

# 実験研究者のための計算機実験 ：実験屋のツールになりうるか？

◇ 日時：2006年8月2日（水）10:00～16:45

◇ 場所：大阪産業創造館 (<http://www.sansokan.jp/index.php>)  
(地下鉄 堺筋線・中央線 堺筋本町駅 徒歩5分)

PCやWSの計算速度・記憶容量などの劇的な進展に伴い、大型計算機を使うことなく第一原理計算やポテンシャル計算などの大規模計算が簡単にできるようになってきました。文部科学省ITプログラムとして「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトも進行中です。このような時代の変化に伴って、実験を主とした研究者も計算機を用いた計算結果を利用して大幅に試行実験の回数を低減したり、実験結果の解釈に応用したりすることが可能になってきています。しかしながら、その敷居はまだ高く、計算機実験を有効に利用できているとは言えません。今回、ソフトウェア開発者、ユーザーなど様々な立場から「実験研究者が計算機を用いた実験を容易に行うことによるメリット、問題点、注意点を議論することを目的とした研究会を開催いたしますので是非ご参加ください。

.....プログラム.....

## 第一部 理論計算ソフトウェアの汎用化への取り組み

－実験研究者に使ってもらうために－

1. ワイドギャップ半導体のマテリアルデザインとCMD-RTN  
10:00-10:40 吉田 博 (大阪大学 産業科学研究所)
2. ナノシリコンデバイスの材料設計、物性予測、機能設計と文部科学省ITプログラムの取り組み  
10:40-11:20 大野 隆央 (物質・材料研究機構)
3. ソフトウェアメーカーの取り組み例  
11:20-11:50 宇田 毅 (アドバンスソフト株式会社)  
12:20-13:30 ソフトウェア デモンストレーション

## 第二部 汎用ソフトウェアを用いた理論計算、計算機実験

－計算結果の解釈と実験結果－

4. 電子ULSI材料のTEM-EELS分析と電子構造計算  
13:30-14:00 五十嵐 信行 (NEC システムデバイス研究所)
5. 電子部品メーカーにおける強誘電体材料研究への第一原理計算の活用  
14:00-14:30 森分 博紀 (松下電子部品 デバイス・ソフトウェア研究室)
6. パソコン計算でどこまで物性が予測(説明)できる？：表面科学から物質科学まで  
14:30-14:55 田畑 仁 (大阪大学 産業科学研究所)
7. 気相成長の熱力学解析：計算結果の実験への適用  
14:55-15:20 額 明伯 (東京農工大学)
8. 材料開発に第一原理計算は役立つか？  
15:20-15:45 和田 隆博 (龍谷大学)

## 第三部 パネルディスカッション

－計算機実験は実験屋のツールになりうるか？－

16:00-16:45 司会：藤村 紀文 (大阪府立大学)

■参加受付：当日受付(事前登録の必要はありません)

■参加費：(テキスト代・消費税込)当日会場にてお支払いください。

結晶工学分科会会員\* 3,000円、分科会学生会員 1,000円、

応用物理学会・協賛学会会員 4,000円、一般 5,000円、学生 2,000円

\*結晶工学分科会賛助会社の方は結晶工学分科会会員扱いとします。

\*また、当日ご入会の方も結晶工学分科会会員扱いとします。

■問合せ先：藤村紀文(大阪府立大) TEL: 072-254-9332, FAX: 072-254-9327, e-mail: fujim@pe.osakafu-u.ac.jp

和田隆博(龍谷大学) TEL: 077-543-7468, FAX: 077-543-7483, e-mail: twada@rins.ryukoku.ac.jp

伊丹文子(応用物理学会事務局) TEL: 03-3238-1043, FAX: 03-3221-6245, e-mail: divisions@jsap.or.jp

◆主催：応用物理学会結晶工学分科会

◆協賛：電気学会、電子情報通信学会、日本化学会、日本物理学会