

第一原理計算によるマテリアル・デバイス設計

講師：小野 倫也氏

神戸大学 大学院工学研究科 電気電子工学専攻 教授

計算機の高性能化が進むなか、第一原理に基づく電子状態計算は、新規マテリアルの開発やデバイスの設計に有力なツールとなりつつある。近年では、機械学習やAIと結びつき、多くのパラメータ空間の中から要求される物性を持つマテリアルや機能を示すデバイスを見つけ出すことも可能になりつつある。本セミナーでは、物性解析・機能予測の根幹をなす第一原理計算の基礎知識と応用例を紹介する。

【講師経歴】 1997/3 大阪大学工学部精密工学科卒業、2001/3 大阪大学大学院工学研究科精密科学専攻博士後期課程修了、2001/4 大阪大学大学院工学研究科 助手、2007/2 ドイツ・ユーリッヒ研究センター フンボルト研究員(兼任)、2007/4 大阪大学大学院工学研究科 助教、2013/10 科学技術振興機構 さきがけ研究員(兼任)、2014/10 筑波大学計算科学研究センター准教授、2019/4 神戸大学大学院工学研究科教授 **【研究歴】** 1997年～第一原理計算をデバイス設計に応用すべく、これまでの第一原理計算法とは異なる新しい第一原理数値計算手法として、実空間差分法に基づく計算手法とこれに基づく計算コードRSPACEの開発に従事。2007年～RSPACEをスピントロニクスデバイスのシミュレーションに使えるようにすべく、高精度化に従事。2013年～RSPACEを用いてSiC-MOSの界面電子状態・伝導特性解析に従事し、SiC-MOSのキャリア移動度低下が、界面欠陥準位だけでなく伝導帯端の空間的な揺らぎでも起こることを発見。2014年～RSPACEを京コンピュータやOakforest-PACSで実行し、大規模第一原理伝導計算を実現。2019年～RSPACEを用いたマテリアル・デバイスデザインに従事。

【所属学会】 日本物理学会、応用物理学会、日本表面真空学会 **【著書】** K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, S. Tsukamoto: First-Principles Calculations in Real-Space Formalism - Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures -, Imperial College Press, London, (2005). 計算機マテリアルデザイン入門, 大阪大学出版会, (2005), 分担執筆。超精密加工と表面科学, 大阪大学出版会, (2014), 分担執筆

開催日時	2020年6月16日(火) 12:30~16:30	【会場】
受講料	48,000円 + 税 ※資料付 * メルマガ登録者 43,000円 + 税 * アカデミック価格 24,000円 + 税	ちよだプラットフォームスクウェア B1F 〒101-0054 東京都千代田区神田錦町 3-21

*アカデミック価格:学校教育法にて規定された国、地方公共団体、および学校法人格を有する大学、大学院の教員、学生に限ります。

★【メルマガ会員特典】2名以上同時申込で申込者全員メルマガ会員登録をしていただいた場合、2名目は無料、3名目以降は半額です。

★【セミナー対象者】企業の研究開発部門において、第一原理計算コードを使う研究者、実験的手法を用いて、ナノ構造の構造・機能解析、新規マテリアル・デバイス設計に携わる研究者★【得られる知識】ナノ構造の電子状態と電気伝導に関する知識、密度汎関数理論に基づく第一原理電子状態・電気伝導特性計算法に関する基礎とその応用例に関する知識、第一原理計算に用いられる最先端計算機に関する知識

【本セミナーのプログラム】

※適宜休憩が入ります。

I. 物質の電子状態と電子状態計算法	II-2. 結晶中の電気伝導
I-1. 物質の電子状態	II-3. ナノデバイス中の電気伝導
I-2. 密度汎関数理論	
I-3. 電子状態の数値計算法	III. 第一原理計算によるマテリアル・デバイス機能解析と予測の応用例
II. ナノ構造の電子状態と電気伝導	III-1. 表面・界面系の電子状態解析と予測
II-1. ナノ構造の電子状態	III-2. 分子デバイスの電気伝導特性解析と予測
	III-3. 表面・界面におけるキャリア散乱解析と予測

弊社記入欄		セミナー申込書	
セミナー名		第一原理計算によるマテリアル・デバイス設計	
所定の事項にご記入下さい メルマガ会員、 登録希望の場合は○↓	会社名(団体名) 住所 〒	TEL :	
会員登録済み	新規登録希望	FAX :	
部署	役職	E-mail :	
氏名			
お支払方法	銀行振込 ・ その他	お支払予定	2020年 月 日頃

■申込方法：セミナー申込書にご記入の上 FAX または E-mail(re@cmcre.com)でお申し込みください。

■セミナーお申込み後のキャンセルは基本的にお受けしておりません、ご都合により出席できなくなった場合は代理の方がご出席ください。

■申込先：(株)シーエムシー・リサーチ 東京都千代田区神田錦町 2-7 TEL 03-3293-7053

■本セミナーの関連情報は、弊社HPでもご覧いただけます。⇒ <http://www.cmcre.com>

参加申込 FAX 番号
03-3291-5789