

# Symposium D-2

計算機シミュレーションによる先端材料の解析・機能創成  
Creation and characterization of advanced materials  
through computer simulation

## Organizers:

### Representative

吉矢 真人(大阪大学)

### Correspondence

大場 史康(東京工業大学)

田村 友幸(名古屋工業大学)

### Co-Organizers

Craig A. J. FISHER (ファインセラミックスセンター)

上杉 徳照(大阪府立大学)

小谷 岳生(鳥取大学)

香山 正憲(産総研)

Hannes RAEBIGER (横浜国立大学)

### Publication Organizer

吉矢 真人(大阪大学)

## Organizers:

### Representative

Masato YOSHIYA (Osaka University)

### Correspondence

Fumiyasu OBA (Tokyo Institute of Technology)

Tomoyuki TAMURA (Nagoya Institute of Technology)

### Co-Organizers

Craig A. J. FISHER (Japan Fine Ceramics Center)

Tokuteru UESUGI (Osaka Prefecture University)

Takao KOTANI (Tottori University)

Masanori KOHYAMA (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

Hannes RAEBIGER (Yokohama National University)

### Publication Organizer

Masato YOSHIYA (Osaka University)

12月19日(水)  
December 19 (Wed.)

西日本総合展示場 AIM 3F 314会議室(R会場)  
West Japan General Exhibition Center AIM 3F Room 314

## 午前の部

### Morning Oral Session

座長: 大場 史康(東京工業大学)

Chair: Fumiyasu OBA (Tokyo Institute of Technology)

#### 9:30-10:00 Invited D2-I19-001

情報科学手法による材料科学研究 - 原子力場推定およびニオイ成分解析 - / Materials science researches by informatics techniques - atomic force-field estimation and odor component analysis -

田村 亮<sup>1,2,3</sup> (1)物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点、(2)東京大学大学院新領域創成科学研究科、(3)国立研究開発法人 理化学研究所 革新知能統合研究センター)

Ryo TAMURA<sup>1,2,3</sup> (1) International Center for Materials Nanoarchitectonics, National Institute for Materials Science, (2) Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, (3) Center for Advanced Intelligence Project

#### 10:00-10:15 D2-O19-002

機械学習を用いた固体電解質LLTOの効率的な安定構造探索 / Efficient stable structure search of solid electrolyte LLTO using machine learning

春日井 広輝<sup>1</sup>、田村 友幸<sup>1,2</sup>、烏山 昌幸<sup>1,2,3</sup>、金森 研太<sup>1</sup>、小林 亮<sup>1,2</sup>、尾形 修司<sup>1</sup> (1)名古屋工業大学大学院工学研究科、(2)物質・材料研究機構、(3)JST さきがけ)

Hiroki KASUGAI<sup>1</sup>, Tomoyuki TAMURA<sup>1,2</sup>, Masayuki KARASUYAMA<sup>1,2,3</sup>, Kenta KANAMORI<sup>1</sup>, Ryo KOBAYASHI<sup>1,2</sup>, Shuji OGATA<sup>1</sup> (1) Nagoya Institute of Technology, (2) National Institute for Materials Science, (3) PRESTO, JST)

## 午前の部

### Morning Oral Session

座長: 田村 亮(NIMS/東京大学/理化学研究所)

Chair: Ryo TAMURA (NIMS/The University of Tokyo/RIKEN)

#### 10:15-10:30 D2-O19-003

第一原理計算と機械学習に基づいた形状記憶合金のマルテンサイト変態温度 / First-principles calculations assisted machine learning for predicting transformation temperatures of martensitic transformation in shape memory alloys

南 大地、上杉 徳照、瀧川 順庸、東 健司(大阪府立大学大学院工学研究科)

Daichi MINAMI, Tokuteru UESUGI, Yorinobu TAKIGAWA, Kenji HIGASHI (Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University)

#### 10:30-10:45 D2-O19-004

酸化物の誘電率予測のための機械学習モデル / Machine Learning Model for Predicting Dielectric Constants of Oxides

宮本 惺<sup>1</sup>、高橋 亮<sup>1</sup>、熊谷 悠<sup>2</sup>、大場 史康<sup>1</sup> (1)東京工業大学 科学技術創成研究院フロンティア材料研究所、(2)東京工業大学 元素戦略研究センター)

Jun MIYAMOTO<sup>1</sup>, Akira TAKAHASHI<sup>1</sup>, Yu KUMAGAI<sup>2</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1</sup> (1) Laboratory for Materials and Structures, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, (2) Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology)

#### 10:45-11:00 D2-O19-005

機械学習による大規模粒界モデル中の局所エネルギー予測 / Prediction of local energies in large-scale grain-boundary system: Machine-learning based modeling of first-principles calculations

田村 友幸<sup>1,2</sup>、烏山 昌幸<sup>1,2,3</sup>、小林 亮<sup>1,2</sup>、竹内 一郎<sup>1,2,4</sup> (1)名古屋工業大学大学院工学研究科、(2)物質・材料研究機構、(3)JST さきがけ、(4)理化学研究所)

Tomoyuki TAMURA<sup>1,2</sup>, Masayuki KARASUYAMA<sup>1,2,3</sup>, Ryo KOBAYASHI<sup>1,2</sup>, Ichiro TAKEUCHI<sup>1,2,4</sup> (1) Nagoya Institute of Technology, (2) National Institute for Materials Science, (3) PRESTO, JST, (4) RIKEN Center for Advanced Intelligence Project)

11:00 ~ 11:15 休憩

## 午前の部 Morning Oral Session

座長：田村 友幸(名古屋工業大学)  
Chair：Tomoyuki TAMURA (Nagoya Institute of Technology)

### 11:15-11:45 Invited D2-119-006

第一原理計算に基づく粒界の原子構造および特性の予測 / First-principles calculations of grain boundary structures and their properties

横井 達矢、中村 篤智、松永 克志 (名古屋大学大学院工学研究科 物質科学専攻)

Tatsuya YOKOI, Atsutomo NAKAMURA, Katsuyuki MATSUNAGA (Department of Materials Physics, Nagoya University)

### 11:45-12:00 D2-019-007

PbTiO<sub>3</sub>の結晶粒界におけるPb欠陥の第一原理計算 / *Ab initio* study of lead vacancy on grain boundary of PbTiO<sub>3</sub>

本橋 佑一<sup>1,2)</sup>、山本 貴博<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>株式会社リコー、<sup>2)</sup>東京理科大学大学院工学研究科)

Yuichi MOTOHASHI<sup>1,2)</sup>, Takahiro YAMAMOTO<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>RICOH CO., LTD., <sup>2)</sup>Faculty of Engineering, Tokyo University of Science)

### 12:00-12:15 D2-019-008

希土類シリケートにおける粒界と欠陥形成エネルギーの第一原理計算 / Study of Grain Boundary and Defect Formation Energy in Yb<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub> and Yb<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub> Materials by First Principles Calculations

Ashim Kumar SAHA<sup>1)</sup>, Yusuke SUMI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup>, Masashi WADA<sup>3)</sup>, Satoshi KITAOKA<sup>3)</sup> (<sup>1)</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, <sup>3)</sup>Materials Research and Development Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

### 12:15-12:30 D2-019-009

Characterization of Σ5 Grain Boundary of Methyl-Ammonium Lead Triiodide Perovskite using Density Function Theory

Abdullah Al ASAD, Kenji TSURUTA (Dept. of Electrical and Electronic Engineering, Okayama University)

12月19日(水)  
December 19 (Wed.)

西日本総合展示場 AIM 3F 314会議室(R会場)  
West Japan General Exhibition Center AIM 3F Room 314

## 午後の部 Afternoon Oral Session

座長：横井 達矢(名古屋大学)  
Chair：Tatsuya YOKOI (Nagoya University)

### 14:30-14:45 D2-019-010

3d遷移金属溶質のbcc鉄粒界への偏析：第一原理局所エネルギーによる解析 / Grain-Boundary Segregation of 3d-Transition Metal Solutes in bcc Fe: *Ab Initio* Local-Energy Approach

徐 卓、田中 真悟、香山 正憲 (産業技術総合研究所)

Zhuo XU, Shingo TANAKA, Masanori KOHYAMA (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

### 14:45-15:00 D2-019-011

第一原理計算を用いたWの粒界近傍におけるHeクラスターの拡散 / First-principles investigation of migration of clustering He near bcc-W grain boundaries

林 拓実<sup>1)</sup>、田村 友幸<sup>1,2)</sup>、小林 亮<sup>1,2)</sup>、尾形 修司<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>名古屋工業大学大学院工学研究科、<sup>2)</sup>物質・材料研究機構)

Takumi HAYASHI<sup>1)</sup>, Tomoyuki TAMURA<sup>1,2)</sup>, Ryo KOBAYASHI<sup>1,2)</sup>, Shuji OGATA<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>Graduate School of Engineering, Nagoya Institute of Technology, <sup>2)</sup>National Institute for Materials Science)

### 15:00-15:15 D2-019-012

マイクロスコピックフェーズフィールド法によるアルミニウム中の転位芯構造の解析 / Microscopic Phase-field study on dislocation core structure in aluminum

森 英喜 (産業技術短期大学)

Hideki MORI (College of Industrial Technology)

## 午後の部 Afternoon Oral Session

座長：上杉 徳照(大阪府立大学)  
Chair：Tokuteru UESUGI (Osaka Prefecture University)

### 15:15-15:30 D2-019-013

Liイオン電池の新規正極材料に向けたキノン分子内包SWCNTの大規模DFTシミュレーション / Large-Scale DFT Simulation of Quinones@SWCNT for Novel Cathode of Li-ion Battery

都築 貴寛<sup>1)</sup>、尾形 修司<sup>1)</sup>、浦長瀬 正幸<sup>1)</sup>、小林 亮<sup>1,2)</sup>、田村 友幸<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>名古屋工業大学大学院工学研究科、<sup>2)</sup>物質・材料研究機構)

Takahiro TSUZUKI<sup>1)</sup>, Shuji OGATA<sup>1)</sup>, Masayuki URANAGASE<sup>1)</sup>, Ryo KOBAYASHI<sup>1,2)</sup>, Tomoyuki TAMURA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Graduate of Engineering, Nagoya Institute of Technology, <sup>2)</sup>National Institute for Materials Science)

### 15:30-15:45 D2-019-014

酸化ガリウム多形におけるホールポーラロンの第一原理計算 / First-Principles Study of Hole Polarons in Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Polymorphs

我毛 智哉<sup>1)</sup>、熊谷 悠<sup>2)</sup>、大場 史康<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料研究所、<sup>2)</sup>東京工業大学元素戦略研究センター)

Tomoya GAKE<sup>1)</sup>, Yu KUMAGAI<sup>2)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>Laboratory for Materials and Structures, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, <sup>2)</sup>Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology)

### 15:45-16:00 D2-019-015

プロトン伝導体LaScO<sub>3</sub>における点欠陥安定性解析 / First-principles analysis of point defects in proton conductor LaScO<sub>3</sub>

田口 綾子<sup>1,2)</sup>、小川 貴史<sup>1)</sup>、桑原 彰秀<sup>1,2)</sup>、  
Craig A. J. FISHER<sup>1)</sup> (1)ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所、<sup>2)</sup>物質材料研究機構統合型材料開発・  
情報基盤部門)

Ayako TAGUCHI<sup>1,2)</sup>, Takafumi OGAWA<sup>1)</sup>,  
Akihide KUWABARA<sup>1,2)</sup>, Craig A. J. FISHER<sup>1)</sup>  
(1) Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center, <sup>2)</sup> MaDIS, National Institute for  
Materials Science)

16:00 ~ 16:15 休憩

## 午後の部 Afternoon Oral Session

座長：東後 篤史(京都大学)  
Chair：Atsushi TOGO (Kyoto University)

16:15-16:45 Invited D2-I19-016

固体における非平衡電子フォノンの超高速ダイナミクス / Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons and phonons in solids

小野 頌太(岐阜大学工学部電気電子・情報工学科)

Shota ONO (Department of Electrical, Electronic and  
Computer Engineering, Gifu University)

16:45-17:00 D2-O19-017

分子・格子動力学法を併用したフォノン熱伝導の周波数解析 / Modal Analysis of Phonon Thermal Transport by Combination of Molecular and Lattice Dynamics

藤井 進<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (1)大阪大学 大学院工学研究科、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所)

Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (1) Graduate  
School of Engineering, Osaka University,  
<sup>2)</sup> Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center)

17:00-17:15 D2-O19-018

第一原理計算によるアンチペロブスカイトの歪誘起ポーラーメタル相の予測 / Strain-Induced Polar Metal Phases in Antiperovskites from First Principles

望月 泰英<sup>1)</sup>、熊谷 悠<sup>2)</sup>、赤松 寛文<sup>3)</sup>、大場 史康<sup>1)</sup>  
(1)東京工業大学科学技術創成研究院フロンティア材料  
研究所、<sup>2)</sup>東京工業大学元素戦略研究センター、<sup>3)</sup>九州  
大学大学院工学研究院応用化学部門)

Yasuhide MOCHIZUKI<sup>1)</sup>, Yu KUMAGAI<sup>2)</sup>,  
Hirofumi AKAMATSU<sup>3)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1)</sup>  
(1) Laboratory for Materials and Structures, Institute of  
Innovative Research, Tokyo Institute of  
Technology, <sup>2)</sup> Materials Research Center for Element  
Strategy, Tokyo Institute of Technology, <sup>3)</sup> Department  
of Applied Chemistry, Graduate School of Engineering,  
Kyushu University)

## 午後の部 Afternoon Oral Session

座長：小野 頌太(岐阜大学)  
Chair：Shota ONO (Gifu University)

17:15-17:30 D2-O19-019

耐環境コーティング材料の熱膨張制御 / Controlling Thermal Expansion of Materials for Environmental Barrier Coatings

山本 将太郎<sup>1)</sup>、角 裕輔<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup>  
(1)大阪大学 大学院工学研究科、<sup>2)</sup>ファインセラミックス  
センター ナノ構造研究所)

Shotaro YAMAMOTO<sup>1)</sup>, Yusuke SUMI<sup>1)</sup>,  
Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (1) Graduate  
School of Engineering, Osaka University,  
<sup>2)</sup> Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center)

17:30-17:45 D2-O19-020

配位空間上の幾何学と平衡状態の巨視的性質 / Geometry in Configuration Space and Macroscopic Property in Thermodynamic Equilibrium State

大田 将之、弓削 是貴(京都大学大学院工学研究科)

Shouno OHTA, Koretaka YUGE (Graduate School of  
Materials Science and Engineering, University of  
Kyoto)

17:45-18:00 D2-O19-021

ペンタグラフェンー最近の進展ー / Penta-graphene: Recent Progress

川添 良幸(東北大学未来科学技術共同研究センター)

Yoshiyuki KAWAZOE (New Industry Creation  
Hatchery Center, Tohoku University)

12月20日(木)  
December 20 (Thu.)

北九州国際会議場 21会議室A,B (E会場)  
Kitakyushu International Conference Center Room 21A, B

## 午前の部 Morning Oral Session

座長：Craig A. J. FISHER(ファインセラミックスセンター)  
Chair：Craig A. J. FISHER (JFCC)

8:30-9:00 Invited D2-I20-001

計算機シミュレーションを自動化するためのワークフローエンジンの開発 / Software development of workflow engine to automate mixed computer simulations

東後 篤史<sup>1)</sup>、田中 功<sup>1,2)</sup> (1)京都大学構造材料元素戦略研究拠点、<sup>2)</sup>京都大学工学研究科材料工学専攻)

Atsushi TOGO<sup>1)</sup>, Isao TANAKA<sup>1,2)</sup> (1) Elements  
Strategy Initiative for Structural Materials, Kyoto  
University, <sup>2)</sup> Department of Materials Science and  
Engineering, Kyoto University)

**9:00-9:15 D2-020-002**

酸化物表面における酸素空孔生成と空孔への分子吸着エネルギーの密度汎関数法計算 / Density Functional Theory Calculations of Oxygen-Vacancy Formation and Subsequent Molecule Adsorptions on Oxide Surfaces

日沼 洋陽<sup>1,2)</sup>、鳥屋尾 隆<sup>3,4)</sup>、蒲池 高志<sup>4,5)</sup>、前野 禪<sup>3)</sup>、高草木 達<sup>3)</sup>、古川 森也<sup>3,4)</sup>、瀧川 一学<sup>6,7)</sup>、清水 研一<sup>3,4)</sup> (<sup>1)</sup>千葉大学先進科学センター、<sup>2)</sup>物質・材料開発機構情報統合型物質・材料研究拠点、<sup>3)</sup>北海道大学触媒科学研究所、<sup>4)</sup>京都大学触媒・電池元素戦略ユニット、<sup>5)</sup>福岡工業大学工学部、<sup>6)</sup>北海道大学大学院情報科学研究科、<sup>7)</sup>JST さきがけ)

Yoyo HINUMA<sup>1,2)</sup>, Takashi TOYAO<sup>3,4)</sup>, Takashi KAMACHI<sup>4,5)</sup>, Zen MAENO<sup>3)</sup>, Satoru TAKAKUSAGI<sup>3)</sup>, Shinya FURUKAWA<sup>3,4)</sup>, Ichigaku TAKIGAWA<sup>6,7)</sup>, Ken-ichi SHIMIZU<sup>3,4)</sup> (<sup>1)</sup>Center for Frontier Science, Chiba University, <sup>2)</sup>Center for Materials Research by Information Integration, Research and Services Division of Materials Data and Integrated System, National Institute for Materials Science, <sup>3)</sup>Institute for Catalysis, Hokkaido University, <sup>4)</sup>Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries, Kyoto University, <sup>5)</sup>Department of Life, Environment and Materials Science, Fukuoka Institute of Technology, <sup>6)</sup>Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University, <sup>7)</sup>PRESTO, Japan Science and Technology Agency)

**9:15-9:30 D2-020-003**

第一原理計算と遺伝的アルゴリズムによる有機-無機ハイブリッド材料の状態図予測 / The phase diagram prediction of organic-inorganic hybrid materials

横山 智康<sup>1)</sup>、大内 暁<sup>1)</sup>、井垣 恵美子<sup>1)</sup>、笹川 崇男<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>パナソニック株式会社 テクノロジーイノベーション本部、<sup>2)</sup>東京工業大学 科学技術創生研究院 フロンティア材料研究所)

Tomoyasu YOKOYAMA<sup>1)</sup>, Satoru OHUCHI<sup>1)</sup>, Emiko IGAKI<sup>1)</sup>, Takako SASAGAWA<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>Technology Innovation Division, Panasonic Corporation, <sup>2)</sup>Materials and Structures Laboratory, Tokyo Institute of Technology)

**午前の部**  
Morning Oral Session

座長：Hannes RAEBIGER (横浜国立大学)  
Chair：Hannes RAEBIGER (Yokohama National University)

**9:30-10:00 Invited D2-I20-004**

炭素クラスター陰イオンおよび炭化水素陰イオンの化学 / Chemistry of small carbon cluster anions and carbon hydride anions

吉田 大輔、高橋 開人 (中央研究院原子と分子科学研究所)

Daisuke YOSHIDA, Kaito TAKAHASHI (Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica)

**10:00-10:15 D2-020-005**

波動関数理論に基づいた準粒子スペクトル計算：結合クラスター理論からの1粒子グリーン関数構築 / Quasi-particle spectrum calculations based on wave-function theory: One-particle Green's function from coupled-cluster singles and doubles (GFCCSD)

松下 雄一郎 (東京工業大学)

Yu-ichiro MATSUSHITA (Tokyo Institute of Technology)

**12月20日 (木)**  
December 20 (Thu.)

北九州国際会議場 21会議室A,B (E会場)  
Kitakyushu International Conference Center Room 21A, B

**午後の部**  
Afternoon Oral Session

座長：小谷 岳生 (鳥取大学)  
Chair：Takao KOTANI (Tottori University)

**14:30-15:00 Invited D2-I20-006**

磁性材料の第一原理電子論 / First-principles electron theory of magnetic materials

合田 義弘 (東京工業大学物質理工学院)

Yoshihiro GOHDA (Dept. Mater. Sci. Eng., Tokyo Tech)

**15:00-15:15 D2-020-007**

強磁性半導体であるCrをドーピングした $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の計算 / Calculation of ferromagnetic semiconductors Cr doped  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

市橋 広大、レービガー ハンネス (横浜国立大学大学院理工学府)

Kodai ICHIHASHI, Hannes RAEBIGER (Science and Engineering, Yokohama National University)

**15:15-15:30 D2-020-008**

Bi原子吸着したIn原子鎖における新奇1次元Rashba効果の第一原理計算 / First-principles calculations of a new 1D Rashba system: Bi-adsorbed In atomic chains

田中 友規、合田 義弘 (東京工業大学)

Tomonori TANAKA, Yoshihiro GOHDA (Tokyo Institute of Technology)

**15:30 ~ 15:45 休憩**

**午後の部**  
Afternoon Oral Session

座長：合田 義弘 (東京工業大学)  
Chair：Yoshihiro GOHDA (Tokyo Institute of Technology)

**15:45-16:00 D2-020-009**

原子配置に依存するMn<sub>2-x</sub>Cr<sub>x</sub>SbにおけるCrの優先サイトの欠如 / Lack of Cr Site Preference in Mn<sub>2-x</sub>Cr<sub>x</sub>Sb Dependig on Atomic Disorder

代田 陸、レービガー ハンネス (横浜国立大学大学院理工学府)

Riku SHIROTA, Hannes RAEBIGER (Graduate School of Engineering Science, Yokohama National University)

**16:00-16:15 D2-O20-010**

First-principles study of local structures of lithium iron tri-fluoride and substitution effect / 第一原理計算による $\text{Li}_x\text{FeF}_3$ の局所構造と置換の影響

森 正弘、田中 真悟 (産業技術総合研究所)

Masahiro MORI, Shingo TANAKA (National Institution of Advanced Industrial Science and Technology)

**16:15-16:30 D2-O20-011**

第一原理計算によるバリウムチタン酸窒化物中の複合欠陥の解析 / First-Principles Study of Defects Structures in  $\text{BaTiO}_{3-x}\text{N}_{2x/3}$

設楽 一希<sup>1,2,3</sup>、小川 貴史<sup>2</sup>、桑原 彰秀<sup>2,3</sup>、竹入 史隆<sup>4</sup>、陰山 洋<sup>5</sup>、森分 博紀<sup>2,3</sup> (1)大阪大学接合科学研究所、(2)ファインセラミックスセンターナノ構造研究所、(3)物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門、(4)分子科学研究所、(5)京都大学大学院工学研究科)

Kazuki SHITARA<sup>1,2,3</sup>, Takafumi OGAWA<sup>2</sup>, Akihide KUWABARA<sup>2,3</sup>, Fumitaka TAKEIRI<sup>4</sup>, Hiroshi KAGEYAMA<sup>5</sup>, Hiroki MORIWAKE<sup>2,3</sup> (1)Joining and Welding Research Institute, Osaka University, (2)Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, (3)Research and Service Division of Materials Data and Integrated System, National Institute for Materials Science, (4)Institute for Molecular Science, (5)Graduate School of Engineering, Kyoto University)

12月20日(木)

December 20 (Thu.)

北九州国際会議場 イベントホール

Kitakyushu International Conference Center Event Hall

ポスターセッション

Poster Session

**10:00-11:50 D2-P20-001**

ジアゾニウム塩修飾したカーボンナノチューブの熱電効果について / *Ab initio* study on thermoelectric effects of carbon nanotubes modified by diazonium salt

荒木 那由<sup>1</sup>、山本 貴博<sup>1,2</sup> (1)東京理科大学大学院工学研究科、(2)東京理科大学総合研究院ナノカーボン研究部門)

Nayu ARAKI<sup>1</sup>, Takahiro YAMAMOTO<sup>1,2</sup> (1)Graduate School of Engineering, Tokyo University of Science, (2)Division of Nanocarbon Reserch, RIST, Tokyo University of Science)

**10:00-11:50 D2-P20-002**

摂動分子動力学法によるSi界面におけるナノスケールでの熱輸送現象 / Nanoscale thermal transport across Si interfaces by perturbed molecular dynamics

渡辺 直樹<sup>1</sup>、藤井 進<sup>1</sup>、船井 浩平<sup>1</sup>、吉矢 真人<sup>1,2</sup> (1)大阪大学 大学院工学研究科、(2)ファインセラミックセンター ナノ構造研究所)

Naoki WATANABE<sup>1</sup>, Susumu FUJII<sup>1</sup>, Kohei FUNAI<sup>1</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2</sup> (1)Graduate School of Engineering, Osaka University, (2)Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

**10:00-11:50 D2-P20-003**

$^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ランダム超格子グラフェンのフォノン熱伝導 / Phonon thermal transport in  $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$  graphene random superlattices

藤崎 小太郎、山本 貴博 (東京理科大学大学院工学研究科電気工学専攻)

Kotaro FUJISAKI, Takahiro YAMAMOTO (Department of Electrical Engineering, Tokyo University of Science)

**10:00-11:50 D2-P20-004**

第一原理計算を用いたホイスラー型 $\text{Fe}_2\text{VAl}$ 熱電変換材料の格子熱伝導率解析 / Lattice Thermal Conductivity of Heusler-Type  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  Thermoelectric Materials from First Principle Calculation

宮崎 秀俊<sup>1</sup>、田村 友幸<sup>1</sup>、木村 耕治<sup>1</sup>、三上 祐史<sup>2</sup>、西野 洋一<sup>1</sup> (1)名古屋工業大学工学部物理工学科、(2)産業技術総合研究所)

Hidewtoshi MIYAZAKI<sup>1</sup>, Tomoyuki TAMURA<sup>1</sup>, Koji KIMURA<sup>1</sup>, Masashi MIKAMI<sup>2</sup>, Yoichi NISHINO<sup>1</sup> (1)Department of Physical Science and Engineering, Nagoya Institute of Technology, (2)National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

**10:00-11:50 D2-P20-005**

窒素ドーピングしたカーボンナノチューブの電子輸送シミュレーション：フォノンによる局在現象の消失 / Computational study of electronic transport in a nitrogen-doped carbon nanotube focusing on disappearance of localization phenomena due to phonon scattering

石関 圭輔<sup>1</sup>、笹岡 健二<sup>2</sup>、高島 健悟<sup>3</sup>、山本 貴博<sup>1,2,3</sup> (1)東京理科大学大学院工学研究科電気工学専攻、(2)東京理科大学総合研究院W-FST、(3)東京理科大学工学部)

Keisuke ISHIZEKI<sup>1</sup>, Kenji SASAOKA<sup>2</sup>, Kengo TAKASHIMA<sup>3</sup>, Takahiro YAMAMOTO<sup>1,2,3</sup> (1)Department of Electrical Engineering, Tokyo University of Science, (2)W-FST, RIST, Tokyo University of Science, (3)Faculty of Engineering, Tokyo University of Science)

**10:00-11:50 D2-P20-006**

$\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ のサーモクロミズムのレッドシフトにおけるCr添加の影響 / Role of the Cr doping on the red shift of thermochromism in  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

葛津 航太郎、山本 知之 (早稲田大学)

Kotaro SHIMAZU, Tomoyuki YAMAMOTO (Waseda University)

**10:00-11:50 D2-P20-007**

フェーズフィールド法による硫化物熱電材料の規則不規則変態 / Order-Disorder Transition in Thermoelectric Sulfides by Phase Field Modeling

中尾 紘之<sup>1)</sup>、中野 峰士<sup>1)</sup>、設樂 一希<sup>2,3)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (1)大阪大学 大学院工学研究科、2)ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所、3)大阪大学 接合科学研究所)

Hiroyuki NAKANO<sup>1)</sup>, Takahito NAKANO<sup>1)</sup>, Kazuki SHITARA<sup>2,3)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (1) Graduate School of Engineering, Osaka University, 2) Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, 3) Joining and Welding Research Institute, Osaka University)

#### 10:00-11:50 D2-P20-008

元素添加によるSr-Al-O: Mn<sup>4+</sup>赤色蛍光体の発光強度の向上 / Enhancement of Emission Intensity of Sr-Al-O: Mn<sup>4+</sup> Red Phosphor by Additional Doping

瀧 裕紀、山本 知之、ミハイル ブリック、メルダッド スホニ (早稲田大学基幹理工学研究科)

Hironori TAKI, Tomoyuki YAMAMOTO, Brik G MIKHAIL, Subhoni MEKHRDOD (Faculty of Science and Engineering, Waseda University)

#### 10:00-11:50 D2-P20-009

第一原理計算によるAuCuAl-X合金の粒界偏析 / Grain boundary segregation in AuCuAl-X alloys from first-principles calculations

芦野 秀治<sup>1)</sup>、上杉 徳照<sup>1)</sup>、海瀬 晃<sup>2)</sup>、田原 正樹<sup>2)</sup>、細田 秀樹<sup>2)</sup>、瀧川 順庸<sup>1)</sup>、東 健司<sup>1)</sup> (1)大阪府立大学 大学院工学研究科マテリアル工学分野、2)東京工業大学 科学技術創成研究院)

Shuji ASHINO<sup>1)</sup>, Tokuteru UESUGI<sup>1)</sup>, Akira UMISE<sup>2)</sup>, Masaki TAHARA<sup>2)</sup>, Hideki HOSODA<sup>2)</sup>, Yorinobu TAKIGAWA<sup>1)</sup>, Kenji HIGASHI<sup>1)</sup> (1) Department of Materials Science, Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University, 2) Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology)

#### 10:00-11:50 D2-P20-010

β-リン酸三カルシウムにおけるFeの固溶機構 / Substitution Mechanism of Fe Ions in β-Tricalcium Phosphate

荒川 顕佑、山本 知之 (早稲田大学基幹理工学研究科)

Kensuke ARAKAWA, Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty of Science and Engineering, Waseda University)

#### 10:00-11:50 D2-P20-011

Pd/ZnO極性界面の原子構造と結合特性 / Atomic structure and bonding properties of polarized Pd/ZnO interface

李 洪奉<sup>1,2)</sup>、斎藤 光浩<sup>1,3)</sup>、陳 春林<sup>4)</sup>、井上 和俊<sup>1)</sup>、赤木 和人<sup>1)</sup>、幾原 雄一<sup>1,3,5)</sup> (1)東北大学材料科学高等研究所、2)江蘇大学材料科学与工程学院、3)東京大学大学院工学系研究科総合研究機構、4)中国科学院金属研究所、5)ファインセラミックスセンター)

Hongping LI<sup>1,2)</sup>, Mitsuhiro SAITO<sup>1,3)</sup>, Chunlin CHEN<sup>4)</sup>, Kazutoshi INOUE<sup>1)</sup>, Kazuto AKAGI<sup>1)</sup>, Yuichi IKUHARA<sup>1,3,5)</sup> (1) Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University, 2) Institute for Advanced Materials, School of Materials Science and Engineering, Jiangsu University, 3) Institute of Engineering Innovation, The University of Tokyo, 4) Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, 5) Japan Fine Ceramics Center)

#### 10:00-11:50 D2-P20-012

Inverse Temperature Crystallizationにより作製されたRb<sub>x</sub>MA<sub>y</sub>FA<sub>1-x-y</sub>PbI<sub>3</sub>単結晶の特性評価 / Characterization of Rb<sub>x</sub>MA<sub>y</sub>FA<sub>1-x-y</sub>PbI<sub>3</sub> Single Crystals Synthesized by Inverse Temperature Crystallization

石田 真規、山本 知之 (早稲田大学基幹理工学研究科)

Masanori ISHIDA, Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty of Science and Engineering, Waseda University)

#### 10:00-11:50 D2-P20-013

密度汎関数理論によるルドルステン-ポッパー層状酸化物強誘電体の探索 / Search for Ruddlesden-Popper layered oxide ferroelectrics by density functional theory calculations

白井 佑弥、赤松 寛文、長谷川 丈二、林 克郎 (九州大学大学院工学府)

Yuya SHIRAI, Hirofumi AKAMATSU, George HASEGAWA, Katsuro HAYASHI (Kyushu university)

#### 10:00-11:50 D2-P20-014

第一原理計算によるペロブスカイト型LaScO<sub>3</sub>の相安定性と相転移機構 / First-principles calculations of perovskite-structured LaScO<sub>3</sub>: Phase stabilities and transition mechanisms

フィッシャー クレイグ、田口 綾子、小川 貴史、桑原 彰秀 (ファインセラミックスセンター)

Craig A. J. FISHER, Ayako TAGUCHI, Takafumi OGAWA, Akihide KUWABARA (Japan Fine Ceramics Center)

#### 10:00-11:50 D2-P20-015

BaおよびMn添加Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub>の磁化発現機構 / Magnetization mechanism of Ba and Mn incorporated Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub>

小船井 真悟<sup>1)</sup>、ザファリ ウマール<sup>2)</sup>、スホニ メヘルドット<sup>2)</sup>、山本 知之<sup>1)</sup> (1)早稲田大学、2)タジキスタン アカデミーオブサイエンス)

Shingo OBUNAI<sup>1)</sup>, Umar ZAFARI<sup>2)</sup>, Mekhrdod SUBHONI<sup>2)</sup>, Tomoyuki YAMAMOTO<sup>1)</sup> (1) Waseda University, 2) Academy of Sciences, Tajikistan)

#### 10:00-11:50 D2-P20-016

リチウムイオン電池用SiO負極へのLi挿入の第一原理計算 / First-principles study of Li insertion into SiO anode in Li ion batteries

西野 雄哉<sup>1)</sup>、田村 友幸<sup>1,2)</sup>、小林 亮<sup>1,2)</sup>、尾形 修司<sup>1)</sup> (1)名古屋工業大学大学院工学研究科、2)物質・材料研究機構)

Yuya NISHINO<sup>1</sup>, Tomoyuki TAMURA<sup>1,2</sup>,  
Ryo KOBAYASHI<sup>1,2</sup>, Shuji OGATA<sup>1</sup> (<sup>1</sup> Nagoya  
Institute of Technology, <sup>2</sup> National Institute for  
Materials Science)

**10:00-11:50 D2-P20-017**

In/Si (111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B表面の表面構造探索 / First-  
principles study of In/Si (111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -B surface  
structures

馬場 啓太、合田 義弘 (東京工業大学物質理工学院)

Keita BABA, Yoshihiro GOHDA (Department of  
Materials Science and Engineering, Tokyo Institute of  
Technology)

**10:00-11:50 D2-P20-018**

希土類添加BaBiO<sub>3</sub>のBiイオンの電子状態解析 /  
Charge State Analysis of Bi Ions in Rare-Earth  
Doped BaBiO<sub>3</sub>

荒井 凜太郎、鎌田 暁久、山本 知之 (早稲田大学大  
学院基幹理工学研究科)

Rintaro ARAI, Akihisa KAMATA,  
Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty of Science and  
Engineering, Waseda University)

**10:00-11:50 D2-P20-019**

炭素鋼マツシブの変態における核内バリエーションが核生  
成に与える影響 / Influence of Variant Formation  
upon Nucleation during Massive-like Phase  
Transformation of Carbon Steel

黒津 啓太<sup>1</sup>、米田 将馬<sup>1</sup>、吉矢 真人<sup>1,2</sup>、安田 秀幸<sup>3</sup>  
(<sup>1</sup>大阪大学 大学院工学研究科、<sup>2</sup>ファインセラミック  
センター ナノ構造研究所、<sup>3</sup>京都大学 大学院工学研  
究科 材料工学専攻)

Keita KUROTSU<sup>1</sup>, Shoma YONEDA<sup>1</sup>,  
Masato YOSHIYA<sup>1,2</sup>, Hideyuki YASUDA<sup>3</sup> (<sup>1</sup> Graduate  
School of Engineering, Osaka University,  
<sup>2</sup> Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine  
Ceramics Center, <sup>3</sup> Department of Materials Science  
and Engineering, Kyoto University)

**10:00-11:50 D2-P20-020**

分子動力学法を用いたタングステンへの放射能損傷に  
関する研究 / Effects of solution on radiation  
damage in tungsten: a molecular dynamics study

横地 陽紀<sup>1</sup>、小林 亮<sup>1,2</sup>、田村 友幸<sup>1,2</sup>、尾形 修司<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>名古屋工業大学大学院工学研究科、<sup>2</sup>物質・材料研究  
機構)

Haruki YOKOCHI<sup>1</sup>, Ryo KOBAYASHI<sup>1,2</sup>,  
Tomoyuki TAMURA<sup>1,2</sup>, Shuji OGATA<sup>1</sup> (<sup>1</sup> Nagoya  
Institute of Technology, <sup>2</sup> National Institute for  
Materials Science)