

NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2022

2022年12月15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 2022を開催いたします。開催12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
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 2019年12月15日(水) 10:30-16:15

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

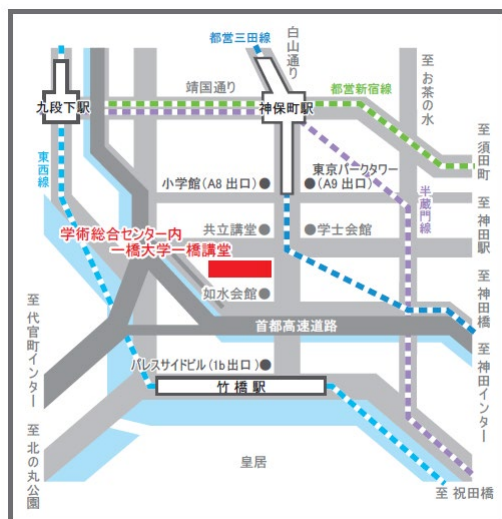
http://www.hit-u.ac.jp/hall/file/menu-016/file_01.pdf
(オンライン) zoom webinar

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/nsws2022>
(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2022 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)

奈良純 (物材機構)

研究トピックス (11:00 - 12:00)

11:00-11:30 TiO₂光触媒反応による水から水素ガス発生 - 水素拡散と水素トンネルの協業 -

加藤弘一 (東大生研)

11:30-12:00 PIMD コードを用いた並列分子シミュレーション

志賀基之 (原研)

昼食休憩: 12:00 - 13:00

研究トピックス (13:00 - 14:00)

13:00-13:30 熱電材料とTiO₂光触媒の高性能化への探索 --実験と第一原理計算--

魯云 (千葉大学)

13:30-14:00 ガラス転移における比熱ジャンプの第一原理計算

白井光雲 (阪大産研)

昼食休憩: 14:00 - 14:20

研究トピックス (14:20 - 16:10)

14:20-14:50 CVD法におけるhBN/グラフェンヘテロ構造の成長方向選択性の起源の探求

影島博之 (島根大学)

14:50-15:10 グラファイトの電子状態とマイクロ波・遠赤外吸光度

濱田智之 (物材機構)

15:10-15:30 III-V族化合物半導体の原子層エピタキシー成長機構の研究

小田将人 (和歌山大学)

15:30-15:50 タングステンカーバイドの変形と破壊の原子シミュレーション

彌島卓、尾方成信 (阪大基礎工)

15:50-16:10 鉄-水素系ニューラルネットワークポテンシャルの検証

甲賀淳一郎 (株式会社アスミス)

おわりに (16:10 - 16:15)

16:10-16:15 ご挨拶

大野隆央 (物材機構)