基本情報

学科名 講座名 (研究室名)

物理工学専攻 ナノ工学 (ナノデザイン研究室)

教員構成 職名・氏名 (教授・中村 浩次, 助教・名和 憲嗣)

I. 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, 機械学習

2. 研究テーマ

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

II. 研究活動[欧文は原文で記入する。]

1. 口頭発表

●国際会議

Korean Magnetic Society 2021 Winter Conference (202111) オンライン “Design of Spinel-Oxide-Based Tunnel Barriers for Advanced Spintronics Devices” K. Nawa, K. Masuda, S. Ichikawa, H. Sukegawa, K. Nakada, S. Mitani, Y. Miura

●国内学会

第45回日本磁気学会学術講演会 (202109) オンライン “MgOとMgAl₂O₄を用いた3層型バリアによる磁気抵抗効果のバイアス電圧依存性の改善” 名和憲嗣, 増田啓介, 三浦良雄

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “強相関系誘電特性の第一原理計算と機械学習” 松本崇宏, 名和憲嗣, 中村浩次

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “MgO上のCo_{1-x}Fe_x多層膜におけるダンピング定数の原子配列依存” 服部壮汰, 名和憲嗣, 中村浩次

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “2層薄膜Co/5d重金属におけるスピン・異常ホール伝導度：5dバンドフィリングの解析” 福谷真奈, 名和憲嗣, 中村浩次

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “NV中心ダイヤモンドにおける電子配置とNV構造の関係” 松下和寛, 名和憲嗣, 佐野和博, 中村浩次

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “First-principles study of structural and electronic properties of graphene/MoS₂ heterostructure” D. P. Hastuti¹, K. Nawa, K. Nakamura

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “Magnon transport in NiO based on first-principles calculations” A. Gumarilang, K. Nawa, K. Nakamura

第82回応用物理学会秋季学術講演会 (202109) オンライン “Giant tunnel magnetoresistance under bias voltages in a magnetic tunnel junction with a tri-layered MgO/MgAl₂O₄/MgO barrier” K. Nawa, K. Masuda, Y. Miura

気情報通信学会 磁気記録・情報ストレージ研究会 (202110) オンライン “スピン軌道相互作用が絡む磁性多層薄膜の第一原理計算と物質設計” 中村浩次, 名和憲嗣

日本物理学会第77回年次大会 (202203) オンライン “角度依存X線磁気円二色性の第一原理計算による3d-5d遷移金属合金の電子構造解析” 牛田真由美, 名和憲嗣, 中村浩次

日本物理学会第77回年次大会 (202203) オンライン “磁性多層膜磁性の機械学習：データ拡張法による学習効率の向上と磁気特性予測” 名和憲嗣, 萩原克幸, 中村浩次

日本物理学会第77回年次大会 (202203) オンライン “エピタキシャルPt薄膜におけるスピンホール効果の結晶配向依存性” 池淵徹也, 塩田陽一, 小野輝男, 中村浩次, 森山貴広

第69回応用物理学会春季学術講演会 (202203) オンライン “Efficient machine learning for ferromagnetic multilayers by Gaussian data-augmentation method” K. Nawa, K. Hagiwara, K. Nakamura

●その他

Asian Physics Symposium 2021 (202110) オンライン “Machine learning for effective on-site Coulomb interaction parameters in transition metal oxides in DFT+U method” T.

Matsumoto, K. Nawa, K. Nakamura

Asian Physics Symposium 2021 (202110) オンライン “Tuning the

Dzyaloshinskii-Moriya Interaction in Fe/MgO-based Thin Film” A. -M. Pradipto, K. Nakamura

2. 著書

“スピントロニクスのための計算機ナノマテリアルデザイン” 内田老鶴圃

(202202) p.26 中村 浩次 吉田博, 白井正文, 赤井久純, 赤井久純, 小田竜樹, 中村浩次, 神吉輝夫, 中村浩次, 佐藤和則, 真砂啓, 福島鉄也, 新屋ひかり, 三浦良雄, 大戸達彦, 阿部英介 (単著または編著)

3. 学術論文

●原著論文 (査読のあるもの。)

“Electric-field effect on magnetic moments in Co ultra-thin films deposited on Pt” A. Obinata, T. Koyama, F. Matsukura, K. Nakamura, and D. Chiba Applied Physics Letters [118, pp.1524051~1524054 (202104)]

“Atomic-layer stacking dependence of the magnetocrystalline anisotropy in Fe-Co multilayer thin films at MgO(001) interface” K. Nakamura, K. Nozaki, K. Hayashi, A.-M. Pradipto, M. Weinert, T. Oguchi Journal of Magnetism and Magnetic Materials [537, pp.1681751~1681758 (202106)]

“Optical and magneto-optical properties of Fe_xAg_x superlattices: first-principles study” M. Arifin, K. Nakamura Journal of Physics: Conference Series [1951, pp.0120461~0120467 (202107)]

“Spin Hall effect in a spin-1 chiral semimetal ” K. Tang, Y.-C. Lau, K. Nawa, Z. Wen, Q. Xiang, H. Sukegawa, T. Seki, Y. Miura, K. Takanashi, S. Mitani Physical Review Research [3, pp.033101-1~033101-10 (202107)]

“Dzyaloshinskii-Moriya interaction in noncentrosymmetric Superlattices” W. S. Ham, A.-M. Pradipto, K. Yakushiji, K. Kim, S. H. Rhim, K. Nakamura, Y. Shiota, S. Kim, T. Ono npj Computational Materials [7, pp.1291~1297 (202108)]

“Optical and magneto-optical anisotropies of FeCu superlattice: band-by-band decomposition analysis” M. Arifin, K. Nawa, K. Nakamura Japanese Journal of Applied Physics [60, pp.0920061~0920066 (202108)]

“First-Principles Disordered Local-Moment Study on Temperature Dependence of Spin Polarization in Co₂Fe(Ga_{0.5}Ge_{0.5}) Heusler Alloy” I. Kurniawan, K. Nawa, K. Masuda, Y. Miura, K. Hono Acta Materialia [218, pp.117218-1~117218-10 (202108)]

“Density Functional Theory Approach for Muon Sites Estimation in Mn₃Sn” F. H. Murdaka, E. Suprayoga, A.-M. Pradipto, K. Nakamura, A. A. Nugroho Materials Science Forum [1028, pp.199~203 (202104)]

“Enhanced Magnetoresistance under Bias Voltage in Fe/MgO/MgAl₂O₄/MgO/Fe Trilayer Tunneling Barrier Junction” K. Nawa, K. Masuda, Y. Miura Physical Review Applied [16, pp.044037-1~044037-11 (202110)]

“Slater-Pauling-like Behavior of Spin Hall Conductivity in Pt-based Superlattices” J. Math. Fund. Sci. [53, pp.369~379 (202112)]

“Crystal orientation dependence of spin Hall angle in epitaxial Pt/FeNi systems” T. Ikebuchi, Y. Shiota, T. Ono, K. Nakamura, T. Moriyama Appl. Phys. Lett. [120, pp.0724061~0724065 (202202)]

●国際会議のProceedings

●総説, 解説等

●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

機械学習による磁性薄膜材料設計に関する研究 (応用物理学会) “Efficient machine learning for ferromagnetic multilayers by Gaussian data-augmentation method” 名和 憲嗣, 萩原 克幸, 中村 浩次

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（A）） 「反強磁性体テラヘルツスピントロニクス」の創成」
（分担，森山貴広・21H04562） 700（千円）

科学研究費（基盤研究（C）） 「機械学習によるスピン軌道相互作用が絡む磁気・伝導・光物性を持つ人工多層薄膜の設計」 （代表・中村 浩次・工学研究科・新規・21K03444） 1,170（千円）

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・19K03716） 250（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）21（千円）

公益財団法人 立松財団（代表・新規）・1,500（千円）

3. 民間等の共同研究・受託研究

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・名古屋支部委員 (2002～2021)

応用物理学会・スピントロニクス研究会幹事 (2020～2022)

●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

名和 憲嗣

●所属学協会及び役員・委員等

日本物理学会 (2013～)

日本磁気学会 (2015～)

応用物理学会 (2016～)

物性グループ・物性委員会（2021～）

- 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)
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) 2021 International Conference on Solid Devices and Materials (2021年9月6-9日) オンライン
 “An ab initio-based approach for the formation of pyramidal inversion domain boundaries in highly Mg-doped GaN
 ○Katsuhide Niki, Toru Akiyama, Tomonori Ito
 - (2) 2021 International Conference on Solid Devices and Materials (2021年9月6-9日) オンライン
 Structures and stability of GaN/ β -Ga₂O₃ interface: a first-principles study
 ○Fumiaki Hishiki, Toru Akiyama, T. Kawamura, Tomonori Ito
 - (3) International Conference on Materials and Systems for Sustainability (2021年11月4-6日) オンライン
 “Direct approach for calculating individual energy of step edges on polar AlN(0001) and GaN(0001) surfaces using density functional calculations”
 ○Toru Akiyama, A. Nakatani, T. Shimizu, T. Ohka, Tomonori Ito
 - (4) 2021 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future ULSI Devices: Science and Technology (2021年11月14-16日) オンライン
 “Ab initio Study for Orientation Dependence of Nitrogen Incorporation at 4H-SiC/SiO₂ Interfaces”
 ○Toru Akiyama, Tsunashi Shimizu, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, *Kenta Chokawa, *Kenji Shiraishi
 - (5) 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (2022年1月11-13日) 名古屋
 “Ab initio-based approach for reaction process at 4H-SiC/SiO₂ interfaces”
 ○Toru Akiyama, T. Shimizu, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, *Kenji Shiraishi
 - (6) 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (2022年1月11-13日) 名古屋
 “First-principles calculation of optical properties of III-V nitride semiconductors”
 ○Takahiro Kawamura, Kouhei Basaki, Satoshi Ohata, Toru Akiyama, and *Yoshihiro Kangawa
- 国内学会
 - (1) 第82回応用物理学会秋季学術講演会 (2020年9月10日-9月13日) オンライン
 “スパッタアニール法を用いた a 面 AlN の結晶性の基板オフ角依存性”
 ○渋谷康太, 上杉謙次郎, 肖世玉, 正直花奈子, 窪谷茂幸, 秋山亨, 三宅秀人
 - (2) 第82回応用物理学会秋季学術講演会 (2020年9月10日-9月13日) オンライン

“第一原理計算による AlN(0001)および GaN(0001)表面でのステップ形成エネルギーの評価”

○秋山亨, 中谷淳嵩, 清水紀志, 相可巧, 伊藤智徳

- (3) 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会 (2020 年 9 月 11 日-9 月 13 日) オンライン
“4H-SiC/SiO₂ 界面での窒素取り込みの面方位依存性に関する理論検討”
○秋山亨, 清水紀志, 伊藤智徳, *影島博之, *白石賢二
- (4) 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会 (2020 年 9 月 21 日-9 月 23 日) オンライン
“界面エネルギーに基づく高濃度 Mg 添加 GaN におけるピラミッド型インバージョンドメイン形成の評価”
○仁木克英, 秋山亨, 伊藤智徳
- (5) 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会 (2020 年 9 月 21 日-9 月 23 日) オンライン
“第一原理計算による GaN/ β -Ga₂O₃ 界面構造の理論解析”
○日紫喜文昭, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (6) 第 27 回界面電子デバイス界面テクノロジー研究会 (2021 年 1 月 28 日-1 月 29 日) オンライン
“4H-SiC/SiO₂ 界面での窒素酸化物およびアンモニアの反応機構の理論的検討”
○秋山 亨, 清水紀志, 伊藤智徳, *影島博之, *白石賢二
- (7) 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) 相模原
“窒化物半導体におけるピラミッド型インバージョンドメイン形成の理論解析”
○仁木克英, 秋山亨, 伊藤智徳
- (8) 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) 相模原
“GaN(0001)基板上に形成する Ga₂O₃ 膜の構造安定性の理論解析: 膜厚依存性の検討”
○日紫喜文昭, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (9) 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) 相模原
“第一原理計算に基づく AlN(0001)表面上の GaN 層の構造安定性評価”
○足道悠, 秋山亨, 伊藤智徳
- (10) 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) 相模原
“(Al_xGa_{1-x})₂O₃ 混晶の構造安定性および混和性に関する理論的検討”
○藤田柊理, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (11) 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) 相模原
“格子歪みによる α -Ga₂O₃ のバンドギャップエンジニアリング”
○河村貴宏, 秋山亨
- (12) 第 69 回応用物理学会春季学術講演会 (2021 年 3 月 16 日-3 月 19 日) 相模原
“4H-SiC/SiO₂ 界面での窒素酸化物およびアンモニアの反応機構の理論的検討”
○秋山亨, 清水紀志, 伊藤智徳, *影島博之, *白石賢二

●その他

2. 著書

3. 学術論文

●原著論文

- (1) “Effective approach for calculating individual energy of step edges on polar:AlN(0001) and GaN(0001) surfaces”
○Toru Akiyama, Atsutaka Nakatani, Tsunashi Shimizu, Takumi Ohka, and Tomonori Ito
Japanese Journal of Applied Physics **60**, pp. 080701-4 (2021).
- (2) “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
Journal of Crystal Growth **570**, pp. 126244-1-6 (2021).
- (3) “Effect of surface structural change on adsorption behavior on InAs wetting layer surface grown on GaAs(001) substrate”
○Toru Akiyama, K. Yonemoto, Fumiaki Hishiki, Tomonori Ito,
Journal of Crystal Growth **570**, pp. 126233-1-6 (2021).
- (4) “Ab initio-based approach for the oxidation mechanisms at SiO₂/4H-SiC interface: Interplay of dry and wet oxidants during interfacial reaction”
○Tsunashi Shimizu, Toru Akiyama, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, *Masashi Uematsu, *Kenji Shiraishi
Physical Review Materials **5**, pp. 114601-1-12 (2021).
- (5) “Ab initio study for orientation dependence of nitrogen incorporation at 4H-SiC/SiO₂ interface”
○Toru Akiyama, T. Shimizu, Tomonori Ito, *Hiroyuki Kageshima, Kenta Chokawa, and *Kenji Shiraishi
Japanese Journal of Applied Physics **61**, pp. SH1002-1-5 (2022)
- (6) “Bandgap engineering of α -Ga₂O₃ by hydrostatic, uniaxial, and equibiaxial strain”
○Takahiro Kawamura, Toru Akiyama
Japanese Journal of Applied Physics **61**, pp. 021005-1-8 (2022)

●総説, 解説等

- (1) “シリコン原子はどこへ行く? まだまだ不思議な熱酸化”
*影島 博之, 秋山亨, *植松 真司, *白石 賢二
応用物理 **91**, pp.155~159 (2022).

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 基盤研究 (C)「窒化物半導体量子ドット形成のボンドエンジニアリング」(代表・継続・19K05268) 900 (千円)
(2) 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・継続・20K05324) 700 (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～)
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4件 学術論文3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4件 学術論文3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～）