

富士通計算化学セミナー2014のご案内

計算化学を用いた研究の第一人者をお招きし、最先端の研究についてご講演いただきます。既に計算化学を活用している方はもちろんのこと、計算化学に興味はあるものの、今まで一歩が踏み出せなかった方も、是非、本セミナーにご参加頂き、最先端の研究に触れて頂くとともに、ご自身の研究テーマへの適用のヒントを見つけて頂ければ幸いです。

■ 開催日時・会場

- **日時** : 2014年7月25日(金) 12:50~16:50 (受付12:00~12:50)
- **場所** : 富士通トラステッド・クラウド・スクエア Seminar Room3
東京都港区浜松町2-4-1世界貿易センタービル 30階
<http://jp.fujitsu.com/facilities/tcs/access/>
TEL : 03-5401-7050
- **定員** : 40名 (お申込み受付は7月23日、正午まで)
- **お申込み** : 下記サイトからお申込みいただけます。
<https://seminar.jp.fujitsu.com/public/seminar/view/2399>

■ 招待講演

■ 「シリコン系絶縁膜の耐湿性の機構 -分子軌道計算活用-」

三菱電機株式会社 高周波光デバイス製作所 ウエハ製造部
専任 奥 友希 様

【要旨】化合物半導体デバイスは湿度からデバイスを保護する目的でパッシベーション膜を有する。しかしながら、高周波デバイス用途なので寄生容量低減のためパッシベーションを厚くすることができない。さらに耐熱性が低いために絶縁膜形成は300℃以下で行う必要があり、絶縁膜には欠陥、欠損が多く含まれる。このように欠陥、欠損を含む膜で耐湿性に最適なパッシベーションを行うには、耐湿性の機構を考えながらプロセス条件を決めていくことが近道である。我々は耐湿性の機構を分子軌道計算を用いて解析し、最適な絶縁膜の形成に成功している。本講演では、我々の取り組みを例題に計算化学の利用方法について考えたい。

■ 「第一原理バンド計算ソフトウェアPHASE/0の機能と応用事例」

株式会社 アスムス
代表取締役社長 宇佐見 護 様

【要旨】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を中心に開発された第一原理バンド計算ソフトウェアPHASEの普及が進み、公的研究機関のみならず民間企業でも活用されています。現在は開発の中核をPHASEシステム研究会に移すとともに名称を「PHASE/0」に変更し、開発・改良が続けられています。

計算実行には「計算機」が不可欠ですが、最近では、必要な計算機を必要な時に借りることが出来ます。また近頃のパソコンは実用的なバンド計算をし得る程度に高性能です。計算の専門家でなくともバンド計算に取り組む環境は整っています。

講演では、新たにシミュレーションに取り組みたいとお考えの方に、バンド計算を使って何が出来るのか概要を掴んでいただけるようにPHASE/0をご紹介します。

■ 技術・製品紹介

■ 「GAMESS及びLAMMPSの事例」

株式会社 富士通研究所 ものづくり技術研究所 デザインエンジニアリング研究部

※詳細な講演内容についてはお申込みサイトにて後日ご案内いたします。

■ 「SCIGRESS V2.6のご紹介」

富士通株式会社 テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部

HPCアプリケーション統括部

シニアマネージャー 高橋 篤也

■ 富士通計算化学セミナー2014お問い合わせ窓口

本セミナーに関するお問い合わせは以下の問い合わせ窓口までご連絡ください。

富士通株式会社テクニカルコンピューティング・ソリューション事業本部

富士通計算化学セミナー2014担当

TEL : 043-299-3680 / Email : tcsu-sg@ml.css.fujitsu.com