

基本情報

学科名 講座名 (研究室名)

理工工学専攻 ナノ工学 ナノデザイン研究室中村グループ

教員構成 職名・氏名 (中村 浩次)

1. 現在の研究テーマ、研究内容

1. キーワード

表面・界面, 第一原理計算

2. 研究テーマ

表面・界面及びナノ構造体の電子構造と磁性, 電子デバイス・センサー等薄膜材料の理論的設計, 第一原理計算手法の開発, マテリアルズインフォマティクスによる材料設計手法の開発

研究内容

1. 口頭発表

●国際会議

- (1) APS March Meeting 2021 (202103) オンライン “First-Principle Studies on Magneto Optical Anisotropy of $L1_0$ Ordered FeCu Superlattice” M. Arifina, K. Nakamura
- (2) The 1st International Symposium on Physics and Application 2020 (202012) オンライン “Optical and magneto-optical properties of Fe_xAg_x superlattice: first-principles study” M. Arifina, K. Nakamura

●国内学会

- (1) 第81回応用物理学会秋季学術講演会 (202009) オンライン “Transverse Magneto-Optical Kerr Effect of Fe_xCu_x Superlattices for Surface Plasmon Resonance Application: First Principle Study” M. Arifin, K. Nakamura
- (2) 第81回応用物理学会秋季学術講演会 (202009) オンライン “First-principles

- study of angular dependent magnetoresistance in Co/5d metallic bilayers” Y. Nagato, A.M. Pradipto, K. Nakamura
- (3) 第81回応用物理学会秋季学術講演会 (202009) オンライン “Role of dopants to exchange interaction and magnetocrystalline anisotropy in antiferromagnet NiO” K. Miyamae, A.M. Pradipto, T. Moriyama, K. Nakamura
 - (4) 第68回応用物理学会春季学術講演会 (202103) オンライン “Electronic Structure and Magneto-Optical Anisotropy of FeCu Superlattice: First-Principles Study” M. Arifin1, K. Nakamura
 - (5) 第68回応用物理学会春季学術講演会 (202103) オンライン “Electronic structure of MgO thin films in external electric field” T. Sakatani, K. Nakamura
 - (6) 第68回応用物理学会春季学術講演会 (202103) オンライン “イットリウム鉄ガーネットにおけるオンサイトクーロン相互作用の機械学習解析” 松本崇宏, 中村浩次

●その他

- (1) 日本化学会東海支部先端科学セミナー (202102) オンライン “第一原理電子状態計算から見た光・磁気光学物性” 中村浩次
- (2) 第37回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン ワークショップ スピントロニクスデザインコース (202009) “スピントロニクス・デザイン・磁気制御II” 中村浩次
- (3) 第38回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン ワークショップ スピントロニクスデザインコース (202102) “スピントロニクス・デザイン・磁気制御II” 中村浩次

2. 著書

3. 学術論文

●原著論文 (査読のあるもの。)

- (1) “First Principles Calculation of Optical Properties of Transition Metals for Surface Plasmon Resonance Application” M. Arifin, T. Matsumoto, A.-M. Pradipto, T. Akiyama, T. Ito, K. Nakamura e-Journal of Surface Science and Nanotechnology [18,

- pp.133~138 (202004)]
- (2) “Electron correlation effects and magneto-optical properties of yttrium iron garnet” H. Nakashima, A.-M. Pradipto, T. Akiyama, T. Ito, K. Nakamura AIP advances [10, pp.0450291~0450296 (202004)]
 - (3) “Maximum Separated Distribution with High Interpretability Found Using an Exhaustive Search Method - Application to Magnetocrystalline Anisotropy of Fe/Co Film -” H. Kino¹, K. Nakamura, K. Hukushima, T. Miyake, and D. H. Ch Journal of the Physical Society of Japan [89, pp.06480201~06480214 (202004)]
 - (4) “Engineering anisotropic magnetoresistance of Hall bars with interfacial organic layers” J. H. Park, M. Ribeiro, T. K. H. Pham, N. J. Lee, T. -w. Eom, J. Jo, S. -Y. Park, S. H. Rhim, K. Nakamura, J. -W. Yoo, T. H. Kim Journal of Vacuum Science and Technology B [38, pp.0406021~0406027 (202006)]
 - (5) “Benchmarking Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave (FLAPW) Method for Determination of Muon Stopping Sites in LiF” F.H. Murdaka, A. M. Pradipto, K. Nakamura, A. A. Nugroho Key Engineering Materials [855, pp.248~252(202007)]
 - (6) “Orbital-Dependent Electric Field Effect on Magnetism in Ultra-Thin Cobalt” K. T. Yamada, Yoichi Shiota, T. Koyama, Y. Kotani, K. Toyoki, H. Mizuno, F. Ando, K. Nakamura, T. Nakamura, D. Chiba, T. Ono Physical Review B [102, pp.1004071~1004075 (202009)]
 - (7) “Impact of Inter-site Spin-Orbit Coupling on Perpendicular Magnetocrystalline Anisotropy in Cobalt-Based Thin Films” T. P. T. Nguyen, K. Yamauchi, K. Nakamura, T. Oguchi Journal of Physical Society of Japan [89, pp.1147101~1147105 (202010)]
 - (8) “Estimation of Muon Stopping Site in CoCr₂O₄ Using Density Functional Theory” F. H. Murdaka, K. Nakamura, A. A. Nugroho IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering [924, pp.0120271~0120275 (202010)]
 - (9) “Magnetization direction dependent spin Hall effect in 3d ferromagnets” G. Qu, K. Nakamura, M. Hayashi Physical Review B [102, pp.1444401~1444406 (202010)]
 - (10) “First Principles Investigation of Anomalous Hall and Spin Hall Effects in Ferromagnetic CoPt” G. Qu, K. Nakamura, and M. Hayashi Journal of the Physical Society of Japan [90, pp.0247071~0247078 (202101)]

- (11) “Modification of the van der Waals interaction at the Bi₂Te₃ and Ge(111) interface” K. Nawa, D. Kepaptsoglou, A. Ghasemi, P. Hasnip, G. Barcena-Gonzalez, G. Nicotra, P. L. Galindo, Q. M. Ramasse, K. Nakamura, S. C. Speller, B. Kuerbanjiang, T. Hesjedal, V. K. Lazarov Physical Review Materials [5, pp.0242031~0242038 (202102)]

●国際会議のProceedings

●総説，解説等

- (1) “データ科学的手法による多層薄膜磁性の解析と予測” 中村浩次，加藤夕奈 まぐね [15, pp.217~222 (202008)]

●その他

4. その他の研究成果（作品，設計，発明・特許）

5. 学会賞等

6. 新聞記事等

III. 研究費関係

1. 文部科学省科学研究費

科学研究費（基盤研究（C）） 「第一原理計算による表面・界面系での高温超伝導」（分担，佐野和博・継続） 200（千円）

2. 省庁・財団からの基金

「日本・アジア青少年サイエンス交流事業さくらサイエンスプランA科学技術体験コース開催 オンライン「次世代情報通信・エネルギーを支えるアジアン・マテリアルズ・ネットワークの構築」科学技術振興機構（代表・新規）23（千円）

展開共同研究B「次世代スピントロニクスに向けた磁性体薄膜の材料設計」物質・デバイス領域共同研究拠点（代表・継続）300（千円）

3. 民間等の共同研究・受託研究

受託研究 「大容量STT-MRAM用磁気トンネル接合素子開発に向けた垂直磁化薄膜

の材料設計」 キオクシア株式会社 1,430 (千円)

4. 奨学寄附金

IV. 国際交流

- 海外出張・研修
- 海外大学等での講演など
- 外国人研究者の受入れ
- 外国人研究者の訪問
- 外国人留学生の受入れ
- 外国人との共同研究

V. その他

- 他大学等公的機関との共同研究
- 大学内での共同研究

個人資料

中村 浩次

- 所属学協会及び役員・委員等
- 日本物理学会 (1995～)
- 日本磁気学会 (2002～)
- 米国物理学会フェロー会員 (1999～)
- 応用物理学会 (2015～)
- 日本物理学会名古屋支部委員 (2002年10月～現在)

応用物理学会・スピントロニクス研究会幹事 (2020～)

- 国内・国際会議等の役員・委員等
- 官公庁・民間団体等の委員等
- その他

物理工学専攻	ナノ工学講座	(ナノデザイン研究室秋山グループ)
教員構成 准教授・秋山 亨 招聘教授・伊藤 智徳		

I. 現在の研究テーマ及び研究内容

1. 表面でのナノ構造形成ダイナミクスに関する研究
 - (1) エピタキシャル成長過程の量子論的シミュレーション
 - (2) シリコン酸化膜形成過程に関する量子論的シミュレーション
2. 界面でのナノ構造形成に関する研究
 - (1) 非混和性と構造多形に関する計算機シミュレーション
 - (2) ナノワイヤ形成過程に関する計算機シミュレーション
 - (3) 転位芯構造に関する計算機シミュレーション

II. 研究活動

1. 口頭発表

●国際会議

- (1) 2020 International Conference on Solid Devices and Materials (2020年9月27日-9月30日) オンライン
 “Reaction of NO molecule at 4H-SiC/SiO₂ interface: an *ab initio* study for the effect of NO annealing after dry oxidation”
 ○T. Shimizu, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, *H. Kageshima, *M. Uematsu, and *K. Shiraishi
- (2) Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science (2020年10月4日-10月9日) オンライン
 “Effects of wet ambient on dry oxidation processes at 4H-SiC/SiO₂ interface: an *ab initio* study”
 ○T. Shimizu, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito, *H. Kageshima, *M. Uematsu, and *K. Shiraishi
- (3) Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science (2020年10月4日-10月9日) オンライン
 “A simple approach to growth mode of InN and InGaN thin films on GaN(0001) substrate”
 ○K. Nagai, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito
- (4) Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid State Science (2020年10月4日-10月9日) オンライン
 “Computational prediction for stable structures of graphene van der Waals heterostructures composed of group-III-V compounds”
 ○T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito
- (5) International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (2021年1月19日-1月12日) オンライン
 “Recent progress in computational materials science for III-nitride epitaxial growth: effects of growth kinetics on surface morphologies and nanostructures” (Invited lecture)
 ○Toru Akiyama, Yuki Seta, Takumi Ohka, Tomonori Ito
- (6) International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (2021年1月19日-1月12日) オンライン
 “Change of the effective bandgaps of InN/AlN superlattices due to lattice distortion” (Invited lecture)
 ○Takahiro Kawamura, Akito Korei, Kouhei Basaki, Toru Akiyama, *Yoshihiro Kangawa, *Izabela Gorczyca, *Tadeusz Suski, *Magorzata Wierzbowska, and *Stanislaw Krukowski
- (7) International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (202101) オンライン
 “A systematic approach for the interfacial reaction of O₂ molecule under wet oxidation condition at 4H-SiC/SiO₂ interface”
 ○Tsunashi Shimizu, Toru Akiyama, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, *Masashi Uematsu, *Kenji Shiraishi

- (8) The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (2021 年 3 月 1 日-3 月 4 日) オンライン
 “Orientation dependence of growth mode for InN and InGaN on GaN substrate from nano- and macro-theoretical viewpoints”
 ○Katsuya Nagai, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
- (9) The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (2021 年 3 月 1 日-3 月 4 日) オンライン
 “Effect of step edges on the adsorption behavior on vicinal AlN(0001) surface during metal-organic vapor phase epitaxy: an ab initio study”
 ○Toru Akiyama, Takumi Ohka, Katsuya Nagai, Tomonori Ito
- (10) The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (2021 年 3 月 1 日-3 月 4 日)オンライン
 “Computational materials science for growth mode of semiconductor heteroepitaxial systems”
 ○Tomonori Ito and Toru Akiyama
- (11) The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (2021 年 3 月 1 日-3 月 4 日)オンライン
 “Influence of Lattice Distortion on the Effective Bandgaps of Polar InN/AlN Superlattices”
 ○Kouhei Basaki, Akito Korei, Takahiro Kawamura, Toru Akiyama, *Yoshihiro Kangawa
- (12) Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity (2021 年 2 月 1 日-2 月 3 日) オンライン
 “Computational materials science for growth mode in nitride semiconductors” (Invited lecture)
 ○Tomonori Ito and Toru Akiyama
- (13) Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity (2021 年 2 月 1 日-2 月 3 日) オンライン
 “Bandgaps of InN/AlN superlattices and AlInN alloys: Influence of composition and strain”
 ○Takahiro Kawamura, Akito Korei, Kouhei Basaki, Toru Akiyama, *Yoshihiro Kangawa, *Izabela Gorczyca, *Tadeusz Suski, *Magorzata Wierzbowska, and *Stanisaw Krukowski

●国内学会

- (1) 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 (2020 年 9 月 8 日-9 月 11 日) オンライン
 “モンテカルロ計算による GaAs(001)基板上 InAs むれ層の表面構造変化の理論検討”
 ○秋山亨, 米本和弘, 日紫喜文昭, A. -M. Pradipto, 中村浩次, 伊藤智徳
- (2) 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 (2020 年 9 月 8 日-9 月 11 日) オンライン
 “第一原理計算を用いた 4H-SiC/SiO₂界面での酸化過程の検討: ウェット酸化の影響”
 ○清水紀志, 秋山亨, A. -M. Pradipto, 中村浩次, 伊藤智徳, *影島博之, *植松真司, *白石賢二
- (3) 第 48 結晶成長国際会議 (2020 年 11 月 9 日-11 月 11 日) オンライン
 “GaN(0001)基板上における InN および InGaN 薄膜の成長様式に関する理論的検討”
 ○永井勝也, 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳
- (4) 第 68 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) オンライン
 “ドライおよびウェット酸化種が共存する 4H-SiC/SiO₂界面での反応機構の理論的検討”
 ○清水紀志, 秋山亨, 伊藤智徳, *影島博之, *植松真司, *白石賢二
- (5) 第 68 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) オンライン
 “第一原理計算による III-V 族化合物-グラフェン超格子の構造および電子状態解析”
 ○秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (6) 第 68 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) オンライン
 “表面・界面制御による特異構造創成” (Invited lecture)
 ○伊藤智徳
- (7) 第 26 回界面電子デバイス界面テクノロジー研究会 (2021 年 1 月 22 日-1 月 23 日) オンライン
 “4H-SiC/SiO₂界面構造に対する窒素アニーリングの影響に関する理論的検討”

○清水 紀志, 秋山 亨, 中村 浩次, 伊藤 智徳, *影島 博之, *植松 真司, *白石 賢二

●その他

2. 著書

3. 学術論文

●原著論文

- (1) “Effects of wet ambient on dry oxidation processes at 4H-SiC/SiO₂ interface: An ab initio study”

○Tsunashi Shimizu, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, *Masashi Uematsu, and *Kenji Shiraishi

ECS Transactions, **98**, pp.37-46 (2020).

- (2) “A simple theoretical approach to growth mode of InN and InGaN thin films on GaN(0001) substrate”

○Katsuya Nagai, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, and Tomonori Ito

ECS Transactions, **98**, pp.155-164 (2020)

- (3) “Effect of Step Edges on Adsorption Behavior for GaN(0001) Surfaces during Metalorganic Vapor Phase Epitaxy: An Ab Initio Study”

○Takumi Ohka, A. -M. Pradipto, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, and Tomonori Ito

Crystal Growth & Design, **20** (10), pp.4358-4365 (2020).

- (4) “Equilibrium Morphologies of Faceted GaN under the Metalorganic Vapor-Phase Epitaxy Condition: Wulff Construction Using Absolute Surface Energies”

○Y. Seta, Toru Akiyama, A. -M. Pradipto, Kohji Nakamura, and Tomonori Ito

Physica Status Solidi B, **257**, pp.1900523-1-1900523-5 (2020).

- (5) “First-Principles Calculation of Bandgaps of Al_{1-x}In_xN Alloys and Short-Period Al_{1-x}In_xN/Al_{1-y}In_yN Superlattices”

○Takahiro Kawamura, Yuma Fujita, Yuya Hamaji, Toru Akiyama, *Yoshihiro Kangawa, *Izabela Gorczyca, *Tadeusz Suski, *Magorzata Wierzbowska, and *Stanisaw Krukowski

Physica Status Solidi B, **257**, pp.1900530-1-1900530-5-5 (2020).

- (6) “Ab initio calculations for the effect of wet oxidation condition on the reaction mechanism at 4H-SiC/SiO₂ interface”

○Y. Shimizu, T. Akiyama, A.-M. Pradipto, K. Nakamura, T. Ito, *H. Kageshima, *M. Uematsu, *K. Shiraishi

Japanese Journal of Applied Physics, **59** (SM), pp. SMMD01-1-SMMD01-5 (2020).

- (7) “Roles of growth kinetics on GaN non-planar facets under metalorganic vapor phase epitaxy condition”

○Y. Seta, T. Akiyama, K. Nakamura, T. Ito

Applied Physics Express, **13** (6), pp.065505-1-065505-4 (2020).

- (8) “Effect of Film Thickness on Structural Stability for BAlN and B GaN Alloys: Bond-Order Interatomic Potential Calculations”

○Y. Hasegawa, Toru Akiyama, A. -M. Pradipto, Kohji Nakamura, and Tomonori Ito

Physica Status Solidi B, **257**, pp.2000205-2000205 (2020).

- (9) “Absolute surface energies of oxygen-adsorbed GaN surfaces”

○Takahiro Kawamura, Toru Akiyama, Akira Kitamoto, *Masayuki Imanishi, Masashi *Yoshimura, *Yusuke Mori, *Yoshitada Morikawa, *Yoshihiro Kangawa, *Koichi Kakimoto

Journal of Crystal Growth, **549**, pp.125868-1-125868-7 (2020).

- (10) “Computational discovery of stable phases of graphene and h-BN van der Waals heterostructures composed of group III-V binary compounds”

○Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, and Tomonori Ito

Applied Physics Letters, **118** (2), pp.023101-1-023101-6 (2021).

- (11) “Reaction of NO molecule at 4H-SiC/SiO₂ interface: an ab initio study for the effect of NO annealing after dry oxidation”

○Tsunashi Shimizu, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, *Masashi Uematsu, and *Kenji Shiraishi

Japanese Journal of Applied Physics, **60** (SB), pp.SBBD10-SBBD10-10 (2021).

●総説, 解説等

4. その他の研究成果 なし
5. 科学研究費関係の成果報告 なし
6. 学会賞等 なし
7. 新聞記事等 なし

III. 研究費関係

1. 文部科学省科学研究費

- (1) 伊藤智徳 新学術領域研究 (研究領域提案型) 「計算科学によるヘテロボンドの理論的材料設計」 (代表・継続・16H06418) 13,520 (千円)
- (2) 伊藤智徳 基盤研究 (C) 「ボンドエンジニアリングによる量子ドット形成機構解明」 (代表・新規・19K05268) 900 (千円)
- (3) 秋山亨 基盤研究 (C) 「ボンドエンジニアリングによるオクテット AB 型二元系原子層物質のマテリアルデザイン」 (代表・新規・20K05324) 1950 (千円)

2. 他省庁・財団からの基金

3. 民間等との共同研究・受託研究

4. 奨学寄附

IV. 国際交流

●海外出張・研修

●外国人研究者の受け入れ

●外国人との共同研究

V. その他

●民間等との共同研究

●他大学等公的機関との共同研究

- (1) 寒川義裕・九州大学応用力学研究所・教授・工学博士

”半導体薄膜成長に関する理論研究” (2002 年 4 月～)

口頭発表 3 件 学術論文 1 件

- (2) 植松真司・慶応大学理工学部・教授・工学博士

”ゲート酸化膜形成過程に関する研究” (2003 年 4 月～)

口頭発表 36 件 学術論文 2 件

- (3) 白石賢二・名古屋大学未来材料・システム研究所・教授・理学博士

”ゲート酸化膜形成過程に関する研究” (2003 年 4 月～)

口頭発表 6 件 学術論文 2 件

(4) 影島博之・島根大学大学院自然科学研究科・教授・理学博士
”ゲート酸化膜形成過程に関する研究” (2003 年 4 月～)

口頭発表 6 件 学術論文 2 件

個人資料

准教授・秋山亨

●所属学協会及び役員・委員等

日本物理学会・正会員（1998年5月）

応用物理学会・正会員（2002年7月）

米国物理学会・正会員（2005年12月）

日本結晶成長学会・正会員（2011年11月）

日本結晶成長学会誌・編集委員（2019年4月1日～）