

## 第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第7回マルチスケール材料力学シンポジウム)

※新型コロナウイルス感染予防のため、オンラインもしくはハイブリット(対面+オンライン)での開催になる可能性がございます。

**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, 日本高压力学学会, 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, 日本非破壊検査協会, 日本複合材料学会, 日本溶接協会, 溶接学会 (予定)

**期日** 2022年5月29日(日)~31日(火)  
**会場** 大阪科学技術センター (小ホール+中ホール)  
(〒550-0004 大阪市西区靱本町1-8-4)

### 趣旨

本学会マルチスケール材料力学部門委員会では、実験・理論・解析からマイクロ・メゾ・マクロにまたがる力学問題や材料物理課題などの幅広い研究分野を対象に、このような研究分野における研究者・技術者が一堂に会し、研究の現状と将来動向を多面的・多角的に議論する場として、年1回のシンポジウムを開催してまいりました。第7回となる今回は、日本材料学会創立70周年記念事業の一貫として通常よりも規模を拡大し、「第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム」(第1回は創立60周年記念事業(2011年))として、招待講演とポスター発表(一般)の形式で材料の力学について議論する場となるように企画いたしました。一般講演はポスター発表のみですが、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。材料の、物性特性、変形素過程、組織と力学の関係、変形・破壊現象のサイズ効果など様々なスケールに現れる未解明な力学現象を対象とし、例えば、(i)第一原理計算などによる電子物性研究、マルチスケール・マルチフィジックス解析の方法論、分子動力学法および関連手法を用いた理論解析研究、(ii)ナノ・マイクロスケール領域の力学実験研究や組織観察研究、(iii)転位論・結晶塑性論に基づく固体力学研究など、様々な研究アプローチによる発表を幅広く募集いたします。優れた内容の発表に対しては優秀講演賞・優秀学生講演賞が贈られます。ふるってご参加いただきますよう、お願い申し上げます。

**参加登録料** 日本材料学会第71期通常総会・学術講演会併設行事としての参加登録料が必要となります。(学術講演会に加えて、併設行事の公開部門委員会・シンポジウムに参加できます)

- ・日本材料学会会員 10,000円, 同学生会員 1,000円
- ・非会員 21,000円, 学生非会員 5,000円

本シンポジウムのみ参加の場合は以下の通りとなります。

- ・日本材料学会会員 2,000円, 同学生会員 500円

- ・非会員 4,000円, 学生非会員 1,000円

なお、いずれも本シンポジウムの講演論文集は含まれておりません。詳細は日本材料学会ホームページ (<http://www.jsms.jp>) 掲載の第71期通常総会・学術講演会案内をご覧ください。なお、開催方法が変更された場合、登録費が変更される可能性があります(登録料が高くなることはありません)。

### 講演論文集(オンライン配布)

会員(シンポジウム協賛学協会を含む) 3,000円  
非会員 4,000円

### 参加登録

参加登録と登録料の支払いは下記サイトから行って下さい。

URL: <https://www.jsms.jp/kaikoku/71gakuboshu.htm>

申込締切: 2022年5月6日(金)

なお、開催形式がオンラインもしくはハイブリットになった場合、開催日数日前に、当日ご参加いただくZoomのURLを担当者よりご連絡いたします。

## プログラム

5月29日(日)

### 10:00-10:05 【開会のあいさつ】

### 10:05-12:05 【セッション1】

座長: 嶋田隆広(京大)

#### 11. 電子によるリライタブル材料強度

平方寛之(京大)

#### 12. 機械学習を活用した格子欠陥における構造機能相関の理解

溝口照康(東大生研)

#### 13. 情報科学の導入による粒界物性研究の加速

田村友幸(名工大)

### 13:20-15:20 【セッション2】

座長: 下川智嗣(金沢大)

#### 14. 微分幾何学を用いた格子欠陥のナノ力学解析

垂水竜一(阪大)

#### 15. 材料強度の解析および予測的評価に向けた高精度ニューラルネットワーク型原子間ポテンシャルの開発と適用

森英喜(産技短大)

#### 16. Ni基超合金の高温破壊メカニズム

高橋可昌(関西大)

### 15:40-17:00 【ポスター発表1】

座長: 熊谷知久(電中研)

#### P1. 第一原理計算を用いた異種金属界面の剥離エネルギー解析: 界面炭素原子の影響

○松田空大(岐阜大) 屋代如月 内藤圭史

#### P2. 銀焼結接合により形成される高強度銀/シリコン基材界面の破壊挙動評価

- 松田朋己(阪大) 脊尾凌太郎 廣瀬明夫  
竹内晃久(JASRI) 上杉健太郎 安武正展
- P3. 強誘電スキルミオンのナノメカニカルライティング  
○笠井恒汰(京大) 野島崇志 嶋田隆広
- P4. 多元系合金における粒界移動抵抗の遷移メカニズムに関する原子論的検討  
○塩谷光平(金沢大) 新山友暁 下川智嗣
- P5. マグネシウムにおける伸線加工の分子動力学解析：双晶・転位構造の評価  
○壬生慎一郎(関西大) 齋藤賢一 宅間正則  
高橋可昌 佐藤知広
- P6. Nanometre-scale Hydrogen Embrittlement of a Hydrogen-charged Single Crystal Alpha Iron  
○Oyinbo Sunday(京都先端大) Mastumoto Ryosuke
- P7. タングステンカーバイドの変形と破壊の原子シミュレーション  
○彌島卓(阪大) 福岡敦史 山崎隆浩(住友電工)  
新里秀平(阪大) 尾方成信
- P8. シリコンにおける転位の挙動を再現できる原子間ポテンシャルの開発  
○平能敦雄(東大) 榊間大輝 波田野明日可 泉聡志
- P9. グラフェンファイバーの分子モデル構築および力学特性解析  
○新村海斗(福井大) LEI Xiao-Wen
- P10. 結晶/非晶ポリアミド6の力学特性に及ぼす水分子の影響  
○屋代如月(岐阜大) 内藤圭史 吉田十義(阪市大) 内田真
- P11. 疲労した金属の転位組織形成メカニズム解明への数理的アプローチ  
○飛世昂大(京大) 澄川貴志 島弘幸(山梨大)
- P12. 機械学習ポテンシャルを用いたパラジウム中水素拡散の同位体効果の量子論的解析  
○君塚 肇(名大) 志賀基之(原子力機構)
- P13. 第一原理計算による鉄系超伝導体 BaFe<sub>2</sub>As<sub>2</sub> の表面エネルギー解析  
○近藤恭悠(農工大) 石井秋光  
三好英輔 山中晃徳 山本明保
- P14. Investigation of loosening behavior of acetabular cup under cyclic loading considering degradation of surrounding bone using finite element analysis  
○Nguyen Quang Minh(長岡技科大) 大塚雄市  
Duong Thanh Tung 宮下幸雄
- P15. 加工誘起マルテンサイト変態に起因する非対称変形挙動の結晶塑性解析  
○豊田康平(熊大) 眞山剛

5月30日(月)

9:00-10:20【セッション3】

- 座長：嶋田隆広(京大)
- P17. LPSO相、これに派生したミルフィーユ材料が示す特異な塑性変形挙動

萩原幸司(名工大)

- P18. 材料と構造の異方性が重畳した弾塑性挙動の連続体解析  
眞山剛(熊大)

10:40-12:00【セッション4】

- 座長：下川智嗣(金沢大)
- P19. 転位-析出物相互作用に基づく合金強度シミュレータの開発  
高橋昭如(東理大)
- P110. 純鉄における転位と水素、空孔および空孔水素複合体の相互作用に関する分子動力学解析  
松本龍介(京都先端大)

15:40-17:00【ポスター発表2】

- 座長：熊谷知久(電中研)
- P16. ナノインデンテーション中の pop-in 現象のサイズ分布への材料と温度の影響  
○佐藤悠治(東大) 新里秀平(阪大) 大村孝仁(物材機構)  
波多野恭弘(阪大) 柳本潤(東大) 尾方成信(阪大)
- P17. SiC ウェット酸化へ適用可能な Si-O-C-H 系電荷移動型ポテンシャルの開発  
○榊間大輝(東大) 波田野明日可 泉聡志
- P18. 高濃度合金の力学機能向上の起源に関する検討  
○都留智仁(原子力機構) ロブゼンコ イバン
- P19. Chemical ordering effect on the radiation resistance of a CoNiCrFeMn high-entropy alloy  
○Li Yangen(阪大) Du Jun-Ping Yu Peijun  
Li Rui(北京科技大) Shinzato Shuhei(阪大)  
Peng Qing(中国科学院) Ogata shigenobu(阪大)
- P20. 刺激分解性ポリマーへの分子シミュレーション適用に向けた粗視化粒子モデルの検討  
○君塚 肇(名大)
- P21. 軸方向周期境界条件での CNT 束構造の分子動力学解析  
○西村正臣(信州大) 廣津壮磨 櫻井歩思侑
- P22. パーシステントホモロジーと応力集中係数によるマルチスケール評価を考慮した気孔群分布最適化における気孔体積分率の影響  
○豊場亮太(長岡技科大) 大塚雄市 宮下幸雄
- P23. 異種金属界面のはく離強度の分子動力学シミュレーション  
○水谷優太(岐阜大) 水谷優太 浅井瞭  
屋代如月 内藤圭史
- P24. 分子動力学とフェーズフィールド法のデータ同化による多結晶粒成長からの粒界物性抽出  
○三好英輔(農工大) 大野宗一(北大) 澁田靖(東大)  
山中晃徳(農工大) 高木知弘(京工繊大)
- P25. 静的変形を加えた MoS<sub>2</sub> における電子状態と光学応答の変化に対する時間依存密度汎関数法を用いた理論解析

○羽部哲朗(京都先端大) 中村康一  
P26. 変形誘起マルテンサイト変態の核形成機構とバリエーション選択の関係

○藤井航大(金沢大) 新山友暁 下川智嗣  
P27. Cu 単結晶ナノロッドの疲労変形に関する分子動力学解析

○久保 淳(東大生研) 河合江美 梅野宜崇  
P28. 鉄単結晶におけるひずみ誘起磁気相転移の電子的制御に関する第一原理解析

○阿部能将(京大) 藤田涼雅 嶋田隆広  
P29. 分子動力学法による hcp 対称傾角粒界の粒界破断シミュレーション

○村瀬駿太(岐阜大) 屋代如月 内藤圭史

5月31日(火)

9:00-10:20【ポスター発表3】

座長：熊谷知久(電中研)

P30. Chemical ordering kinetics in CrCoNi medium-entropy alloy: A neural network study

○Du Jun-Ping(阪大) Yu Peijun Shinzato Shuhei  
Meng Fanshun Sato Yuji(東大) Li Yangen(阪大)  
Fan Yiwen Ogata Shigenobu

P31. 第一原理解析に基づく結晶材料の量子的強化機構の体系的理解と化学結合論的視点からの分類

○野田大樹(京大) 坂口峻平 平方寛之 嶋田隆広  
P32. アモルファスポリプロピレンの押し込み切断シミュレーション

○岸本彪雅(岐阜大) 屋代如月 内藤圭史 加藤典子  
P33. Effects of mechanical deformation on stress-induced chemical reaction in wear behavior at Hydroxyapatite - Titanium interface using MD simulation

○Pham Dinh Dat(長岡技科大) 大塚雄市 宮下幸雄  
P34. 分子動力学法による金属ナノロッドでの臨界分解せん断応力に及ぼす断面形状の影響の解明

○河合江美(東大生研) 久保淳 梅野宜崇  
P35. ナノサイズ金属板の塑性加工: 分子動力学モデリングと変形・破壊解析

○森山快輝(関西大) 佐藤隆輔 齋藤賢一  
宅間正則 高橋可昌 佐藤知広  
P36. 高温クリープ疲労負荷環境における結晶粒界強度劣化加速因子の分子動力学解析

手塚尚吾(東北大) 鈴木秀司郎 ○鈴木研 三浦英生  
P37. 電子状態計算による不純物を添加した非晶質シリカの構造と弾性特性の解明

○宮崎桜子(東大) 榎間大輝 泉聡志  
P38. 2元系 Mg-X 合金に対するニューラルネットワーク型原子間ポテンシャルの開発

○松中大介(信州大) 永田隆  
椎原良典(豊田工大) 森英喜(産技短大)  
P39. サイズ分散を持つ固体材料における非弾性変形の間欠ダイナミクス

○新山友暁(金沢大) 塩谷光平 下川智嗣  
P40. 結晶ポリアミド9Tの引張シミュレーション

○山田愛斗(岐阜大) 屋代如月 内藤圭史  
P41. All-Atom 分子動力学モデルによるセルロースナノファイバーの弾性・非弾性挙動の解析

○三宅伸(関西大) 齋藤賢一 宅間正則  
高橋可昌 佐藤知広  
P42. 余剰電子/ホールがSi単結晶の圧力誘起相転移に及ぼす変化に関する第一原理解析

○仲山智裕(京大) 野田大樹 嶋田隆広  
P43. 乾燥に伴う材料のひび割れパターンのシミュレーション

○上原拓也(山形大) 渡邊佳唯

10:40-12:00【セッション5】

座長：下川智嗣(金沢大)

I11. 地震断層の摩擦：スケールをつなぐ

波多野恭弘(阪大)

I12. マルチスケール論的視点に基づくトライボロジー現象の理解

平山朋子(京大)

13:00-14:20【セッション6】

座長：嶋田隆広(京大)

I13. 全原子分子動力学計算による高分子の力学強度の分子論

藤本和士(名大)

I14. タンパク質結晶の転位の運動と塑性変形

鈴木凌(横浜市大)

14:40-16:00【セッション7】

座長：下川智嗣(金沢大)

I15. 二層材料の表面不安定現象に立脚したナノ・マイクロシステムのボトムアップ創成

永島壮(名大)

I16. ナノ・マイクロ疲労メカニズム解明のためのマルチスケールモデリング

梅野宜崇(東大生研)

16:00-16:05【開会のあいさつ】