ゴードンベル賞受賞アプリ

RSDFT講習会(中級)





〜第一原理計算で半導体の物性を計算しよう〜

【日時】 2019年2月25日(月)10:00~18:00

【場所】 東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト2F205号室

【申込】 https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/1350

【対象】 第一原理計算でシリコンや化合物半導体等の大規模系の物性を

計算したい方。LinuxやLinux上でのエディター等の知識必要。

【定員】 10名(先着順)

【受講料】43,200円(税込)

【締切】 2019年2月20日(水)10:00

【端末】 ノートPCを準備しますので、PC持参は不要です。

申込サイト



◆概要

今回は、RSDFT開発者の押山先生、岩田先生を講師とし、 RSDFTを活用したSiC等の最先端の研究成果の紹介と、シリコン、 および、ワイドバンドギャップ半導体などに関する計算例をベー スにFOCUSスパコンを用いた講習を実施します。密度汎関数法に 基づく第一原理電子状態計算プログラムRSDFTは、実空間グリッ ドで全ての計算を行うため、高速フーリエ変換が不要となり、並 列数を上げて大規模系を扱うことが可能です。半導体の微細化、 界面や表面の物性などに興味のある方は、是非ご参加ください。

◆プログラム

10:00~12:00 押山淳(名古屋大学)

講義: RSDFTを活用した最先端研究の紹介

(Si、C、SiC、GaN等を予定)

13:00~17:00 岩田潤一 (アドバンスソフト㈱)

実習:RSDFTの利用方法・テスト計算・応用計算

(Si、SiCを予定)

17:00~17:10 FOCUSスパコン利用例紹介

17:10~18:00 交流会(任意参加)

【主催】 東京大学 物性研究所 計算物質科学研究センター (CCMS)

adm-office@cms-initiative.jp

【共催】 公益財団法人 計算科学振興財団(FOCUS

【協賛】 TIAかけはし「計算と計測のデータ同化による革新的物質材料解析手法の調査」

ポスト「京」重点課題(7))「次世代の産業を支える新機能デバイス

・高性能材料の創成」(CDMSI)

計算物質科学人材育成コンソーシアム(PCoMS)

スーパーコンピューティング技術産業応用協議会(ICSCP)