫 (物材機構)

15:40-16:00 ASCOT によるグラフェン-金属電極間の接触抵抗の計算  
金子智昭 (物材機構)

連携研究 (16:00 - 16:30)

16:00-16:30 超大規模電子状態計算コードELSESESの紹介 -- NIMSソフトウェアとの連携研究可能性 --  
星健夫 (鳥取大学、JST-CREST)

おわりに(16:30-16:35)