

# Symposium D-4

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

オーガナイザー:

代表委員

吉矢 真人(大阪大学)

連絡委員

吉矢 真人(大阪大学)

Craig A. J. Fisher(ファインセラミックスセンター)

オーガナイザー

大場 史康(東京工業大学)

上杉 徳照(大阪府立大学)

篠嶋 妥(茨城大学)

小谷 岳生(鳥取大学)

香山 正憲(産総研)

田村 友幸(名古屋工業大学)

Hannes Raebiger(横浜国立大学)

Organizers:

Representative

Masato YOSHIYA (Osaka University)

Correspondence

Masato YOSHIYA (Osaka University)

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

Organizer

Fumiyasu OBA (Tokyo Institute of Technology)

Tokuteru UESUGI (Osaka Prefecture University)

Yasushi SASAJIMA (Ibaraki University)

Takao KOTANI (Tottori University)

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

Tomoyuki TAMURA (Nagoya Institute of Technology)

Hannes RAEBIGER (Yokohama National University)

12月19日(月)  
December 19 (Mon.)

波止場会館 大会議室  
Hatoba Kaikan Meeting Room L

午前の部

Morning Oral Session

座長: 上杉 徳照(大阪府立大学)

Chair: Tokuteru UESUGI (Osaka Prefecture University)

9:30-10:10 Invited D4-119-001

非金属材料中の点欠陥に対する第一原理計算 / First-principles investigation of point defects in non-metallic materials

熊谷 悠(東京工業大学元素戦略研究センター)

Yu KUMAGAI (Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology)

10:10-10:30 D4-019-002

二元系酸化物の表面ハイスルーブット探索 / Calculating binary oxide surface properties with a high-throughput procedure

日沼 洋陽<sup>1,2)</sup>、熊谷 悠<sup>3)</sup>、林 博之<sup>1)</sup>、大場 史康<sup>2,3,4)</sup>、田中 功<sup>1,2,5,6)</sup> (1)京都大学工学研究科、(2)物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点、(3)東京工業大学元素戦略研究センター、(4)東京工業大学フロンティア材料研究所、(5)京都大学構造材料元素戦略研究拠点、(6)ファインセラミックスセンター)

Yoyo HINUMA<sup>1,2)</sup>, Yu KUMAGAI<sup>3)</sup>, Hiroyuki HAYASHI<sup>1)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>2,3,4)</sup>, Isao TANAKA<sup>1,2,5,6)</sup> (1)Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, (2)Center for Materials Research by Information Integration, National Institute for Materials Science, (3)Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology, (4)Materials and Structures Laboratory, Tokyo Institute of Technology, (5)Elements Strategy Initiative for Structural Materials, Kyoto University, (6)Japan Fine Ceramics Center)

10:30 ~ 10:40 Coffee Break

午前の部

Morning Oral Session

座長: 小谷 岳生(鳥取大学)

Chair: Takeo KOTANI (Tottori University)

10:40-11:20 Invited D4-119-003

企業におけるパワーデバイス開発とTCAD活用、新材料への展望 / Development of Semiconductor Power Devices and TCAD Utilization in Industries, the Outlook toward Novel Materials

永久 克己、酒井 敦、秋山 豊、山口 泰男(ルネサスエレクトロニクス株式会社)

Katsumi EIKYU, Atsushi SAKAI, Yutaka AKIYAMA, Yasuo YAMAGUCHI (Renesas Electronics Corp.)

11:20-11:40 D4-019-004

マイクロマグネティックシミュレーションによる垂直MTJの電圧アシスト磁化反転 / Micromagnetic Simulation of Voltage-Assisted Unipolar Switching in Perpendicular Magnetic Tunnel Junction

吉田 親子(富士通)

Chikako YOSHIDA (Fujitsu Ltd.)

11:40-12:00 D4-019-005

準粒子自己無撞着GW法に基づくInAs/GaSb超格子のバンド構造 / Band structures for InAs/GaSb superlattices based on the quasiparticle self-consistent GW method

大塚 順<sup>1)</sup>、澤村 明賢<sup>1)</sup>、加藤 隆<sup>1)</sup>、榎原 寛史<sup>2)</sup>、小谷 岳生<sup>2)</sup> (1)住友電工、(2)鳥取大学工学研究科)

Jun OTSUKA<sup>1)</sup>, Akitaka SAWAMURA<sup>1)</sup>, Takashi KATO<sup>1)</sup>, Hirofumi SAKAKIBARA<sup>2)</sup>, Takao KOTANI<sup>2)</sup> (1)Sumitomo Electric Industries, Ltd., (2)Graduate School of Engineering, Tottori University)

15:30 ~ 16:00 Coffee Break

午後の部

Afternoon Oral Session

座長: 熊谷 悠(東京工業大学)

Chair: Yu KUMAGAI (Tokyo Institute of Technology)

16:00-16:20 D4-019-006

調和・非調和の第一原理フォノン計算の応用 / Applications of first-principles harmonic and anharmonic phonon calculations

東後 篤史<sup>1,2)</sup>、田中 功<sup>1,2,3)</sup> (1)京都大学構造材料元素戦略研究拠点、2)物質材料研究機構、3)京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Atsushi TOGO<sup>1,2)</sup>, Isao TANAKA<sup>1,2,3)</sup> (1)Elements Strategy Initiative for Structure Materials (ESISM), Kyoto University, 2)National Institute for Materials Science, 3)Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

**16:20-16:40 D4-O19-007**

新たなフォノン計算法：電子間有効相互作用Wを介しての直接計算 / New Method of Phonon Calculation: Direct Calculation using Effective Interaction between Electrons

上岡 良季<sup>1)</sup>、小谷 岳生<sup>2)</sup>、鎌倉 良成<sup>1)</sup> (1)大阪大学工学研究科、2)鳥取大学工学研究科)

Yoshiki UEOKA<sup>1)</sup>, Takao KOTANI<sup>2)</sup>, Yoshinari KAMAKURA<sup>1)</sup> (1)Graduate School of Engineering, Osaka University, 2)Graduate School of Engineering, Tottori University)

**16:40-17:00 D4-O19-008**

第一原理格子力学によるシリサイドの熱膨張率支配因子の系統的な解析 / Systematic Studies of the Dominant Factors of Coefficient of Thermal Expansion in Silicides by *ab initio* Lattice Dynamics

石村 亮祐<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知能・機能創成工学専攻、2)ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Ryosuke ISHIMURA<sup>1)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (1)Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, 2)Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

**17:00-17:20 D4-O19-009**

Multi-scale simulation to rationale thermal conductivity for soft materials in context to material informatics

Abhijit CHATTERJEE (DASSAULT SYSTEMES BIOVIA)

**17:20 ~ 17:30 Coffee Break**

**午後の部  
Afternoon Oral Session**

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

**17:30-17:50 D4-O19-010**

Correlation of Segregation Energy for Ni and Fe with other Element Data

Wilfried WUNDELRIICH (Material Science Department, Tokai University)

**17:50-18:10 D4-O19-011**

NASICON型固体電解質における電気化学的安定性およびリチウムイオン伝導性の計算科学研究 / Computational study of electrochemical stability and lithium-ion conduction in NASICON-type solid electrolyte

野田 祐輔<sup>1)</sup>、中野 高毅<sup>2)</sup>、中山 将伸<sup>1,2,3,4)</sup> (1)物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点、2)名古屋工業大学生命・応用化学科、3)物質・材料研究機構ナノ材料科学環境拠点、4)京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点)

Yusuke NODA<sup>1)</sup>, Koki NAKANO<sup>2)</sup>, Masanobu NAKAYAMA<sup>1,2,3,4)</sup> (1)Materials Research by Information Integration Initiative, National Institute for Materials Science, 2)Department of Life Science and Applied Chemistry, Nagoya Institute of Technology, 3)Global Research Center for Environment and Energy based on Nanomaterials Science, National Institute for Materials Science, 4)Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries, Kyoto University)

**18:10-18:30 D4-O19-012**

ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルによるアルミ中の転位芯構造解析 / Analysis of dislocation core structure in Aluminum by neural network atomic potential

森 英喜(産業技術短期大学機械工学科)

Hideki MORI (Department of Mechanical Engineering, College of Industrial Technology)

**12月20日(火)**

**December 20 (Tue.)**

万国橋会議センター 402号室  
Bankokubashi Kaigi Center, Room 402

**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)

**9:30-10:10 Invited D4-I20-001**

格子欠陥近傍応力分布の第一原理的描像 / *Ab initio* description of stress distribution in the vicinity of lattice defects

椎原 良典(豊田工業大学大学院工学研究科)

Yoshinori SHIHHARA (Graduate School of Engineering, Toyota Technological Institute)

**10:10-10:30 D4-O20-002**

熱力学的平衡状態における液相構造の理論研究 / Theoretical study on liquid phase structure in thermodynamically equilibrium state

村田 信、弓削 是貴(京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Makoto MURATA, Koretaka YUGE (Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

**10:30 ~ 10:40 Coffee Break**

午前の部  
Morning Oral Session

座長：都留 智仁(日本原子力研究開発機構)  
Chair：Tomohito TSURU(Japan Atomic Energy Agency)

10:40-11:00 D4-O20-003

Fe粒界のsp元素偏析：第一原理局所エネルギーによる解析 / Segregation of sp-Elements at Fe Grain Boundaries: *Ab Initio* Local-Energy Analysis

バタチャラ ゴメツシュ<sup>1)</sup>、香山 正憲<sup>1)</sup>、田中 真悟<sup>1)</sup>、椎原 良典<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>産業技術総合研究所、<sup>2)</sup>豊田工業大学)

Somesh BHATTACHARYA<sup>1)</sup>, Masanori KOHYAMA<sup>1)</sup>, Shingo TANAKA<sup>1)</sup>, Yoshinori SHIHHARA<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, <sup>2)</sup>Toyota Technological Institute)

11:00-11:20 D4-O20-004

フェーズフィールド法を用いた炭素鋼 $\delta$ 相から $\gamma$ 相へのマッシュ的変態の微細組織解析 / Micro-structure Analysis of Massive-like transformation from  $\delta$  phase to  $\gamma$  phase in Carbon Steel by Using Phase Field Simulation

藤原 弘樹<sup>1)</sup>、木村 尚登<sup>1)</sup>、中村 直人<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup>、柳楽 知也<sup>1)</sup>、安田 秀幸<sup>3)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・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)

Hiroki FUJIWARA<sup>1)</sup>, Naoto KIMURA<sup>1)</sup>, Naoto NAKAMURA<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup>, Tomoya NAGIRA<sup>1)</sup>, Hideyuki YASUDA<sup>3)</sup> (<sup>1)</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, <sup>3)</sup>Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

11:20-11:40 D4-O20-005

第一原理計算による遮熱コーティング材酸化物の熱膨張率の支配因子の解析 / Analyses of the Critical Factors in Coefficient of Thermal Expansion of complex oxides for Thermal Barrier Coating by First-Principles Calculations

赤田 悠輔<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Yusuke AKADA<sup>1)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

11:40-12:00 D4-O20-006

ガラス中に添加されたTiの第一原理XANES計算 / First-principles XANES simulation for Ti doped to glass materials

田村 友幸、前田 浩孝、尾形 修司、春日 敏宏 (名古屋工業大学大学院工学研究科)

Tomoyuki TAMURA, Hirotaka MAEDA, Shuji OGATA, Toshihiro KASUGA (Nagoya Institute of Technology)

午後の部  
Afternoon Oral Session

座長：弓削 是貴(京都大学)  
Chair：Koretaka YUGE(Kyoto University)

13:00-13:40 Invited D4-I20-007

合金元素の変形と破壊への影響に関する第一原理計算 / Effects of alloying elements on deformation and fracture: First-principles approach to element strategy

都留 智仁<sup>1,2)</sup>、染川 英俊<sup>3)</sup>、山口 正剛<sup>4)</sup>、板倉 充洋<sup>4)</sup> (<sup>1)</sup>日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究センター、<sup>2)</sup>京都大学構造材料元素戦略研究拠点、<sup>3)</sup>物質・材料研究機構元素戦略材料センター、<sup>4)</sup>日本原子力研究開発機構システム計算科学センター)

Tomohito TSURU<sup>1,2)</sup>, Hidetoshi SOMEKAWA<sup>3)</sup>, Masatake YAMAGUCHI<sup>4)</sup>, Mitsuhiro ITAKURA<sup>4)</sup> (<sup>1)</sup>Nuclear Science and Engineering Center, Japan Atomic Energy Agency, <sup>2)</sup>Elements Strategy Initiative for Structural Materials, Kyoto University, <sup>3)</sup>Research Center for Strategic Materials, National Institute for Materials Science, <sup>4)</sup>Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency)

13:40-14:00 D4-O20-008

多元系合金の状態図計算手法の開発と検討 / A new automatical method to construct phase diagrams for multicomponent alloys

竹内 一仁、田中 亮平、弓削 是貴 (京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Kazuhito TAKEUCHI, Ryohei TANAKA, Koretaka YUGE (Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

14:00-14:20 D4-O20-009

アルカリケイ酸塩ガラスシミュレーションに適用する原子間相互作用の設定手法の検討 / Determination Method of Interatomic Potential for Alkali Silicate Glass Simulations

山本 優也、澤口 直哉、佐々木 眞 (室蘭工業大学大学院工学研究科)

Yuya YAMAMOTO, Naoya SAWAGUCHI, Makoto SASAKI (Graduate School of Engineering, Muroran Institute of Technology)

14:20 ~ 14:30 Coffee Break

午後の部  
Afternoon Oral Session

座長：レービガー ハンネス(横浜国立大学)  
Chair：Hannes RAEBIGER(Yokohama National University)

14:30-15:10 Invited D4-I20-010

電気化学界面における第一原理シミュレーションの最近の進展 / Recent progress in the first-principles simulation of electrochemical interfaces

大谷 実 (産業技術総合研究所)

Minoru OTANI (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

**15:10-15:30 D4-O20-011**

DFT計算による $Y_2Ti_2O_7$ 結晶中の点欠陥の研究 / Defect Chemistry in Pyrochlore-type Yttrium Titanate at High Temperature

小川 貴史<sup>1)</sup>、桑原 彰秀<sup>1)</sup>、フィッシャー クレイグ<sup>1)</sup>、森分 博紀<sup>1)</sup>、北岡 諭<sup>2)</sup> (1)ファインセラミックスセンターナノ構造研究所、2)ファインセラミックスセンター材料技術研究所)

Takafumi OGAWA<sup>1)</sup>, Akihide KUWABARA<sup>1)</sup>, Craig A.J. FISHER<sup>1)</sup>, Hiroki MORIWAKE<sup>1)</sup>, Satoshi KITAOKA<sup>2)</sup> (1) Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center, 2) Materials Research and Development Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

**15:30-15:50 D4-O20-012**

金属担体間化学結合に基づいた担持Ru粒子サイズの制御指針 / Theoretical and experimental study on the indicator for the control of Ru particle sizes on supports

中尾 琢哉<sup>1)</sup>、多田 朋史<sup>2)</sup>、北野 政明<sup>2)</sup>、笹瀬 雅人<sup>1,2)</sup>、細野 秀雄<sup>1,2)</sup> (1)東京工業大学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)

Takuya NAKAO<sup>1)</sup>, Tomofumi TADA<sup>2)</sup>, Masaaki KITANO<sup>2)</sup>, Masato SASASE<sup>1,2)</sup>, Hideo HOSONO<sup>1,2)</sup> (1) Laboratory for Materials and Structures, Tokyo Institute of Technology, 2) Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology)

15:50 ~ 16:00 Coffee Break

## 午後の部

## Afternoon Oral Session

座長：田村 友幸(名古屋工業大学)

Chair: Tomoyuki TAMURA (Nagoya Institute of Technology)

**16:00-16:20 D4-O20-013**

Siクラスレートの触媒担体への適用 / Si-clathrate for Catalyst Support by First Principles Calculation and Experimental Study

伴野 秀和<sup>1)</sup>、江口 晴樹<sup>1)</sup>、円谷 和雄<sup>2)</sup> (1)株式会社IHI、2)明治大学)

Hidekazu TOMONO<sup>1)</sup>, Haruki EGUCHI<sup>1)</sup>, Kazuo TSUMUAYA<sup>2)</sup> (1) IHI Corporation, 2) Meiji University)

**16:20-16:40 D4-O20-014**

二原子分子における共有結合安定化のメカニズム / The mechanism of stabilization for covalent bonding in diatomic molecules

吉田 大輔、レービガー ハンネス (横浜国立大学工学府)

Daisuke YOSHIDA, Hannes RAEBIGER (Graduate School of Engineering, Yokohama National University)

**16:40-17:00 D4-O20-015**

表現理論と第一原理計算に基づいた $PbTiO_3$ における $180^\circ$ 強誘電ドメイン壁移動パスの探索 / Exploration of  $180^\circ$  Ferroelectric Domain Wall Motion Pathways in  $PbTiO_3$  Based on Representation Theory and First-Principles Calculations

赤松 寛文<sup>1)</sup>、ヴァンリーベン ブライアン<sup>2)</sup>、ダボ イズマイラ<sup>2)</sup>、熊谷 悠<sup>3)</sup>、大場 史康<sup>1,3)</sup>、チェン ロンキン<sup>2)</sup>、ゴパラン ヴェンカトラマン<sup>2)</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)ペンシルバニア州立大学材料工学専攻、3)東京工業大学元素戦略研究センター)

Hirofumi AKAMATSU<sup>1)</sup>, Brian VANLEEWEN<sup>2)</sup>, Ismaila DABO<sup>2)</sup>, Yu KUMAGAI<sup>3)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1,3)</sup>, Long-qing CHEN<sup>2)</sup>, Venkatraman GOPALAN<sup>2)</sup> (1) Laboratory for Materials and Structures, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, 2) Department of Materials Science and Engineering, Pennsylvania State University, 3) Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology)

## 午後の部

## Afternoon Oral Session

座長：フィッシャー クレイグ(ファインセラミックスセンター)

Chair: Craig A. J. FISHER (JFCC)

**17:00-17:20 D4-O20-016**

第一原理に基づく長周期積層構造の熱力学的安定性 / Thermodynamic stability of a long-period stacking ordered structure based on first-principles

宮園 尚、田中 亮平、弓削 是貴 (京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Hisashi MIYAZONO, Ryohei TANAKA, Koretaka YUGE (Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

**17:20-17:40 D4-O20-017**

機械学習を用いた粒界物性予測 / Machine learning based prediction of grain-boundary properties

荒川 竜一、田村 友幸、烏山 昌幸、小林 亮、尾形 修司 (名古屋工業大学大学院工学研究科)

Ryuichi ARAKAWA, Tomoyuki TAMURA, Masayuki KARASUYAMA, Ryo KOBAYASHI, Syuji OGATA (Nagoya Institute of Technology)

**17:40-18:00 D4-O20-018**

第一原理計算による窒化銅中の固有点欠陥及び不純物点欠陥の解析 / Native Point Defects and Impurities in Copper Nitride: A First-Principles Study

原田 航<sup>1)</sup>、熊谷 悠<sup>2)</sup>、松崎 功佑<sup>2)</sup>、須崎 友文<sup>2)</sup>、大場 史康<sup>1,2)</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)

Kou HARADA<sup>1)</sup>, Yu KUMAGAI<sup>2)</sup>, Kosuke MATSUZAKI<sup>2)</sup>, Tomofumi SUSAKI<sup>2)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1,2)</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)

12月19日(月)  
December 19 (Mon.)  
横浜情報文化センター

Yokohama Media & Communications Center

ポスターセッション  
Poster Session

13:00-15:30 D4-P19-001

ウェーバー石型 tantalate  $RE_3TaO_7$  ( $RE=Y, La-Nd, Sm-Er$ ) における結晶構造と相安定性 / Structures and Stabilities of Weberite-Type Tantalates  $RE_3TaO_7$  ( $RE = Y, La-Nd, Sm-Er$ )

フィッシャー クレイグ<sup>1)</sup>、小川 貴史<sup>1)</sup>、  
ロレ オラリー<sup>2)</sup>、バニアー ローズノエル<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>ファインセラミックスセンター、<sup>2)</sup>フランス、リール第1大学)

Craig A.J. FISHER<sup>1)</sup>, Takafumi OGAWA<sup>1)</sup>,  
Aurelie ROLLE<sup>2)</sup>, Rose-noelle VANNIER<sup>2)</sup> (<sup>1)</sup>Japan Fine Ceramics Center, <sup>2)</sup>Lille University I, Lille)

13:00-15:30 D4-P19-002

X線照射による  $CH_3NH_3PbI_3$  ペロブスカイトの分解に関する XPS 分析 / XPS Analysis of degradation of  $CH_3NH_3PbI_3$  perovskite due to X-ray irradiation

元木 啓介<sup>1,2)</sup>、張江 貴大<sup>1,2)</sup>、宮沢 優<sup>2)</sup>、小林 大輔<sup>2)</sup>、  
池上 和志<sup>3)</sup>、宮坂 力<sup>3)</sup>、山本 知之<sup>1)</sup>、廣瀬 和之<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>早稲田大学、<sup>2)</sup>宇宙科学研究所、<sup>3)</sup>桐蔭横浜大学)

Keisuke MOTOKI<sup>1,2)</sup>, Takahiro HARIE<sup>1,2)</sup>,  
Yu MIYAZAWA<sup>2)</sup>, Daisuke KOBAYASHI<sup>2)</sup>,  
Masashi Ikegami<sup>3)</sup>, Tsutomu MIYASAKA<sup>3)</sup>,  
Tomoyuki YAMAMOTO<sup>1)</sup>, Kazuyuki HIROSE<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>Waseda University, <sup>2)</sup>ISAS/JAXA, <sup>3)</sup>Toin Yokohama University)

13:00-15:30 D4-P19-003

高圧下での  $CuFeS_2$  の格子構造とその電子状態 / Electronic and Lattice Properties of  $CuFeS_2$  under High Pressure

小林 一昭<sup>1)</sup>、高木 博和<sup>1,2)</sup>、下野 昌人<sup>1)</sup>、小林 伸彦<sup>2)</sup>、  
広瀬 賢二<sup>3)</sup>、辻井 直人<sup>1)</sup>、森 孝雄<sup>1)</sup> (<sup>1)</sup>国立研究開発法人 物質・材料研究機構、<sup>2)</sup>筑波大学、<sup>3)</sup>日本電気株式会社)

Kazuaki KOBAYASHI<sup>1)</sup>, Hirokazu TAKAKI<sup>1,2)</sup>,  
Masato SHIMONO<sup>1)</sup>, Nobuhiko KOBAYASHI<sup>2)</sup>,  
Kenji HIROSE<sup>3)</sup>, Naohito TSUJII<sup>1)</sup>, Takao MORI<sup>1)</sup>  
(<sup>1)</sup>National Institute for Materials Science, <sup>2)</sup>University of Tsukuba, <sup>3)</sup>NEC Corporation)

13:00-15:30 D4-P19-004

第一原理計算による層状ペロブスカイト  $La_3Ni_2O_7$  の構造不安定性 / Structural Instability in a Layered Perovskite  $La_3Ni_2O_7$ : a First Principles Study

望月 泰英<sup>1)</sup>、赤松 寛文<sup>1)</sup>、熊谷 悠<sup>2)</sup>、大場 史康<sup>1,2)</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)

Yasuhide MOCHIZUKI<sup>1)</sup>, Hirofumi AKAMATSU<sup>1)</sup>,  
Yu KUMAGAI<sup>2)</sup>, Fumiyasu OBA<sup>1,2)</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)

13:00-15:30 D4-P19-005

アルミニウム (111)、(110)、(100) 面の仕事関数に及ぼす溶質原子の影響の第一原理計算 / Effect of solute elements on work function of Al (111), (110) and (100) surfaces from first-principles calculations

樋口 公計、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)

Tomokazu HIGUCHI, Tokuteru UESUGI,  
Yorinobu TAKIGAWA, Kenji HIGASHI (Osaka Prefecture University)

13:00-15:30 D4-P19-006

$RE_2Si_2O_7$  における熱力学的安定性および熱的特性 / Analyses of thermal properties and thermodynamic stability of  $RE_2Si_2O_7$

井沖 新<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Arata IOKI<sup>1)</sup>, Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

13:00-15:30 D4-P19-007

DMD法による合金の局所原子構造と局所組成との関係の解析 / Diffusive molecular dynamics study on relation between local defective atomic structure and composition in alloys

新里 秀平<sup>1)</sup>、尾方 成信<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大学院基礎工学研究科、<sup>2)</sup>京都大学構造材料元素戦略研究拠点)

Shuhe SHINZATO<sup>1)</sup>, Shigenobu OGATA<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>Graduate School of Engineering Science, Osaka University, <sup>2)</sup>Center for Element Strategy Initiative for Structural Materials, Kyoto University)

13:00-15:30 D4-P19-008

固体電解質材料 LLTO の粒界付近における Li 拡散 / Li migration near solid-electrolyte LLTO ( $Li_{3-x}La_{2/3-x}TiO_3$ ) grain boundaries

本山 雄基、田村 友幸、小林 亮、尾形 修司 (名古屋工業大学大学院工学研究科)

Yuuki MOTOYAMA, Tomoyuki TAMURA,  
Ryo KOBAYASHI, Shuji OGATA (Nagoya Institute of Technology)

13:00-15:30 D4-P19-009

$CeO_2$  の照射による半球状物体形成過程の計算機実験 / Computer Simulation of Hemispherical-Object Formation Process by Irradiation of  $CeO_2$

神長 龍一 (茨城大学)

Ryuichi KAMINAGA (Ibaraki University)

13:00-15:30 D4-P19-010

$\delta$  相/ $\gamma$  相ヘテロ界面構造の原子レベルシミュレーション: 炭素鋼の  $\delta$ - $\gamma$  massive-like 変態への影響 / Atomistic simulations of  $\delta/\gamma$  hetero-phase boundary: Influences onto  $\delta$ - $\gamma$  massive-like phase transformation in carbon steel

中村 直人<sup>1)</sup>、藤原 弘樹<sup>2)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2,3)</sup>、  
柳楽 知也<sup>2)</sup>、安田 秀幸<sup>4)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学工学部応用理工  
学科、<sup>2)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学  
専攻、<sup>3)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究  
所、<sup>4)</sup>京都大学大学院工学研究科材料工学専攻)

Naoto NAKAMURA<sup>1)</sup>, Hiroki FUJIWARA<sup>2)</sup>,  
Masato YOSHIYA<sup>1,2,3)</sup>, Tomoya NAGIRA<sup>2)</sup>,  
Hideyuki YASUDA<sup>4)</sup> (<sup>1)</sup>Division of Mechanical,  
Materials and Manufacturing Science, Osaka  
University, <sup>2)</sup>Department of Adaptive Machine  
Systems, Osaka University, <sup>3)</sup>Nanostructures Research  
Laboratory, Japan Fine Ceramics Center,  
<sup>4)</sup>Department of Materials Science and Engineering,  
Kyoto University)

### 13:00-15:30 D4-P19-011

水酸アパタイト/リン酸三カルシウム複合体へのCuイオ  
ンの固溶機構 / Substitution mechanism of Cu ions  
in hydroxyapatite/ $\beta$ -tricalcium phosphate  
composite

福井 啓太、山本 知之 (早稲田大学理工学術院)

Keita FUKUI, Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty of  
Science and Engineering, Waseda University)

### 13:00-15:30 D4-P19-012

高温酸化物における粒界・偏析構造が熱伝導度に及ぼ  
す影響 / Influence of Grain Boundary and Point  
Defects Segregation on Thermal Conductivity of  
High Temperature Oxide

種村 柁俊<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、赤田 悠輔<sup>1)</sup>、  
吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能  
創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ  
構造研究所)

Masatoshi TANEMURA<sup>1)</sup>, Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>,  
Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Yusuke AKADA<sup>1)</sup>,  
Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Department of Adaptive  
Machine Systems, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures  
Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

### 13:00-15:30 D4-P19-013

第一原理計算を用いた絶縁破壊電界の推定 /  
Estimation of Electrical Breakdown Field by First  
Principles Calculations

山口 記功<sup>1,2)</sup>、小林 大輔<sup>2)</sup>、山本 知之<sup>1)</sup>、廣瀬 和之<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>早稲田大学 理工学術院、<sup>2)</sup>ISAS/JAXA)

Kikou YAMAGUCHI<sup>1,2)</sup>, Daisuke KOBAYASHI<sup>2)</sup>,  
Tomoyuki YAMAMOTO<sup>1)</sup>, Kazuyuki HIROSE<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>Faculty of Science and Engineering, Waseda  
University, <sup>2)</sup>ISAS/JAXA)

### 13:00-15:30 D4-P19-014

半導体におけるドーピング限界の理論的研究 /  
Theoretical Study of Doping Limits in  
Semiconductors

西谷 宣彦<sup>1)</sup>、原田 航<sup>1)</sup>、熊谷 悠<sup>2)</sup>、赤松 寛文<sup>1)</sup>、  
大場 史康<sup>1,2)</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)

Nobuhiko NISHIYA<sup>1)</sup>, Kou HARADA<sup>1)</sup>,  
Yu KUMAGAI<sup>2)</sup>, Hirohumi AKAMATSU<sup>1)</sup>,  
Fumiyasu OBA<sup>1,2)</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)

### 13:00-15:30 D4-P19-015

リン酸カルシウム系インバートガラスへのドーピング  
効果 / Doping effects on formation of CaO-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>  
invert glass

佐藤 壮太、田村 友幸、尾形 修司、小林 亮 (名古  
屋工業大学大学院 工学研究科)

Sota SATO, Tomoyuki TAMURA, Shuji OGATA,  
Ryo KOBAYASHI (Graduate School of Engineering,  
Nagoya Institute of Technology)

### 13:00-15:30 D4-P19-016

層状硫化物の熱力学的安定性と熱電特性 /  
Thermodynamic stability and thermoelectric  
properties of layered sulfides

藤本 知志<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研  
究科知能機能創成工学専攻、<sup>2)</sup>ファインセラミックスセ  
ンター・ナノ構造研究所)

Kazushi FUJIMOTO<sup>1)</sup>, Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>Department of Adaptive Machine Systems, Osaka  
University, <sup>2)</sup>Nanostructures Research Laboratory,  
Japan Fine Ceramics Center)

### 13:00-15:30 D4-P19-017

Ti-Nb-X形状記憶合金の格子変形ひずみと $\alpha'$ 、 $\beta$ 、 $\omega$ 相の  
安定性の第一原理計算 / First-principles calculations  
of lattice deformation strain and  $\alpha'$ ,  $\beta$  and  $\omega$   
phase stability in Ti-Nb-X 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 (Osaka  
Prefecture University)

### 13:00-15:30 D4-P19-018

Si粒界におけるナノ構造が熱伝導度に及ぼす影響 /  
Influences of Nanostructure on Thermal  
Conduction at Si Grain Boundaries

船井 浩平<sup>1)</sup>、藤井 進<sup>1)</sup>、横井 達矢<sup>1)</sup>、吉矢 真人<sup>1,2)</sup>  
(<sup>1)</sup>大阪大学大学院工学研究科知能・機能創成工学専攻、  
<sup>2)</sup>ファインセラミックスセンター・ナノ構造研究所)

Kohei FUNAI<sup>1)</sup>, Susumu FUJII<sup>1)</sup>, Tatsuya YOKOI<sup>1)</sup>,  
Masato YOSHIYA<sup>1,2)</sup> (<sup>1)</sup>Department of Adaptive  
Machine System, Osaka University, <sup>2)</sup>Nanostructures  
Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

### 13:00-15:30 D4-P19-019

Si系熱電材料の性能向上のための計算機実験 /  
Computer experiment for improving the  
performance of Si-based thermoelectric material  
江口 遼 (茨城大学大学院理工学研究科)

Ryo EGUCHI (Graduate School of Science and  
Engineering, Ibaraki University)