

## 科学研究費補助金研究成果報告書

平成24年5月29日現在

機関番号：14301

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19053005

研究課題名（和文） 第一原理熱力学に基づいた機能元素の材料設計

研究課題名（英文） Atomic scale modification from first-principles thermodynamics

研究代表者

田中 功 (TANAKA ISA0)

京都大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：70183861

研究成果の概要（和文）：先端材料が持つ特異な機能の多くは、材料に内在する機能元素が起源となっている。本研究では、最先端の第一原理熱力学計算法を駆使し、現実の材料系における機能元素の局所環境や電子構造を、与えられた温度、圧力、化学ポテンシャルの下で高精度に計算し設計する技術の開発を行った。この手法を種々の材料系に適用することにより機能元素の本質を体系化し、材料開発における汎用的な学理・設計基盤として提案した。

研究成果の概要（英文）：Functional elements play a determinantal role in the superb properties of advanced materials. In this study we developed a computational approach based on the state-of-the-art first-principles thermodynamics, which allows us to accurately determine and design the local environments and electronic structure of functional elements in materials under given temperature, pressure, and chemical potentials. Through the applications of this approach to a wide variety of materials, we systematized the nature of functional elements and established a new concept in materials developments.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	20,400,000	0	20,400,000
2008年度	34,300,000	0	34,300,000
2009年度	21,300,000	0	21,300,000
2010年度	31,300,000	0	31,300,000
2011年度	14,700,000	0	14,700,000
総計	122,000,000	0	122,000,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：材料工学・金属物性

キーワード：機能元素、第一原理計算、統計熱力学、表面、界面、状態図

## 1. 研究開始当初の背景

昨今、先端材料に対する要求が多様化しており、これに応えるための材料学と設計基盤の再構築が急務となっている。その一つの鍵は、材料の素機能を決定する機能元素の理論設計基盤を確立することにある。そのためには、機能元素が自然の摂理すなわち熱力学

の法則に従って存在するという事実を念頭に置き、その挙動を温度、圧力などの効果を取り入れたうえで精確に理論予測し、これを実験支援のもとで体系的な機能設計基盤へと発展させることが重要である。この熱力学に基づいた予測・設計技術は個別の材料だけを対象とするのではなく、汎用的な材料開発技

術となり得る。従来からの熱力学計算は実験結果から演繹されたものであるため、表面や界面における特殊環境での機能元素のように実験結果が未知である場合に適用することはできない。この壁を打開することは、わが国における計算材料学の発展を促し、高い国際的競争力を維持するために不可欠である。

## 2. 研究の目的

先端材料が持つ特異な機能の多くは、材料に内在する機能元素が起源となっている。よって機能元素を如何に巧みに制御するかが新材料開発のポイントであり、そのための材料設計技術の確立が望まれる。本研究では、最先端の第一原理熱力学計算法を駆使し、現実の材料系における機能元素の局所環境や電子構造を、与えられた温度、圧力、化学ポテンシャルの下で高精度に計算し設計する技術の開発を目指す。

第一原理熱力学計算法とは、第一原理に基づいてエンタルピーやエントロピーを算出し、自由エネルギーの温度依存性を求めるものである。このシナリオを実現するためには、効率的かつ高速なアルゴリズムを確立するとともに、検証実験からのフィードバックを確実に取り入れることにより計算技法やモデルを洗練することが不可欠となる。本研究では、計算と実験の緊密な連携のもとで、表面、界面などの格子不整合領域の機能元素について高精度な理論予測を行うための第一原理熱力学計算手法を確立する。また、この手法を種々の材料系に適用することにより機能元素の本質を体系化し、材料開発における汎用的な学理・設計基盤として提案する。

## 3. 研究の方法

最先端の第一原理熱力学計算法を駆使し、計算結果を逐次検証し、必要に応じて実験結果から理論計算にフィードバックをかけることにより、現実の材料系における機能元素の局所環境や電子構造を高精度に計算し設計することを可能とする技術の開発を行い、種々の材料系に適用した。

## 4. 研究成果

ドーパント、表面、界面を対象に第一原理熱力学計算手法を開発し、格子不整合領域における機能元素の熱力学計算へ展開するための基盤技術を構築した。これにより様々な環境の機能元素の分布プロファイルや局所原子・電子構造を温度および圧力の関数として決定し、機能元素に由来した静的物性の理論予測を行った。

また、第一原理分子動力学法により、原子レベルでの高精度な動的シミュレーションを行う手法を確立し、これを様々な材料系へ

応用した。これと同時に、高分解能X線回折、X線吸収分光実験、電子エネルギー損失分光実験等により標準試料中の機能元素の局所原子・電子構造や分布を計測した。また、理論計算から得られた機能元素の局所構造や状態図などと比較し、その結果を計算に逐次フィードバックすることで、理論予測の精度を高めた。

具体的な成果としては、酸化物表面上の機能元素の拡散挙動の解明、酸化物結晶粒界における酸素空孔・機能元素の分布プロファイルの決定、スピネル酸化物の相転移挙動の予測、化合物半導体の状態図計算や半導体合金のバンドギャップの組成および温度依存性の予測、酸化物イオン伝導体の結晶構造やイオン伝導メカニズムの予測、チタン酸ストロンチウムの特異な電気・光学特性の起源となりうる新たな欠陥種の提案、ユーロビウム複合酸化物における欠陥電子状態および磁性の起源の解明などが挙げられる。また、本研究により確立された第一原理熱力学計算手法を白金合金触媒材料に適用し、表面への白金偏析挙動を予測することに成功した。さらに、酸化チタン-金ナノ粒子系触媒を対象として、その界面原子構造の計算を行い、超高分解能走査型透過電子顕微鏡観察と連携することで、界面構造が金ナノ粒子のサイズに大きく依存することを明らかにした。

以上のように、機能元素、表面、界面およびこれらの組み合わせによる複雑構造について、信頼性の高い理論予測技術を確立した。また、得られた成果の総括により機能元素の本質を体系化し、材料開発における汎用的な学理・設計基盤として提案した。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 87 件)

1. Y. Kumagai, Y. Soda, F. Oba, A. Seko, and I. Tanaka, "First-principles calculations of the phase diagrams and band gaps in  $\text{CuInSe}_2$ - $\text{CuGaSe}_2$  and  $\text{CuInSe}_2$ - $\text{CuAlSe}_2$  pseudobinary systems", *PHYS. REV. B* 85, 033203 (2012). [査読有]
2. Y. Kumagai, A. Seko, F. Oba, and I. Tanaka, "Ground-state search in multicomponent magnetic systems", *PHYS. REV. B* 85, 012401 (2012). [査読有]
3. A. Seko and I. Tanaka, "Grouping of structures for cluster expansion of multicomponent systems with controlled accuracy", *PHYS. REV. B* 83, 224111-1-4 (2011). [査読有]
4. A. Matsumoto, Y. Koyama, A. Togo, M. Choi, and I. Tanaka. "Electronic structures

- of dynamically stable  $\text{As}_2\text{O}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{O}_3$ , and  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  crystal polymorphs”, *PHYS. REV. B* 83, 214110-1-10 (2011). [査読有]
5. L. Chaput, A. Togo, I. Tanaka, and G. Hug, “Phonon-phonon interactions in transition metals”. *PHYS. REV. B* 84, 094302-1-6 (2011). [査読有]
  6. H. Ikeno, T. Mizoguchi, and I. Tanaka, “*Ab initio* charge transfer multiplet calculations on the  $L_{2,3}$  XANES and ELNES of 3d transition metal oxides”, *PHYS. REV. B* 83 [15], 155107 (2011). [査読有]
  7. M. Choi, F. Oba, and I. Tanaka, “Electronic and structural properties of the oxygen vacancy in  $\text{BaTiO}_3$ ”, *APPL. PHYS. LETT.* 98 [17], 172901 (2011). [査読有]
  8. H. Hayashi, R. Huang, F. Oba, T. Hirayama, and I. Tanaka, “Atomistic structure and energetics of interface between Mn-doped  $\gamma\text{-Ga}_2\text{O}_3$  and  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ”, *J. MATER. SCI.*, 46 [12], 4169 (2011). [査読有]
  9. M. Yoshiya, T. Oyama, “Impurity and Vacancy Segregation at Symmetric Tilt Grain Boundaries in  $\text{Y}_2\text{O}_3$ -doped  $\text{ZrO}_2$ ”, *J. MATER. SCI.* 46 [12], 4176 (2011). [査読有]
  10. H. Hayashi, R. Huang, F. Oba, T. Hirayama, and I. Tanaka, “Epitaxial growth of Mn-doped  $\gamma\text{-Ga}_2\text{O}_3$  on spinel substrate”, *J. MATER. RES.* 26 [4], 578 (2011). [査読有]
  11. H. Akamatsu, Y. Kumagai, F. Oba, K. Fujita, H. Murakami, K. Tanaka, and I. Tanaka, “Antiferromagnetic superexchange via 3d states of titanium in  $\text{EuTiO}_3$  as seen from hybrid Hartree-Fock density functional calculations”, *PHYS. REV. B* 83, 214421-1-6 (2011). [査読有]
  12. M. Choi, F. Oba, and I. Tanaka, “Hybrid density functional study of oxygen vacancies in  $\text{KTaO}_3$  and  $\text{NaTaO}_3$ ”, *PHYS. REV. B* 83, 214107-1-6 (2011). [査読有]
  13. Y. Mizukami, H. Shishido, T. Shibauchi, M. Shimozawa, S. Yasumoto, D. Watanabe, M. Yamashita, H. Ikeda, T. Terashima, H. Kontani, Y. Matsuda, “Extremely strong-coupling superconductivity in artificial two-dimensional Kondo lattices” *NATURE PHYSICS* 7, 849-853 (2011). [査読有]
  14. S. Kasahara, T. Shibauchi, K. Hashimoto, Y. Nakai, H. Ikeda, T. Terashima, Y. Matsuda, “Abrupt recovery of Fermi-liquid transport following the collapse of the  $c$  axis in  $\text{CaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$  single crystals” *PHYS. REV. B* 83, 060505(R)-1-060505(R)-4 (2011). [査読有]
  15. A. Yurtsever, Y. Sugimoto, M. Abe, K. Matsunaga, I. Tanaka, S. Morita, “Alkali-metal adsorption and manipulation on hydroxylated  $\text{TiO}_2(110)$  surface using atomic force microscopy”, *PHYS. REV. B* 84, 085413/1-7 (2011). [査読有]
  16. T. Mizoguchi, K. Matsunaga, E. Tochigi, Y. Ikuhara, “First principle pseudopotential calculation of electron energy loss near edge structure of lattice imperfections” *MICRON* 43, 37-42 (2011). [査読有]
  17. T. Nakagawa, H. Nishimura, I. Sakaguchi, N. Shibata, K. Matsunaga, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, “Grain boundary character dependence of oxygen grain boundary diffusion in  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  bicrystals” *SCRIPTA MATER.* 65, 544-547 (2011). [査読有]
  18. C.M. Gourlay, K. Nogita, A.K. Dahle, Y. Yamamoto, K. Uesugi, T. Nagira, M. Yoshiya and H. Yasuda, “In situ investigation of unidirectional solidification in  $\text{Sn-0.7Cu}$  and  $\text{Sn-0.7Cu-0.06Ni}$ ”, *ACTA MATER.* 59, 4043-4054 (2011). [査読有]
  19. T. Nagira, C.M. Gourlay, A. Sugiyama, M. Uesugi, Y. Kanzawa, M. Yoshiya, K. Uesugi, K. Umetani and H. Yasuda, “Direct observation of deformation in semi-solid carbon steel”, *SCRIPTA MATER.* 64, 1129-1132 (2011). [査読有]
  20. H. Yasuda, T. Nagira, M. Yoshiya, N. Nakatsuka, A. Sugiyama, K. Uesugi and K. Umetani, “Development of X-ray Imaging for Observing Solidification of Carbon Steels”, *ISI INTERNATIONAL* 51, 402-408 (2011). [査読有]
  21. Y. Koizumi, M. Yoshiya, A. Sugihara and Y. Minamino, “Effect of impurity atoms on  $\alpha_2/\gamma$  lamellar interfacial misfit in Ti-Al alloy: a systematic first principles study”, *PHIL. MAG.* 91, 3685-3704 (2011). [査読有]
  22. I. Tanaka, A. Togo, A. Seko, F. Oba, Y. Koyama, and A. Kuwabara, “Thermodynamics and structures of oxide crystals by a systematic set of first principles calculations”, *J. MATER. CHEM.*, 20 [46], 10335 (2010). [査読有]
  23. I. Tanaka, A. Seko, A. Togo, Y. Koyama, and F. Oba, “Phase relationships and structures of inorganic crystals by combination of cluster expansion method and first principles calculations”, *J. PHYS.: CONDENS. MATTER*, 22 [38], 384207 (2010). [査読有]
  24. A. Togo, L. Chaput, I. Tanaka, and G. Hug, “First-principles phonon calculations of thermal expansion in  $\text{Ti}_3\text{SiC}_2$ ,  $\text{Ti}_3\text{AlC}_2$ , and  $\text{Ti}_3\text{GeC}_2$ ”, *PHYS. REV. B* 81 [17], 174301 (2010). [査読有]

25. A. Matsumoto, Y. Koyama, and I. Tanaka, "Structures and energetics of  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  polymorphs in a defective fluorite family derived by systematic first-principles lattice dynamics calculations", *PHYS. REV. B* 81 [9], 094117 (2010). [査読有]
26. T. Suzuki, M. Mori, K. Matsunaga and I. Tanaka, "Pourbaix diagrams of alkaline earth metal elements by combination of first principles calculations and thermochemical data", *J. PHYS.: CONDENS. MATTER.* 22 [38], 384206 (2010). [査読有]
27. F. Oba, M. Choi, A. Togo, A. Seko, and I. Tanaka, "Native defects in oxide semiconductors: A density functional approach", *J. PHYS.: CONDENS. MATTER.* 22 [38], 384211 (2010). [査読有]
28. K. Toyoura, Y. Koyama, A. Kuwabara and I. Tanaka, "Effects of off-Stoichiometry of  $\text{LiC}_6$  on the lithium diffusion mechanism and diffusivity by first principles calculations", *J. PHYS. CHEM. C*, 114 [5], 2375 (2010). [査読有]
29. N. Ueshima, M. Yoshiya, and H. Yasuda, "Numerical Analyses of Effectiveness of Magnetic Field on Variant Selection in FePd by Phase Field Modeling", *ISIJ Int.*, 50 [12], 1908 (2010). [査読有]
30. K. Matsunaga, H. Murata, and K. Shitara, "Theoretical calculations of thermodynamic stability of ionic substitutions in hydroxyapatite under aqueous solution environment", *J. PHYS.: CONDENS. MATTER.* 22 [38], 384210 (2010). [査読有]
31. H. Murata, K. Shitara, I. Tanaka, A. Nakahira, T. Mizoguchi, and K. Matsunaga, "First-principles calculations of Zn-K XANES in Ca-deficient hydroxyapatite", *J. PHYS.: CONDENS. MATTER.* 22 [38], 384213 (2010). [査読有]
32. K. Matsunaga, H. Murata, T. Mizoguchi, and A. Nakahira, "Mechanism of incorporation of zinc in hydroxyapatite", *ACTA BIOMATER.* 6 [6], 2289 (2010). [査読有]
33. S. Kasahara, T. Shibauchi, K. Hashimoto, K. Ikada, S. Tonegawa, H. Ikeda, H. Takeya, K. Hirata, T. Terashima, and Y. Matsuda, "Evolution from non-Fermi- to Fermi-liquid transport via isovalent doping in  $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$  superconductors", *PHYS. REV. B* 81 [18], 184519 (2010). [査読有]
34. S. Iikubo, H. Ohtani, and M. Hasebe, "First-principles calculation of the specific heats of cubic carbides and nitrides", *MATER. TRANS.*, 51 [3], 574 (2010). [査読有]
35. M. Tojo, T. Tokunaga, H. Ohtani, and M. Hasebe, "Thermodynamic analysis of phase equilibria in the Cr-Mo-B ternary system", *CALPHAD*, 34 [3], 263 (2010). [査読有]
36. F. Oba, A. Togo, I. Tanaka, K. Watanabe, and T. Taniguchi, "Doping of hexagonal boron nitride via intercalation: A theoretical prediction", *PHYS. REV. B* 81 [7], 075125 (2010). [査読有]
37. K. Nakamura, T. Mizoguchi, N. Shibata, K. Matsunaga, T. Yamamoto, and Y. Ikuhara, "First-principles sliding simulation of Al-terminated  $\Sigma 13$  pyramidal twin grain boundary in  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ", *PHILO. MAG. LETT.* 90 [3], 159 (2010). [査読有]
38. K. Matsunaga, "Theoretical defect energetics in calcium phosphate bioceramics", *J. AM. CERAM. SOC.*, 93 [1], 1 (2010). [査読有]
39. K. Nakamura, T. Mizoguchi, N. Shibata, K. Matsunaga, T. Yamamoto, Y. Ikuhara, "First-principles simulation of Al-terminated  $\Sigma 13$  pyramidal twin grain boundary in  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ " *PHILO. MAG. LETT.* 90, 159-172 (2010). [査読有]
40. N. Shibata, A. Goto, K. Matsunaga, T. Mizoguchi, T. Yamamoto, and Y. Ikuhara, "Interface structures of gold nanoparticles on  $\text{TiO}_2$  (110)", *PHYS. REV. LETT.* 102 [13], 136105 (2009). [査読有]
41. M. Choi, K. Matsunaga, F. Oba, and I. Tanaka, " $^{27}\text{Al}$  NMR chemical shifts in oxide crystals: A first-principles study", *J. PHYS. CHEM. C*, 113 [9], 3869 (2009). [査読有]
42. M. Choi, F. Oba, and I. Tanaka, "Role of Ti antisite-like defects in  $\text{SrTiO}_3$ ", *PHYS. REV. LETT.* 103 [18], 185502 (2009). [査読有]
43. Y. Kumagai, F. Oba, I. Yamada, M. Azuma, and I. Tanaka, "First-principles study of defect-induced potentials in  $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ ", *PHYS. REV. B* 80 [8], 085120 (2009). [査読有]
44. I. Kishida, F. Oba, Y. Koyama, A. Kuwabara, and I. Tanaka, "Variable anisotropy of ionic conduction in lithium nitride: Effect of duplex-charge transfer", *PHYS. REV. B* 80 [2], 024116 (2009). [査読有]
45. K. Matsunaga, and H. Murata: "Sr substitution in bioactive calcium phosphates: A first-principles study", *J. PHYS. CHEM. B*, 113 [11], 3584 (2009). [査読有]
46. K. Matsunaga, and H. Murata: "Formation energies of substitutional sodium and potassium in hydroxyapatite", *MATER. TRANS.*, 50 [5], 1041 (2009). [査読有]
47. W. Olovsson, I. Tanaka, T. Mizoguchi, P. Puschnig and C. Ambrosch-Draxl, "All-electron Bethe-Salpeter calculations for shallow-core x-ray absorption near-edge

- structures”, *PHYS. REV. B* 79 [4], 041102(R) (2009). [査読有]
48. K. Hashimoto, T. Shibauchi, S. Kasahara, K. Ikada, S. Tonegawa, T. Kato, R. Okazaki, C. J. V.D. Beek, M. Konczykowski, H. Takeya, K. Hirata, T. Terashima and Y. Matsuda, “Microwave Surface-Impedance Measurements of the Magnetic Penetration Depth in Single Crystal  $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$  Superconductors: Evidence for a Disorder-Dependent Superfluid Density”, *PHYS. REV. LETT.* 102 [20], 207001 (2009). [査読有]
  49. T. Tohei, H. Moriwake, H. Murata, A. Kuwabara, R. Hashimoto, T. Yamamoto and I. Tanaka, “Geometric ferroelectricity in rare-earth compounds  $RGaO_3$  and  $RInO_3$ ”, *PHYS. REV. B* 79 [14], 144125 (2009). [査読有]
  50. M. Mori, Y. Kumagai, K. Matsunaga and I. Tanaka, “First-principles investigation of atomic structures and stability of proton-exchanged layered sodium titanate”, *PHYS. REV. B* 79 [14], 144117 (2009). [査読有]
  51. S. Sun, X. Ke, C. Chen and I. Tanaka, “First-principles prediction of low-energy structures for  $AlH_3$ ”, *PHYS. REV. B* 79 [2], 024104 (2009). [査読有]
  52. A. Seko, A. Togo, F. Oba and I. Tanaka, “Structure and stability of a homologous series of tin oxides”, *PHYS. REV. LETT.* 100 [4], 045702 (2008). [査読有]
  53. Y. Kumagai, H. Ikeno, F. Oba, K. Matsunaga and I. Tanaka, “Effects of crystal structure on Co-  $L_{2,3}$  x-ray absorption near-edge structure and electron-energy-loss near-edge structure of trivalent cobalt oxides”, *PHYS. REV. B* 77 [15], 155124 (2008). [査読有]
  54. H. Ikeno and I. Tanaka, “Effects of Breit interaction on the  $L_{2,3}$  x-ray absorption near-edge structures of 3d transition metals”, *PHYS. REV. B* 77 [7], 075127 (2008). [査読有]
  55. K. Matsunaga, “Theoretical investigation of the defect formation mechanism relevant to nonstoichiometry in hydroxyapatite”, *PHYS. REV. B* 77 [10], 104106 (2008). [査読有]
  56. K. Yuge, A. Seko, Y. Koyama, F. Oba and I. Tanaka, “First-principles-based phase diagram of the cubic BNC ternary system”, *PHYS. REV. B* 77 [9], 094121 (2008). [査読有]
  57. A. Togo, F. Oba and I. Tanaka, “Transition pathway of  $CO_2$  crystals under high pressures”, *PHYS. REV. B* 77 [18], 184101 (2008). [査読有]
  58. A. Kuwabara, K. Matsunaga and I. Tanaka, “Lattice dynamics and thermodynamical properties of silicon nitride polymorphs”, *PHYS. REV. B* 78 [6], 064104 (2008). [査読有]
  59. M. Choi, F. Oba and I. Tanaka, “First-principles study of native defects and lanthanum impurities in  $NaTaO_3$ ”, *PHYS. REV. B* 78 [1], 014115 (2008). [査読有]
  60. F. Oba, A. Togo, I. Tanaka, J. Paier and G. Kresse, “Defect energetics in ZnO: A hybrid Hartree-Fock density functional study”, *PHYS. REV. B* 77 [24], 245202 (2008). [査読有]
  61. A. Togo, F. Oba and I. Tanaka, “First-principles calculations of the ferroelastic transition between rutile-type and  $CaCl_2$ -type  $SiO_2$  at high pressures”, *PHYS. REV. B* 78 [13], 134106 (2008). [査読有]
  62. K. Matsunaga, “First-principles study of substitutional magnesium and zinc in hydroxyapatite and octacalcium phosphate”, *J. CHEM. PHYS.* 128 [24], 245101 (2008). [査読有]
  63. K. Matsunaga, H. Inamori and H. Murata, “Theoretical trend of ion exchange ability with divalent cations in hydroxyapatite”, *PHYS. REV. B* 78 [9], 094101 (2008). [査読有]
  64. K. Toyoura, Y. Koyama, A. Kuwabara, F. Oba and I. Tanaka, “First-principles approach to chemical diffusion of lithium atoms in a graphite intercalation compound”, *PHYS. REV. B* 78 [21], 214303 (2008). [査読有]
  65. H. Yamaoka, H. Oohashi, I. Jarrige, T. Terashima, Y. Zou, H. Mizota, S. Sakakura, T. Tochio, Y. Ito, E. Y. Sherman and A. Kotani, “X-ray spectroscopic study of the electronic structure of  $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_7$ ”, *PHYS. REV. B* 77 [4], 045135 (2008). [査読有]
  66. T. Mizoguchi, A. Seko, M. Yoshiya, H. Yoshida, T. Yoshida, W. Y. Ching and I. Tanaka, “X-ray absorption near-edge structures of disordered  $Mg_{1-x}Zn_xO$  solid solutions”, *PHYS. REV. B* 76 [19], 195125 (2007). [査読有]
- [学会発表] (計 52 件)
1. I. Tanaka, “LCAO, Z+1 approximation, overlap population”, Workshop on X-ray Spectroscopies: theory and experiment, Jan. 2008, Lausanne, Switzerland
  2. 田中功, 「第一原理熱力学に基づいた機能元素の材料設計」, 日本金属学会 2008 年

- 春期大会, 2008年3月, 東京都
3. I. Tanaka, "Phase relationships and structures of inorganic crystals by combination of cluster expansion method and first principles, The 3<sup>rd</sup> Theory Meets Industry Int'l Workshop, Nov. 2009, Nagoya
  4. 田中功, 小山幸典, 豊浦和明, 大場史康, 岸田逸平, 「第一原理計算に基づいたリチウム電池材料研究」, 日本金属学会 2010年春期大会, 2010年3月, つくば市
  5. I. Tanaka, A. Seko, A. Togo and F. Oba, "Statistical thermodynamics of oxides by combination of cluster expansion method and first principles calculations", The 2<sup>nd</sup> Int'l Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations, Jun. 2010, Nagoya
  6. I. Tanaka, "Cation disordering in spinel compounds by a large set of first principles calculations", 5<sup>th</sup> Int'l Workshop Spinel Nitrides and Related Materials, Sep. 2010, Rudesheim, Germany
  7. I. Tanaka, A. Seko, A. Togo and F. Oba, "Thermodynamics and structures of oxide crystals by a systematic large set of first principles calculations", The 13<sup>th</sup> Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Nov. 2010, Pohang, Korea
  8. I. Tanaka, A. Seko, A. Togo and F. Oba, "Phase relationships and structures of oxide crystals based on first principles calculations", 3<sup>rd</sup> Int'l Congress on Ceramics, Nov. 2010, Osaka
  9. I. Tanaka, "Superionic Transition of Bismuth Oxide by Systematic Density Functional Theory Calculations", 4<sup>th</sup> CMRS Symposium on Multiscale Materials Modeling (MMM2011), Jul. 2011, Shanghai, China
  10. I. Tanaka, "Current Progress in First Principles Calculations of ELNES", TEM Workshop "Electron Microscopy; Exploring Materials on the Atomic Scale", Oct. 2011, Darmstadt, Germany

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

該当なし

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

田中 功 (TANAKA ISAO)

京都大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 70183861

### (2) 研究分担者

寺嶋 孝仁 (TERASHIMA TAKAHITO)  
京都大学・低温物質科学研究センター・教授  
研究者番号: 40252506  
大谷 博司 (OHTANI HIROSHI)  
九州工業大学・大学院工学研究院・教授  
研究者番号: 70176923  
松永 克志 (MATSUNAGA KATSUYUKI)  
名古屋大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号: 20334310  
吉矢 真人 (YOSHIYA MASATO)  
大阪大学・大学院工学研究科・准教授  
研究者番号: 00399601

### (3) 連携研究者

なし