

Symposium L

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

大場 史康(東京工業大学)

田村 友幸(名古屋工業大学)

オーガナイザー

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)

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)

12月5日(火)
December 5 (Tue.)

横浜情報文化センター 大会議室

Yokohama Media & Communications Center, Meeting Room L

午前の部

Morning Oral Session

座長: 塚田 祐貴(名古屋大学)

Chair: Yuhki TSUKADA (Nagoya University)

10:00-10:40 Invited L-I5-001

先端的機能性材料の創成を目指した計算機シミュレーション技術、およびマテリアルズ・インフォマティクス技術への取り組みと期待 / Activities and Expectations on Computational Simulations and Materials Informatics Techniques for Creation of Advanced Functional Materials

檜貝 信一^{1,2,3,4} (1)株式会社村田製作所、(2)先端素材高速開発技術研究組合、(3)数理アドバンスティノベーションプラットフォーム、(4)CAMMフォーラム)

Shinichi HIGAI^{1,2,3,4} (1) Murata Manufacturing Co., Ltd., (2) Research Association of High-Throughput Design and Development for Advanced Functional Materials, (3) AIMaP, (4) CAMM Forum)

10:40-11:00 L-O5-002

Material informatics: the current state and the future vision from a software perspective

Abhijit CHATTERJEE (DASSAULT SYSTEMES BIOVIA)

午前の部

Morning Oral Session

座長: 檜貝 信一(村田製作所)

Chair: Shinichi HIGAI (Murata Manufacturing Co., Ltd.)

11:00-11:40 Invited L-I5-003

統計的機械学習に基づく粒界データ解析: データ駆動型材料探索に向けて / Statistical Machine Learning for Grain-boundary: Toward Data-driven Materials Discovery

島山 昌幸^{1,2,3} (1)名古屋工業大学情報工学科、(2)物質・材料研究機構、情報統合型物質・材料研究拠点、(3)JST さきがけ)

Masayuki KARASUYAMA^{1,2,3} (1) Department of Computer Science, Nagoya Institute of Technology, (2) Center for Materials Research by Information Integration, National Institute for Materials Science, (3) JST PRESTO)

11:40-12:00 L-O5-004

粒界近傍の局所エネルギーの高速かつスケーラブルな予測: 第一原理計算の機械学習モデリング / Fast and scalable prediction of local energy at grain boundaries: Machine-learning based modeling of first-principles calculations

田村 友幸^{1,2}、島山 昌幸^{1,2,3}、小林 亮^{1,2}、荒川 竜一¹、椎原 良典⁴、竹内 一郎^{1,2,5} (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)豊田工業大学、(5)理研)

Tomoyuki TAMURA^{1,2}, Masayuki KARASUYAMA^{1,2,3}, Ryo KOBAYASHI^{1,2}, Ryuichi ARAKAWA¹, Yoshinori SHIIHARA⁴, Ichiro TAKEUCHI^{1,2,5} (1) Nagoya Institute of Technology, (2) National Institute for Materials Science, (3) PRESTO, JST, (4) Toyota Technological Institute, (5) RIKEN)

午後の部

Afternoon Oral Session

座長: 弓削 是貴(京都大学)

Chair: Koretaka YUGE (Kyoto University)

15:40-16:00 L-O5-005

Al-Mg-Si三元系合金のニューラル・ネットワークカ場 / A neural-network potential for Al-Mg-Si ternary alloys

小林 亮^{1,2}、Daniele GIOFRE³、Till JUNGE³、Michele CEROTTI³、William a. CURTIN³ (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)EPFL)

Ryo KOBAYASHI^{1,2}, Daniele GIOFRE³, Till JUNGE³, Michele CEROTTI³, William a. CURTIN³ (1) Nagoya Institute of Technology, (2) National Institute for Materials Science, (3) Ecole Polytechnique Federale de Lausanne)

16:00-16:20 L-O5-006

深層ニューラルネットワークポテンシャルを用いたアルミ中転位構造の解析 / Investigation of compact dislocation core structure in Aluminum by deep neural network atomic potential.

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

16:20-17:00 Invited L-I5-007

フェーズフィールド法による鉄鋼材料のマルテンサイト変態シミュレーション / Simulation of martensitic transformation in steels by the phase-field method

塚田 祐貴^{1,2)}、小山 敏幸¹⁾、村田 純教¹⁾ (¹⁾名古屋大学大学院工学研究科、²⁾科学技術振興機構、さががけ)

Yuhki TSUKADA^{1,2)}, Toshiyuki KOYAMA¹⁾, Yoshinori MURATA¹⁾ (¹⁾ Graduate School of Engineering, Nagoya University, ²⁾ JST, PRESTO)

17:00-17:20 L-O5-008

Phase-Field法による炭素鋼の δ - γ マッシュブの変態における γ 相核生成に関する計算機実験：実験事実への説明 / Computational Experiments of δ - γ phase nucleation upon δ - γ Massive like Transformation in Carbon Steel by Phase Field Modeling: A Possible Explanation for Experimental Evidences

藤原 弘樹¹⁾、吉矢 真人^{1,2)}、安田 秀幸³⁾ (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 (JFCC) ナノ構造研究所、³⁾京都大学 大学院工学研究科 材料工学専攻)

Hiroki FUJIWARA¹⁾, Masato YOSHIYA^{1,2)}, Hideyuki YASUDA³⁾ (¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, ²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center (JFCC), ³⁾ Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

17:20 ~ 17:30 Break

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 FISHER (Japan Fine Ceramics Center)

17:30-17:50 L-O5-009

第一原理計算による耐環境コーティングシステム材料の物性評価及び熱サイクル下での熱応力への影響 / Evaluation of Thermal Materials Properties and Their Influences upon Thermal Cycle of Environmental Barrier Coatings by First-Principles Calculations

角 裕輔¹⁾、横井 達矢¹⁾、吉矢 真人^{1,2)} (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 (JFCC) ナノ構造研究所)

Yusuke SUMI¹⁾, Tatsuya YOKOI¹⁾, Masato YOSHIYA^{1,2)} (¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, ²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center (JFCC))

17:50-18:10 L-O5-010

新熱電反感材料としてFe₃Ga とGa₃Feの実験と第一原理計算 / New Thermoelectric Materials Fe₃Ga and Ga₃Fe: DFT Calculations and Experiments

坂東 克樹、ブンダリッヒ ビルフリド (東海大学 工学部 材料科学科)

Yoshiki BANDO, Wilfried WUNDERLICH (Tokai University, Faculty of Engineering, Material Science Department)

18:10-18:30 L-O5-011

第一原理計算による不純物添加TiS₂の熱力学的安定性及び熱電特性 / Thermodynamic Stability and Thermoelectric Properties of Impurities Doped TiS₂ by ab initio Calculations

藤本 知志¹⁾、藤井 進¹⁾、サハ アシム¹⁾、吉矢 真人^{1,2)} (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 (JFCC) ナノ構造研究所)

Kazushi FUJIMOTO¹⁾, Susumu FUJII¹⁾, Ashim Kumar SAHA¹⁾, Masato YOSHIYA^{1,2)} (¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, ²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center (JFCC), Nagoya, Aichi, Japan,)

12月6日(水)
December 6 (Wed.)

横浜情報文化センター 大会議室

Yokohama Media & Communications Center, Meeting Room L

午前の部 Morning Oral Session

座長：小林 亮(名古屋工業大学)
Chair：Ryo KOBAYASHI (Nagoya Institute of Technology)

9:30-10:10 Invited L-I6-001

分子シミュレーションのための位相的データ解析 / Topological Data Analysis for the Molecular Dynamics Simulation

中村 壮伸^{1,2)} (¹⁾産業技術総合研究所、²⁾JSTさががけ)

Takenobu NAKAMURA^{1,2)} (¹⁾ National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, ²⁾ PRESTO, JST)

10:10-10:30 L-O6-002

グラフ理論とMD法を用いたゼオライト中のカチオン分布の系統的解析 / Systematic analysis of cation distributions in aluminosilicate frameworks using graph theory and molecular dynamics

フィッシャー クレイグ、小川 貴史、佐々木 優吉 (一般財団法人ファインセラミックスセンターナノ構造研究所)

Craig A. J. FISHER, Takafumi OGAWA, Yukichi SASAKI (Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center)

10:30-10:50 L-O6-003

摂動分子動力学法を用いたSi対称傾角粒界における格子熱伝導率の低減機構の解明 / Suppression of Lattice Thermal Conductivity by Si Symmetric Tilt Grain Boundaries by Perturbed Molecular Dynamics

船井 浩平¹⁾、藤井 進¹⁾、横井 達矢¹⁾、吉矢 真人^{1,2)} (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 (JFCC) ナノ構造研究所)

Kohei FUNAI¹⁾, Susumu FUJII¹⁾, Tatsuya YOKOI¹⁾,
Masato YOSHIYA^{1,2)} (¹⁾ Department of Adaptive
 Machine Systems, Osaka University, (²⁾ Nanostructures
 Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center
 (JFCC))

午前の部 Morning Oral Session

座長：小谷 岳生(鳥取大学)

Chair：Takao KOTANI (Tottori University)

10:50-11:10 L-06-004

配位空間上の幾何学から考える平衡状態の構造と
 Potential Energyの対応 / Microscopic Geometry
 Rules Structure/Potential-Energy Correspondence
 in a Thermodynamic System

弓削 是貴 (京都大学 大学院工学研究科 材料工学専攻)

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

11:10-11:30 L-06-005

ハイスループット第一原理フォノン計算 / High-
 throughput first-principles phonon calculations

東後 篤史¹⁾、田中 功^{1,2)} (¹⁾ 京都大学ESISM、(²⁾ 京都大
 学大学院工学研究科材料工学専攻)

Atsushi TOGO¹⁾, Isao TANAKA^{1,2)} (¹⁾ Elements
 Strategy Initiative for Structural Materials, Kyoto
 University, (²⁾ Department of Materials Science and
 Engineering, Kyoto University)

11:30-11:50 L-06-006

二元系酸化物のエネルギーと構造の交換相関汎関数依
 存性 / Energetics and structure of binary oxides
 with various exchange-correlation functionals

日沼 洋陽^{1,2,3)}、林 博之³⁾、熊谷 悠^{4,5)}、田中 功^{2,3,6)}、
大場 史康^{2,4)} (¹⁾ 千葉大学先進科学センター、(²⁾ 物質・
 材料研究機構、(³⁾ 京都大学、(⁴⁾ 東京工業大学、(⁵⁾ 科学技術
 振興機構、(⁶⁾ ファインセラミックスセンター)

Yoyo HINUMA^{1,2,3)}, Hiroyuki HAYASHI³⁾,
Yu KUMAGAI^{4,5)}, Isao TANAKA^{2,3,6)},
Fumiyasu OBA^{2,4)} (¹⁾ Center for Frontier Science,
 Chiba University, (²⁾ National Institute for Materials
 Science, (³⁾ Kyoto University, (⁴⁾ Tokyo Institute of
 Technology, (⁵⁾ Japan Science and Technology Agency,
 (⁶⁾ Japan Fine Ceramics Center)

午後の部 Afternoon Oral Session

座長：森 英喜(産業技術短期大学)

Chair：Hideki MORI (College of Industrial Technology)

13:00-13:40 Invited L-I6-007

格子欠陥の第一原理計算に基づく構造材料の力学特性
 予測 / Prediction of mechanical properties of
 structural materials based on the first principles
 calculation of lattice defects

譯田 真人¹⁾、尾方 成信^{2,3)} (¹⁾ 物質・材料研究機構、(²⁾ 大
 阪大学、(³⁾ 京都大学構造材料元素戦略研究拠点)

Masato WAKEDA¹⁾, Shigenobu OGATA^{2,3)} (¹⁾ National
 Institute for Materials Science, (²⁾ Osaka University,
 (³⁾ Elements Strategy Initiative for Structural Materials
 (ESISM), Kyoto University)

13:40-14:00 L-06-008

第一原理計算と実験によるMg合金の界面破壊に関する
 研究 / First-principles and experimental study on
 interfacial fracture in Mg alloys

都留 智仁¹⁾、染川 英俊²⁾ (¹⁾ (国) 日本原子力研究開発
 機構、(²⁾ (国) 物質・材料研究機構)

Tomohito TSURU¹⁾, Hidetoshi SOMEKAWA²⁾ (¹⁾ Japan
 Atomic Energy Agency, (²⁾ National Institute for
 Materials Science)

14:00-14:20 L-06-009

Ni₃AlおよびNi₃Vの添加元素置換挙動の第一原理計算 /
 Substitutional Behavior of Ternary Elements in
 Ni₃Al and Ni₃V from First-Principles Calculations

上杉 徳照、稲垣 勝、瀧川 順庸、東 健司 (大阪府
 立大学大学院工学研究科)

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

14:20 ~ 14:40 Break

午後の部 Afternoon Oral Session

座長：東後 篤史(京都大学)

Chair：Atsushi TOGO (Kyoto University)

14:40-15:20 Invited L-I6-010

層状ペロブスカイトにおける酸素配位八面体回転によ
 る中心対称性の破れ / Theoretical and Experimental
 Study of Inversion Symmetry Breaking by Oxygen
 Octahedral Rotations in Layered Perovskites

赤松 寛文 (九州大学大学院工学研究院)

Hirofumi AKAMATSU (Graduate School of
 Engineering, Kyushu University)

15:20-15:40 L-06-011

第一原理計算によるMoS₂-MoSe₂ヘテロ積層構造にお
 ける電子・工学特性の積層依存性 / First Principles
 Calculations of Rotation Dependent Modifications
 of the Electronic and Optical Properties of MoS₂-
 MoSe₂ Layered Heterostructure

サハ アシム¹⁾、吉矢 真人^{1,2)} (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 (JFCC) ナノ構造研究所)

Ashim Kumar SAHA¹⁾, Masato YOSHIYA^{1,2)}
 (¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka
 University, (²⁾ Nanostructures Research Laboratory,
 Japan Fine Ceramics Center (JFCC))

15:40-16:00 L-06-012

第一原理計算によるLa₃Ni₂O₇の圧縮面内歪誘起金属絶
 縁体転移 / Metal-Insulator Transition Induced by
 Biaxial Compressive Strain in La₃Ni₂O₇: A First-
 Principles Study

望月 泰英¹⁾、赤松 寛文^{1,2)}、熊谷 悠³⁾、大場 史康^{1,3)}
 (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⁾ 九州大学大学院 工学研究院 応用化学部門、
 (³⁾ 東京工業大学元素戦略研究センター)

Yasuhide MOCHIZUKI¹⁾, Hirofumi AKAMATSU^{1,2)},
Yu KUMAGAI³⁾, Fumiyasu OBA^{1,3)} ⁽¹⁾ Laboratory for
Materials and Structures, Institute of Innovative
Research, Tokyo Institute of Technology,
²⁾ Department of Applied Chemistry, Graduate School
of Engineering, Kyushu University, ³⁾ Materials
Research Center for Element Strategy, Tokyo
Institute of Technology)

16:00 ~ 16:10 Break

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)

16:10-16:30 L-O6-013

窒化亜鉛におけるキャリア由来のバンドギャップ変化
と点欠陥の第一原理計算 / First-Principles Study of
Carrier-Induced Band-Gap Variation and Point
Defects in Zn₃N₂

原田 航¹⁾、熊谷 悠²⁾、赤松 寛文¹⁾、松崎 功佑²⁾、
大場 史康^{1,2)} ⁽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 HARADA¹⁾, Yu KUMAGAI²⁾,
Hirofumi AKAMATSU¹⁾, Kosuke MATSUZAKI²⁾,
Fumiyasu OBA^{1,2)} ⁽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)

16:30-16:50 L-O6-014

固体電解質材料LLTOの粒界近傍におけるLi拡散挙動 /
Li migration near solid-electrolyte LLTO grain
boundaries

本山 雄基¹⁾、田村 友幸^{1,2)}、小林 亮^{1,2)}、尾形 修司¹⁾
⁽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)

Yuuki MOTOYAMA¹⁾, Tomoyuki TAMURA^{1,2)},
Ryo KOBAYASHI^{1,2)}, Shuji OGATA¹⁾ ⁽¹⁾ Nagoya
Institute of Technology, ²⁾ National Institute for
Materials Science)

16:50-17:10 L-O6-015

第一原理計算による半導体の欠陥形成とドーピング限
界 / Defect Formation and Doping Limits in
Semiconductors: A First-Principles Study

西谷 宣彦¹⁾、原田 航¹⁾、熊谷 悠²⁾、赤松 寛文^{1,3)}、
大場 史康^{1,2)} ⁽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、³⁾九州大学大学院工学研究院応用化学部門)

Nobuhiko NISHIYA¹⁾, Kou HARADA¹⁾,
Yu KUMAGAI²⁾, Hirofumi AKAMATSU^{1,3)},
Fumiyasu OBA^{1,2)} ⁽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,
³⁾ Department of Applied Chemistry, Kyushu
University)

17:10-17:30 L-O6-016

第一原理計算による高酸素イオン伝導Bi₂O₃を安定化さ
せる固溶元素探索と実証実験 / Material Design of
Oxide-Ion Conductor Er-Stabilized Bi₂O₃ by
Selective Doping for Improved Long-Term
Stability at Moderate Temperatures

設楽 一希^{1,2,3)}、森朝 崇文³⁾、炭谷 晃史³⁾、
世古 敦人^{1,3,4)}、林 博之^{2,3)}、小山 幸典^{1,3)}、
Rong HUANG⁵⁾、Donglin HAN³⁾、森分 博紀^{1,2)}、
田中 功^{1,2,3)} ⁽¹⁾物質・材料研究機構 統合型材料開発・
情報基盤部門、²⁾ファインセラミックスセンター、³⁾京
都大学大学院工学研究科、⁴⁾JSTさきがけ、⁵⁾School of
Information Science & Technology, East China Normal
University)

Kazuki SHITARA^{1,2,3)}, Takafumi MORIASA³⁾,
Akifumi SUMITANI³⁾, Atsuto SEKO^{1,3,4)},
Hiroyuki HAYASHI^{2,3)}, Yukinori KOYAMA^{1,3)},
Rong HUANG⁵⁾, Donglin HAN³⁾,
Hiroki MORIWAKE^{1,2)}, Isao TANAKA^{1,2,3)} ⁽¹⁾ Research
and Services Division of Materials Data and Integrated
System, National Institute for Materials Science,
²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine
Ceramics Center, ³⁾ Department of Materials Science
and Engineering, Kyoto University, ⁴⁾ JST PRESTO,
⁵⁾ School of Information Science & Technology, East
China Normal University)

12月5日(火)
December 5 (Tue.)

横浜情報文化センター 情文ホール
Yokohama Media & Communications Center, Hall

ポスターセッション Poster Session

13:20-15:20 L-P5-001

ニューラルネットワーク力場作成における応力項の効
果 / Effects of stress-matching on the quality of
neural-network potentials

中島 弘貴¹⁾、小林 亮^{1,2)}、田村 友幸^{1,2)}、尾形 修司¹⁾
⁽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)

Hiroki NAKASHIMA¹⁾, Ryo KOBAYASHI^{1,2)},
Tomoyuki TAMURA^{1,2)}, Shuji OGATA¹⁾ ⁽¹⁾ Nagoya
Institute of Technology, ²⁾ National Institute for
Materials Science)

13:20-15:20 L-P5-002

衝突電離の閾値エネルギーと回復率の関係 /
Relationship between Threshold Energies of
Impact Ionization and Recovery Rate

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

Kikou YAMAGUCHI^{1,2)}, Daisuke KOBAYASHI²⁾,
Tomoyuki YAMAMOTO¹⁾, Kazuyuki HIROSE^{1,2)}
⁽¹⁾ Faculty of Science and Engineering, Waseda
University, ²⁾ ISAS/JAXA)

13:20-15:20 L-P5-003

照射されたNi₃Alの結晶構造解析の計算機実験 / Crystal
Structure Analysis of Irradiated Ni₃Al using
Molecular Dynamic Simulation

モハマド タミディ アハマド エサン¹⁾、篠嶋 妥^{1,2)}
(¹⁾茨城大学大学院理工学研究科、²⁾茨城大学フロンティア応用原子科学研究センター)

Ahmad ehsan MOHD TAMIDI¹⁾,
Yasushi SASAJIMA^{1,2)} (¹ Graduate School of Science and Engineering, University of Ibaraki, ²⁾ Frontier Research Center for Applied Atomic Sciences, Ibaraki University)

13:20-15:20 L-P5-004

炭素鋼のマツシブの変態における δ 母相からの γ 相核生成時の応力緩和の定量解析 / Quantitative Analysis of Stress Relaxation during γ -nucleation in δ -matrix Phase upon Massive-like Transformation Carbon Steel

米田 将馬¹⁾、藤原 弘樹¹⁾、吉矢 真人^{1,2)}、安田 秀幸³⁾
(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 (JFCC) ナノ構造研究所、³⁾京都大学 大学院工学研究科 材料工学専攻)

Shoma YONEDA¹⁾, Hiroki FUJIWARA¹⁾,
Masato YOSHIYA^{1,2)}, Hideyuki YASUDA³⁾
(¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, ²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center (JFCC), ³⁾ Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University)

13:20-15:20 L-P5-005

ニューラル・ネットワークによる補正を加えた電池材料の原子間力場 / Neural-network as a correction to classical interatomic potential for Li-ion battery materials

ウーラ タスビル¹⁾、小林 亮^{1,2)}、田村 友幸^{1,2)}、尾形 修司¹⁾ (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)

Tasbir ULLAH¹⁾, Ryo KOBAYASHI^{1,2)},
Tomoyuki TAMURA^{1,2)}, Shuji OGATA¹⁾ (¹⁾ Nagoya Institute of Technology, ²⁾ National Institute for Materials Science)

13:20-15:20 L-P5-006

擬3元系硫化物の階層的構造の起源 / Origins of Hierarchical Structures of Quasi-Ternary Sulfide

中野 峰士¹⁾、船井 浩平¹⁾、藤井 進¹⁾、吉矢 真人^{1,2)}
(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 (JFCC) ナノ構造研究所)

Takahito NAKANO¹⁾, Kohei FUNAI¹⁾,
Susumu FUJII¹⁾, Masato YOSHIYA^{1,2)} (¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, ²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center (JFCC))

13:20-15:20 L-P5-007

$\text{Re}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ の電子状態解析 / Electronic structure analysis of $\text{Re}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$

畠津 航太朗、山本 知之 (早稲田大学理工学術院)

Kotaro SHIMAZU, Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty of Science and Engineering Waseda University)

13:20-15:20 L-P5-008

2元系酸化物中の酸素空孔の第一原理計算 / First-Principles Calculations of Oxygen Vacancies in Binary Oxides

荒木 真彦¹⁾、熊谷 悠²⁾、原田 航¹⁾、日沼 洋陽³⁾、大場 史康^{1,2)} (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、³⁾千葉大学)

Masahiko ARAKI¹⁾, Yu KUMAGAI²⁾, Kou HARADA¹⁾,
Yoyo HINUMA³⁾, Fumiyasu OBA^{1,2)} (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, ³⁾ Chiba University)

13:20-15:20 L-P5-009

$\text{La}_{2/3-x}\text{Li}_{3x}\text{TiO}_3$ における局所構造とLi伝導度の相関 / Correlation between local structure and Li diffusion in $\text{La}_{2/3-x}\text{Li}_{3x}\text{TiO}_3$

春日井 広輝¹⁾、田村 友幸^{1,2)}、小林 亮^{1,2)}、尾形 修司¹⁾ (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)

Hiroki KASUGAI¹⁾, Tomoyuki TAMURA^{1,2)},
Ryo KOBAYASHI^{1,2)}, Shuji OGATA¹⁾ (¹⁾ Nagoya Institute of Technology, ²⁾ National Institute for Materials Science)

13:20-15:20 L-P5-010

蛍石類似構造を有する高温酸化物の粒界・内在欠陥・添加物偏析現象が熱伝導に及ぼす影響 / Influence of Grain Boundary, Intrinsic and Extrinsic Point Defects and Their Boundary Segregations on Thermal Conductivity of High Temperature Oxides with Fluorite-related Structures

種村 征俊¹⁾、藤井 進¹⁾、横井 達矢¹⁾、吉矢 真人^{1,2)} (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 (JFCC) ナノ構造研究所)

Masatoshi TANEMURA¹⁾, Susumu FUJII¹⁾,
Tatsuya YOKOI¹⁾, Masato YOSHIYA^{1,2)} (¹⁾ Department of Adaptive Machine Systems, Osaka University, ²⁾ Nanostructures Research Laboratory, Japan Fine Ceramics Center (JFCC))

13:20-15:20 L-P5-011

Er, Yb共添加 CaMO_3 ($M=\text{Zr}, \text{Hf}, \text{Sn}$)の電子状態 / Electronic structure of Er and Yb co-doped CaMO_3 ($M = \text{Zr}, \text{Hf}$ and Sn)

相田 浩嗣、山本 知之 (早稲田大学 理工学術院)

Hirotsugu AIDA, Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty of Science and Engineering, Waseda University)

13:20-15:20 L-P5-012

窒化スカンジウム中の点欠陥に関する第一原理計算 / Defect Energetics in Scandium Nitride: A First-Principles Study

角田 直樹¹⁾、熊谷 悠²⁾、大場 史康^{1,2)} (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)

Naoki TSUNODA¹⁾, Yu KUMAGAI²⁾,
Fumiyasu OBA^{1,2)} (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)

13:20-15:20 L-P5-013

W結晶中の複数希ガス原子の拡散の第一原理計算 / First-principles investigation of migration of clustering noble gas atoms in bcc W

林 拓実¹⁾、田村 友幸^{1,2)}、小林 亮^{1,2)}、尾形 修司¹⁾
 (¹⁾名古屋工業大学大学院工学研究科、²⁾物質・研究材料機構)

Takumi HAYASHI¹⁾, Tomoyuki TAMURA^{1,2)},
 Ryo KOBAYASHI^{1,2)}, Shuji OGATA¹⁾ (¹⁾Nagoya
 Institute of Technology, ²⁾National Institute for
 Materials Science)

13:20-15:20 L-P5-014

$\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ の磁性及び構造とFe,Moの電子状態との関係 / Relationship between magnetic and structural properties and valence state of Fe and Mo ions in $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$

小船井 真悟、山本 知之 (早稲田大学 理工学術院)

Shingo OBUNAI, Tomoyuki YAMAMOTO (Faculty
 of Fundamental Science and Engineering, Waseda
 University)