

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 (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

The 2nd International Congress on Pure and Applied Sciences-2022 (202206) オンライン
“Material design of multilayer films with spin-orbit induced magnetic phenomena: first principles study” K. Nakamura

24th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (202206) Okinawa
“First-Principles Study on Spin and Anomalous Hall Conductivities in Bilayers of Co and 5d Heavy Metals” K. Nawa, M. Fukutani, K. Nakamura

24th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (202207) Okinawa
“Controllable Electronic and Spin Properties of MoS₂-based van der Waals Heterostructures” D. P. Hastuti¹, K. Nawa, K. Nakamura

24th International Colloquium on Magnetic Films and Surface (202207) 那覇市

“First-Principles Study on Spin and Anomalous Hall Conductivities in Bilayers of Co and 5d Heavy Metals” Kenji Nawa, Mana Fukutani, Kohji Nakamura

24th International Colloquium on Magnetic Films and Surface 那覇市 “Spin-orbit torques in cobalt-based topological semimetal heterostructure” Z. Wen, K. Tang, Y.-C. Lau, K. Nawa, H. Sukegawa, T. Seki, Y. Miura, K. Takanashi, S. Mitani

●国内学会

第46回日本磁気学会学術講演会 (202209) 長野市 “スモールデータ機械学習に基づく磁性多層膜設計：アンサンブル学習とデータ拡張法による予測精度の向上” 名和憲嗣, 萩原克幸, 三浦良雄, 中村浩次

第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台市 “2層膜Co/5d重金属におけるスピン・異常ホール伝導度と結晶磁気異方性の第一原理計算” 福谷真奈, 名和憲嗣, 中村浩次

第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台市 “L10型合金の角度依存X線磁気円二色性と電子構造の第一原理計算” 牛田真由美, 名和憲嗣, 中村浩次

第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台市 “カチオンドープしたNiOにおける交換相互作用と結晶磁気異方性, 磁気双極子双極子相互作用の第一原理計算” 尾崎涼佑, 名和憲嗣, 中村浩次

第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台市 “Tunable Optical Properties in MoS₂/WS₂ Heterostructure by External Electric Field” D. P. Hastuti, K. Nawa, K. Nakamura

第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台市 “Role of magnetocrystalline anisotropy and magnetic dipole-dipole interaction in spin Seebeck effect at NiO/Pt” A. G. Ahmadi, K. Nawa, K. Nakamura

第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台市 “Materials exploration using ensemble machine learning with small dataset” K. Nawa, K. Hagiwara, Y. Miura, K. Nakamura

IEEE Magnetics Society 名古屋支部若手研究会 (202302) 名古屋市 “Electronic structures of graphene/MoS₂ heterostructure from first principles: The effects of stacking orientation, element substitution, and interlayer distance” D. P. Hastuti, K. Nawa, K. Nakamura

70回応用物理学会春季学術講演会 (202303) 千代田区 “The Effect of External Electric Field on Electronic and Spin Properties of MoS₂-graphene van der Waals Heterostructures” D. P. Hastuti, K. Nawa, K. Nakamura

●その他

2. 著書

3. 学術論文

●原著論文（査読のあるもの。）

“Prediction-accuracy improvement of neural network to ferromagnetic multilayers by Gaussian data augmentation and ensemble learning” Kenji Nawa/Katsuyuki Hagiwara/Kohji Nakamura Computational Materials Science [219巻, pp.112032～112032 (202302)]

“Electric field-induced modification of Dzyaloshinskii-Moriya interaction in Fe/MgO (001) with heavy metal insertions” Abdul-Muizz Pradipto, Kohji Nakamura Journal of Physics: Conference Series [2243, pp.01209201～01209208 (202206)]

“Electronic Structures of Graphene/MoS₂ Heterostructure: Effects of Stacking Orientation, Element Substitution, and Interlayer Distance” D. P. Hastuti¹, K. Nawa, K. Nakamura Indonesian Journal of Chemistry [23, pp.140～147 (202210)]

“Modification of plasmonic properties in several transition metal-doped graphene studied by the first principles method” D. U. Dzujah, A.-M. Pradipto, R. Hidayat, K. Nakamura RSC Advances [13, pp.1446～1454 (202212)]

●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）
磁気記憶装置

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）） 「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・継続・21K03444） 910（千円）

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）） 「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） 200（千円）

科学研究費（若手研究） 「第一原理計算と機械学習による磁気デバイスのトレードオフ特性の解消と高機能化」（代表・名和 憲嗣・工学研究科・新規・22K14290） 1,300（千円）

2. 省庁・財団からの基金

3. 民間等の共同研究・受託研究

共同研究、キオクシア株式会社 1,001（千円）

4. 奨学寄附金

公益財団法人 中部電気利用基礎研究振興財団・1,710（千円）

名和 憲嗣・700（千円）

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 (1999～)

応用物理学会 (2015～)

IEEE (2022～)

日本物理学会・名古屋支部委員・名古屋支部委員 (2002～2023)

応用物理学会・スピントロニクス研究会 (2020～2023)

●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～)

応用物理学会 (2015～)

日本磁気学会 (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 2)
教員構成 准教授・秋山 亨		

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) 2022 International Conference on Solid Devices and Materials (2022年9月) 千葉
 “First-principles study for self-limiting growth of GaN layers on AlN(0001) surface”
 ○Haruka Sokudo, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
- (2) 2022 International Conference on Solid Devices and Materials (2022年9月) 千葉
 “Effect of lattice constraint on structural stability and miscibility of $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_2\text{O}_3$ films: A first-principles study”
 ○Shuri Fujita, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, and Tomonori Ito
- (3) The 4th International Workshop on Gallium Oxide and Related Materials (2022年11月) 長野
 “Structural change of Ga_2O_3 induced by charged oxygen vacancies: a first-principles study”
 ○Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, Tomonori Ito
- (4) The 4th International Workshop on Gallium Oxide and Related Materials (2022年11月) 長野
 “Influence of Biaxial Strain on Bandgaps of b- Ga_2O_3 ”
 ○T. Kawamura and T. Akiyama
- (5) International Workshop on Nitride Semiconductors (2022年8月) ベルリン
 “Bandgap change in short-period InN/AlN superlattices induced by lattice strain”
 ○Takahiro Kawamura, Kohei Basaki, Akito Korei, Toru Akiyama
- (6) 9th International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces (2022年9月) 名古屋
 “First-principles Study on Interfacial Silicon Emission during Silicon Thermal Oxidation”
 *○Hiroyuki Kageshima, Toru Akiyama, and *Kenji Shiraishi

●国内学会

- (1) 第48結晶成長国際会議 (2022年11月) 広島
 “キンクおよびステップを含む AlN(0001)表面の構造安定性に関する理論的検討”
 ○秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (2) 第14回ナノ構造エピタキシャル成長講演会 (2022年11月) 宇部
 “GaNの熱伝導率に対する点欠陥の影響”
 ○河村貴宏, *西山稜悟, 秋山亨, *宇佐美茂佳, *今西正幸, *吉村政志, *森勇介
- (3) 第70回応用物理学会春季学術講演会 (2023年3月) 東京
 “キンクおよびステップを含む AlN(0001)表面の構造安定性および吸着・脱離の挙動に関する理論的検討”

- 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (4) 第70回応用物理学会春季学術講演会 (2023年3月) 東京
“ α -Ga₂O₃/Al₂O₃ 超格子のバンド構造解析 ”
○河村 貴宏、秋山 亨
- (5) 第70回応用物理学会春季学術講演会 (2023年3月) 東京
“Si 酸化における界面から酸化膜への Si 放出過程の理論検討”
*○影島 博之、秋山 亨、*白石 賢二
- (6) 第70回応用物理学会春季学術講演会 (2023年3月) 東京
“4H-SiC/SiO₂ 界面におけるバンド配列の面方位依存性に関する理論検討”
○松田隼, 秋山亨, *畠山哲夫, *白石賢二, *中山隆史
- (7) 第83回応用物理学会秋季学術講演会 (202209) 仙台 “2 軸歪みによる β -Ga₂O₃ のバンドギャップ変化 ”
○河村 貴宏、秋山 亨
- (8) 第83回応用物理学会秋季学術講演会 (2022年9月) 仙台 “AlN に格子整合する六方晶 Nb₂N 超伝導体のエピタキシャル成長 ”
- (9) *○小林 篤、*紀平 俊矢、*武田 崇仁、*小林 正起、*秋山 亨、河村 貴宏、原田 尚之、*上野 耕平、*藤岡 洋
- (10) 第83回応用物理学会秋季学術講演会 (2022年9月) 仙台 “
“Ga₂O₃ の構造安定性に対する酸素空孔の影響に関する理論的検討”
○秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳
- (11) 第83回応用物理学会秋季学術講演会 (2022年9月) 仙台 “Surface Stability of reconstructions on BA_s (111) surface: An Ab Initio-Based Approach ”
○*Peiyang Cai, Toru Akiyama, *Tomomasa Kiyozawa, *Takafumi Hatano, *Shunta Harada, *Miho Tagawa, Hiroshi Ikuta, *Toru Ujihara

2. 著書

3. 学術論文

●原著論文

- (1) “Reaction of nitrous oxide and ammonia molecules at 4H-SiC/SiO₂ interface: An ab initio study”
○T. Akiyama, T. Shimizu, T. Ito, H. Kageshima, and K. Shiraiishi
Surface Science **723**, pp.122102-1~122102-7 (2022)
- (2) “An ab initio-based approach for the formation of pyramidal inversion domain boundaries in highly Mg-doped GaN”
○Katsuhide Niki, Toru Akiyama, and Tomonori Ito
Japanese Journal of Applied Physics **61**, pp.055503-1~055503-6 (2022)
- (3) “Influence of oxygen-related defects on the electronic structure of GaN”
○Satoshi Ohata, Takahiro Kawamura, Toru Akiyama, *Shigeyoshi Usami, *Masayuki Imanishi, *Masashi Yoshimura, *Mori Yusuke, *Tomoaki Sumi, *Junichi Takino
Japanese Journal of Applied Physics **61**, pp.122102-1~122102-7 (2022)
- (4) “Epitaxial Junction of Inversion Symmetry Breaking AlN and Centrosymmetric NbN: A Polarity Control of Wide-Bandgap AlN”
*○Atsushi Kobayashi, *Shunya Kihira, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, *Takuya Maeda, *Kohei Ueno, Hiroshi Fujioka
ACS Applied Electronic Materials **5**, pp.240~246 (2023)

- (5) “Bandgap Change in Short-Period InN/AlN Superlattices Induced by Lattice Strain”
○Takahiro Kawamura, Kouhei Basaki, Akito Korei, Toru Akiyama, *Yoshihiro Kangawa
Physica Status Solidi B, pp.2200549-1~2200549-5 (2023)
- (6) “Role of charged oxygen vacancies and substrate lattice constraint on structural stability of Ga₂O₃ polymorphs”
○Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, Tomonori Ito Applied Physics Express **16**, pp.015508-1~015508-6 (2023)
- (7) “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
Japanese Journal of Applied Physics **61**, pp.SH1002-1~SH1002-5 (2022)
- (8) “First-principles study for self-limiting growth of GaN layers on AlN(0001) surface”
○Haruuka Sokudo, Toru Akiyama, Tomonori Ito
Japanese Journal of Applied Physics **62**, pp.SC1014-1~C1014-6 (2023)
- (9) “Effect of lattice constraint on structural stability and miscibility of (Al_xGa_{1-x})₂O₃ films: a first-principles study”
○Shuri Fujita, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, Tomonori Ito
Japanese Journal of Applied Physics **62**, pp.SC1031-1~SC1031-5 (2023)

●国際会議の Proceedings

- (1) “First-principles study for self-limiting growth of GaN layers on AlN(0001) surface”
Haruuka Sokudo, Toru Akiyama, Tomonori Ito
Extend Abstracts of the international conference on solid state devices and materials (2022)
- (2) “Effect of lattice constraint on structural stability and miscibility of (Al_xGa_{1-x})₂O₃ films: a first-principles study”
Shuri Fujita, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, and Tomonori Ito
Extend Abstracts of the international conference on solid state devices and materials (2022)

●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
 - (1) Award Applied Physics Express: 2021 Outstanding Reviewer Awards Institute of Physics (2022)
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) 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)900(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～）
学術論文1件
- (2) 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3件 学術論文2件
- (3) 中山隆史・千葉大学理学部・教授・理学博士
”ゲート酸化膜界面物性に関する研究”（2003年4月～）
口頭発表1件
- (4) 畠山哲夫・富山県立大学工学部・教授・理学博士
”ゲート酸化膜界面物性に関する研究”（2023年4月～）
口頭発表1件
- (5) 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2件 学術論文2件
- (6) 小林篤・東京大学生産技術研究所・准教授・工学博士
”半導体薄膜成長に関する理論研究”（2022年4月～）
口頭発表1件 学術論文1件
- (7) 宇治原徹・名古屋大学未来材料・システム研究所・教授・工学博士
”半導体薄膜成長に関する理論研究”（2021年10月～）
口頭発表1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～）

日本結晶成長学会・結晶成長ハンドブック編集委員会・結晶成長ハンドブック編集幹事（2019年4月～）