

## 第20回分子動力学シンポジウム

**主催** 日本材料学会

**協賛** 応用物理学会, 化学工学会, 高分子学会, 精密工学会, 電気学会, 電子情報通信学会, 土木学会, 日本応用数理学会, 日本機械学会, 日本金属学会, 日本計算工学会, 日本原子力学会, 日本高圧力学会, 日本航空宇宙学会, 日本材料強度学会, 日本セラミックス協会, 日本船舶海洋工学会, 日本塑性加工学会, 日本鉄鋼協会, 日本複合材料学会, 日本溶接協会, 溶接学会 (予定)

**日程** 平成 27 年 5 月 22 日 (金)

**会場** 山形大学工学部百周年記念会館  
(〒992-8510 米沢市城南 4-3-16)

**趣旨** 近年, ナノスケールの構造体や材料組織の力学的特性, 電気的特性等の予測・評価およびマクロな材料特性出現メカニズムの解明など, 様々な目的に対して電子・原子・分子レベルシミュレーションによる研究が行われており, 計算機実験の重要性が益々増してきています. 本学会分子動力学部門委員会では, 発足以来, 原子/電子レベルのシミュレーションに関連する研究者・技術者が一堂に会し, 議論を行なう場として, 毎年一回のシンポジウムを開催してまいりました. 第 20 回の節目を迎えます今回も, 若手からベテランまで様々な立場の方々にご発表いただき, お互いの交流を深めることで, さらなる材料研究の発展および議論の活性化を促したいと考えています. 皆様のご参加をお待ちしております.

### 参加登録料

日本材料学会会員 1,500 円, 同学生会員 500 円  
非会員 3,000 円, 学生非会員 1,000 円

### 講演論文集

会員 (含協賛学協会員) 3,000 円, 非会員 4,000 円  
[USB メモリで配布します]

## プログラム

### 9:50-10:00 【開会のあいさつ】

**10:00-10:40 【基調講演】** <座長: 君塚肇 (阪大)>  
「原子・分子シミュレーションと実験ナノメカニクス研究の相互作用」 磯野吉正 (神戸大)

**10:50-11:50 【口頭発表セッション(1) : 原子スケールのメカニクス】** <座長: 嶋田隆広 (京大)>

- O01 粒界転位源硬化現象によるナノ構造体の加工硬化  
○下川智嗣 (金沢大), 宮木智也, 東田賢二 (九州大)
- O02 結晶粒界不純物偏析機構とイオン伝導度への影響  
○吉矢真人 (阪大), 横井達矢
- O03 電子・原子論に基づく Mg 基 LPSO 構造の形成メカニズムに関する検討  
○松中大介 (信州大), 渋谷陽二 (阪大)

### 11:50-13:10 【昼食・ポスター準備】

### 13:10-15:10 【ポスターセッション】

座長: 上原拓也 (山形大)

#### 【欠陥・界面・変形挙動】

- P01 金属薄膜に吸着した水素原子が誘起する転位運動  
○松本龍介 (京大), 岸本直樹, 浦長瀬正幸
- P02 粒界・自由表面を有するマグネシウム結晶の一軸変形挙動  
○浦長瀬正幸 (京大), 松本龍介
- P03 間欠塑性の統計性からみた粒界の大規模変形抑制能力  
○新山友暁 (金沢大), 下川智嗣
- P04 fcc 金属におけるモード I 型き裂の AES 解析  
○片山寛 (神戸大院), 津川悠太, 屋代如月 (岐阜大)
- P05 鉄の降伏応力に及ぼす固溶体効果の非経験的予測  
○新里秀平 (阪大院), 譚田真人 (阪大), 君塚肇, 尾方成信
- P06 アンブレラインテグレーション法を用いた金属中点欠陥の移動過程における自由エネルギー評価  
○高橋和平 (阪大院), 石井男男, 君塚肇 (阪大), 尾方成信
- P07 耐熱鋼におけるクロム炭化物界面方位の安定性評価に関する分子動力学計算  
○中田達也 (東大院), 熊谷知久 (電中研), 泉聡志 (東大), 酒井信介

#### 【結晶・構造・相変態】

- P08 分子動力学法による多元系金属ガラスにおける変形の局所化の検討  
○平野晃嗣 (信州大院), 川嶋進太, 西村正臣 (信州大)
- P09 局所エネルギー密度の解析による金属ガラスの空間的特徴長さの検討  
○宮崎成正 (阪大院), 譚田真人 (阪大), 尾方成信
- P10 加速分子動力学法による Cu-Zr 過冷却液体の結晶化解析  
○中井千晶 (阪大院), 宮崎成正, 譚田真人 (阪大), 尾方成信
- P11 Accelerating molecular dynamics simulations of cubic-to-tetragonal phase transition in zirconia and yttria-stabilized zirconia  
○Tianwei Wang (Univ. Tokyo), Shotaro Hara, Satoshi Izumi, Shinsuke Sakai
- P12 分子動力学法によるアモルファスシリコン酸化膜の真性応力評価  
○井上優 (東大院), 高本聡, 田中展 (阪大), 泉聡志 (東大), 酒井信介
- P13 小自由度原子系の構造転移ダイナミクスの動力学解析  
○岡本和大 (阪大院), 土井祐介 (阪大), 中谷彰宏

P14 双安定格子モデルを用いたエネルギー局在による構造変化ダイナミクスの検討

品川徹 (阪大院), ○土井祐介 (阪大), 中谷彰宏

P15 球状表面の凝集体構造に関する分子動力学解析  
○上原拓也 (山形大)

[カーボン・ポリマー]

P16 圧縮荷重を受ける多層ナノチューブ座屈の分子動力学シミュレーション

○佐藤誠修 (東大院), 梅野宜崇 (東大), 久保淳 (東大院)

P17 多層カーボンナノチューブにおける局部座屈と原子弾性剛性係数

○西村正臣 (信州大), 高木佑

P18 カーボンナノチューブ添加により強化されたアルミコンポジットの機械的特性の解析

○森英喜 (産業技短), 尾方成信 (阪大)

P19 カーボンナノチューブの欠陥対の安定性解析

○河原永也 (阪大院), LEI Xiao-Wen (阪大), 土井祐介, 中谷彰宏

P20 アモルファスポリエチレンの押し込みで発現する粘弾性挙動

○屋代如月 (岐阜大), 藤麻成貴 (神戸大院)

P21 分子動力学を用いたグラフェン上のエポキシ (BADGE・BFDGE) の挙動シミュレーション

○和田隆生 (ウェーブフロント)

P22 コラーゲンフィブリルの分子動力学モデリングと力学的特性評価

○齋藤賢一 (関西大), 白花拓也 (関西大院), 鈴木鷹幸, 宅間正則 (関西大), 高橋可昌, 佐藤知広 (栗本鉄工)

[第一原理・ポテンシャル関数]

P23 Si・SiO<sub>2</sub> 界面での酸化を表現する電荷移動型原子間ポテンシャル

○高本聡 (東大院), 山崎隆浩 (NIMS), 大野隆央, 泉聡志 (東大), 酒井信介

P24 SiCの変形・破壊解析のための原子間ポテンシャル作成と分子動力学シミュレーション

○久保淳 (東大院), 長尾至成 (阪大), 梅野宜崇 (東大)

P25 強誘電体 PbTiO<sub>3</sub> の欠陥-ひずみ誘起マルチフェロイック相転移に関する第一原理解析

○嶋田隆広 (京大), 荒木康光 (京大院), 北村隆行 (京大)

P26 BN層状材料の原子シミュレーション手法に関する研究

○木下佑介 (名大), 内山裕樹 (名大院), 大野信忠 (名大)

P27 第一原理計算による Fe のパイエルス・ポテンシャルに対する固溶元素の影響評価

○譚田真人 (阪大), 尾方成信

P28 Al-Mg-Zn-Cu 系合金結晶粒界における第一原理計算

○福田忠生 (岡山県立大), 小武内清貴, 那須雄大, 尾崎公一

15:10-15:30 【コーヒーブレイク】

15:30-16:10 【口頭発表セッション(2) : 第一原理解析】

<座長: 木下佑介 (名大) >

O04 金属粒界の第一原理引張試験への局所エネルギー・局所応力解析法の適用

Hao Wang (上海大), ○香山正憲 (産総研), 田中真悟, 椎原良典 (東大)

O05 合金元素による機械特性改善のための転位芯構造解析

○都留智仁 (原子力研究開発機構), D.C. Chrzan

16:20-17:20 【第20回記念講演】

<座長: 屋代如月 (岐阜大) >

「Single digit ナノスケールの破壊力学」

北村隆行 (京大)

17:20-17:30 【閉会のあいさつ・MD賞授賞式】

※口頭発表セッション: 発表15分, 質疑5分とします。

※ポスターセッション: 前半 (13:10-14:10) は奇数番号, 後半 (14:10-15:10) は偶数番号のコアタイムとします。

※講演順および講演時間等が変更になる場合があります。最新情報は分子動力学部門委員会ホームページをご確認下さい (URL: <http://md.jsms.jp>)。