

令和 5 年 5 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K15034

研究課題名（和文）粒界原子構造に基づく熱伝導度の直接予測

研究課題名（英文）Predicting Grain Boundary Thermal Conductivities from Local Atomic Environments

研究代表者

藤井 進 (Fujii, Susumu)

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：90826033

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：無機材料の多くは多結晶体であり、結晶粒間に形成される粒界は材料特性に多大な影響を与える。そこで本研究では粒界原子構造と熱伝導度の因果関係の解明を目指した。系統的な粒界計算により、イオン結合性のMgOやSrTiO<sub>3</sub>では粒界近傍の空隙が、共有結合性Siでは結合角の乱れが熱伝導の支配因子と判明した。また、機械学習を用いて、MgO粒界構造から高精度に熱伝導度を予測するモデルを構築した。その結果、わずかな構造歪みが著しく熱伝導度を低下させることが判明し、熱電変換材料や遮熱コーティングの性能向上に寄与する材料設計指針が得られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

粒界は材料中に普遍的に存在し、様々な材料特性に影響を与える。例えば、粒界は熱伝導度を低下させる作用を持つ。熱伝導度は遮熱性が必要な熱電変換材料（熱を直接電気に変換可能な材料）やタービンエンジン等の遮熱コーティング、放熱性が必要なPC等の電子デバイスなど、熱に関連する機能性材料において極めて重要である。本研究では、材料中の粒界がどのように熱伝導に影響を与えるかを、計算科学と機械学習により初めて定量的に解明した。この知見を活かせば、将来的により高性能な熱機能性材料の作製が可能となる。

研究成果の概要（英文）：Grain boundaries (GBs), that are ubiquitously formed between crystal grains of inorganic compounds, have a decisive effect on a variety of material properties. Here, we aimed to reveal the relationship between GB atomic structure and thermal conductivity and its underlying mechanisms. Systematic GB calculations showed that the dominant factor in GB thermal conductivity is the excess volume near the GBs in ionic MgO and SrTiO<sub>3</sub>, and the variance in bond angles in covalent Si. Using machine learning to the obtained computational data, a model was constructed to accurately predict GB thermal conductivity from the MgO GB structure. As a result, it was found that a small structural distortion effectively reduces GB thermal conductivity. This is a material design guideline to improve the performance of thermoelectric materials and thermal barrier coatings.

研究分野：無機材料科学

キーワード：無機材料 セラミックス 結晶粒界 熱伝導 フォノン 熱電変換材料 計算科学 機械学習

### 1. 研究開始当初の背景

無機材料（広義のセラミックス）の多くは、ガラスを除いて多結晶体である。多結晶体を構成する結晶粒の間の数 nm の領域には、結晶粒界（以下、単に粒界と呼ぶ）が存在する。粒界は結晶粒内部の規則的な結晶構造とは異なる電子・原子配列を持ち、それゆえに結晶粒とは異なる性質を示す。この粒界が材料の巨視的な性質を決定づけることも多い。例えば、結晶粒径を 4 nm まで小さくしたナノ多結晶シリコンでは、極めて高い粒界密度に起因して、単結晶シリコンの 1%以下の熱伝導度を示す[1]。このようなナノ多結晶化技術は、遮熱性が重要となる熱電変換材料や遮熱コーティングの開発において、大いに活用されている。

粒界の原子構造は、隣接する結晶粒の方位差等に依存して様々に変化し、示す性質も多様に変化する。ゆえに、粒界構造と材料特性の相関が解明できれば、単なる粒界密度のみならず、粒界構造（材料組織）に基づく精緻な材料特性制御が可能となる。しかしながら、粒界の原子構造と材料特性を直接的に結びつけた研究例は限られており、粒界構造-材料特性相関はほとんど解明されていない。

### 2. 研究の目的

粒界の原子配列と熱伝導度の相関及びその支配因子を解明する。対象材料はイオン結合性の高い MgO、ZrO<sub>2</sub>（遮熱コーティング）、SrTiO<sub>3</sub>（熱電変換材料）、共有結合性の高い Si（電子デバイス、熱電変換材料）といった典型的セラミックスとする。これらのモデル材料の解析結果を元に、粒界構造に基づく熱伝導設計指針を提案する。

### 3. 研究の方法

計算科学と機械学習という2つの手法を組み合わせ、研究目的の達成を試みた。まず、格子静力学計算を用いて、結晶粒の方位差を様々に変化させながら、エネルギー的に安定な粒界構造を系統的に求めた。その後、分子動力学法と呼ばれる、フェムト秒スケール（10<sup>-15</sup>秒）の原子の振動状態を模擬する計算を実施し、原子振動によって伝わる熱伝導度（格子熱伝導度）を各粒界構造について算出した[2]。各モデル材料について、数十から百種類程度の粒界の計算を実施し、粒界構造と熱伝導度の関係を一般的かつ統計的に議論するに十分なデータを得た。

最も多くのデータを獲得した MgO については、機械学習を利用することで、粒界構造を入力に、その熱伝導度を予測可能なモデルの構築を行った。SOAP[3]と呼ばれる構造記述子を用いて、粒界を構成する原子の配位環境を数値化した。得られた数値を元に、階層的クラスタリングにより粒界構造をいくつかの配位環境グループに分類した。配位環境グループの比率で各粒界構造を表し、それを入力とした線形重回帰により、熱伝導度を予測するモデルを作成した。

### 4. 研究成果

#### (1) MgO 粒界の熱伝導度予測モデルの構築と熱伝導機構の理解

MgO は Mg と O が交互に並んだ NaCl 型構造を持つ典型的なイオン性材料である。この MgO に関して、百種類程度の粒界構造と熱伝導度 [2]を元に、熱伝導度を予測可能な機械学習モデルを構築した。計算によって求めた MgO 粒界の熱伝導度は 9~34 W/mK と構造によって幅広く変化した。今回構築したモデルはそれらを誤差 1.3 W/mK という高い精度で予測した。つまり、粒界構造と熱伝導度の相関を定量的に明らかにすることに成功した[4]。

構築したモデルは非常にシンプルであるため、単なる相関のみならず、粒界熱伝導機構を物理的に理解することも可能となった。今回のモデルでは、MgO 粒界を構成する配位環境をたった6つのグループに分類するだけで、高精度に熱伝導度を予測することが出来た（図1）。それら

は、構造の乱れが小さい順に、単結晶と類似（歪みなし）、結合歪み小・中・大、結合欠損中・大、といった特徴を持つ配位環境である。これらのうち、熱伝導度に大きく寄与するのは、予想通り歪みがほとんどない単結晶と類似した配位環境であった（図1右）。一方で、結合歪み小の配位環境でも、より歪みが顕著な他の配位環境と同程度に、熱伝導度が

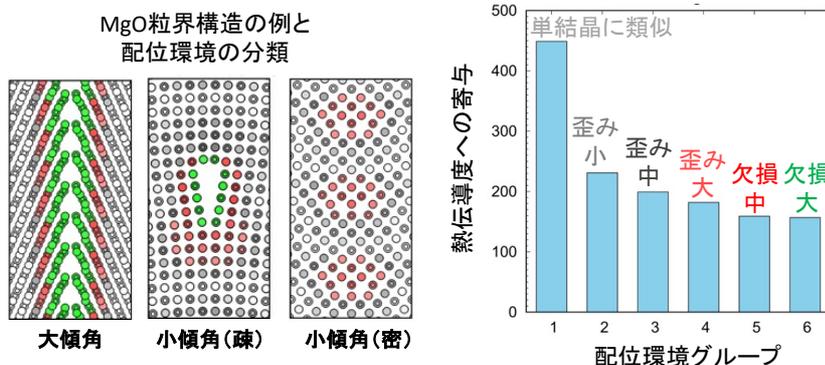


図1 (左) MgO 粒界構造の例と配位環境の分類結果。大、小の球がそれぞれ Mg, O を表す。球の色は右図の配位環境グループに対応している。  
(右) 各配位環境グループの粒界熱伝導度への寄与。少しの構造歪みが生じれば、熱伝導性は劇的に低下する。CC BY 4.0 により転載[4]。

低下することが判明した。この結果は、構造が乱れるほど熱伝導度が低下するという、従来の定性的理解を覆すものである。つまり、熱伝導度を低下させる際に、大きな構造歪みを導入する必要は必ずしもなく、小角ねじれ粒界のような、小さな結合歪みが粒界面上に広く分布する粒界を導入することで、効果的に熱伝導度を下げることが出来る。これは、粒界構造に基づく熱伝導設計指針そのものである。熱伝導度のような巨視的特性の定量的予測に成功したことは世界的に見ても稀有な研究成果であり、今後本アプローチを他の材料や材料特性にも展開していくことで、粒界に基づく複数特性の同時制御や機能性材料の性能向上に繋がると考えられる。

## (2) SrTiO<sub>3</sub> 粒界の熱伝導機構の解明

SrTiO<sub>3</sub> は MgO と同じくイオン結合性が高いが、三元系・ペロブスカイト型構造という異なる特徴を持つ。SrTiO<sub>3</sub> の構造は、TiO<sub>6</sub> 八面体が点共有したネットワークの隙間を、Sr<sup>2+</sup> が埋めることで成り立っている。この SrTiO<sub>3</sub> について 60 種類程度の粒界熱伝導度を求めたところ、過剰体積として評価される粒界構造の空隙が熱伝導度の支配因子であることが判明した。この傾向は、MgO と同様のものであった[2]。一方で、SrTiO<sub>3</sub> では粒界近傍で組成の不定比性が生じる。これにより、例えば Ti 過剰な粒界が形成された場合、強固な Ti-O 結合により熱伝導度の低減度合いが小さくなることが判明した。つまり、多結晶体の合成時に不定比性 (Ti 過剰、Sr 過剰) を緻密に制御すれば、熱伝導度も変化させられる可能性が示唆された。今後、得られたデータを元に SrTiO<sub>3</sub> でも構造に基づく粒界熱伝導度予測を行う予定である。

## (3) Si 粒界の熱伝導機構の解明

Si は MgO や SrTiO<sub>3</sub> と異なり共有結合性であり、4 配位の四面体が点共有したダイヤモンド構造を持つ。結合性や結晶構造の違いが粒界熱伝導に与える影響を調べるため、Si についても解析を行った。まず、粒界構造やその熱伝導度を高精度に同定・評価するため、原子間結合を正確に再現する機械学習ポテンシャルを粒界計算に適用した[5]。その結果、従来の経験的ポテンシャルでは再現不可能な安定な粒界構造を特定し、かつ熱伝導度も高精度に再現できることが分かった (図 2)。このポテンシャルを用いて、45 種類の粒界構造とその熱伝導度を求めた。その結果、Si においては、Si 同士の結合角の乱れが主要な熱伝導度の低減因子であることが判明した。加えて、特定の結晶粒の方位差において、低配位数のダイヤモンド構造に起因して巨大な空隙が形成され、これも熱伝導度を低下させる因子であった。これらの結果から、材料系や結合性によって、粒界熱伝導度を支配する要因が異なることが明示された。今後、熱伝導度のみならず電子的特性などでも粒界構造依存性を行い、粒界に基づく複数特性の最適化への指針獲得を目指す。

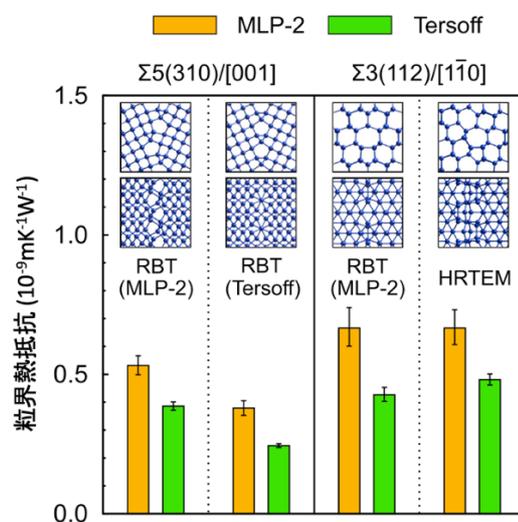


図 2 機械学習ポテンシャル (MLP-2) を用いた粒界構造探索と熱伝導評価。CC BY4.0 による転載[5]。

## (4) ZrO<sub>2</sub> の原子配位環境を再現可能なポテンシャルの構築

検討の結果、正方晶 ZrO<sub>2</sub> の粒界構造を再現可能な Zr-O 原子間力パラメータが存在しないことが判明した。そこで、ZrO<sub>2</sub> が形成する多様な結晶構造を再現可能な原子間力パラメータの作成から開始した。遺伝的アルゴリズムを用いたパラメータ最適化により、高精度第一原理計算の結晶構造と相対的なエネルギー差を概ね再現可能なポテンシャル構築に成功した。また、そのポテンシャルを用いれば、第一原理計算で導出される粒界構造が再現可能であることも判明した。その後、10 種類程度の粒界構造とその熱伝導度を求めるとともに、粒界を構成する原子配位環境を結晶構造への類似性を元に理解することに成功した。ドーパントの偏析構造も一部判明しており、正方晶 ZrO<sub>2</sub> 粒界構造-熱伝導度相関を解明するための計算科学的土台が整った。加えて、今後は機械特性なども並行して解析を行い、遮熱材としての性能向上指針の提案を目指す。

## (5) その他の成果

本研究の成果を実際の材料設計に繋げるため、粒界構造-熱伝導度相関のみならず、多結晶体組織が熱伝導に与える影響[6]、小傾角粒界等に形成される刃状転位の熱伝導[7]、実用的熱電変換材料である銅系硫化物の界面熱伝導[8]にまで研究範囲を広げ、顕著な成果を得た。

- (参考文献) [1] B. Jugdersuren *et al.*, *Commun. Phys.*, **4**, 169 (2021). [2] **S. Fujii** *et al.*, *Acta Mater.*, **171**, 154-162 (2019). [3] A. P. Bartók *et al.*, *Phys. Rev. B.*, **87**, 184115 (2013). [4] **S. Fujii** *et al.*, *Nature Commun.*, **11**, 1854 (2020). [5] **S. Fujii** and A. Seko, *Comput. Mater. Sci.*, **204**, 111137 (2022). [6] **S. Fujii** *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **119**, 231604 (2021). [7] W. Sekimoto, **S. Fujii**, M. Yoshiya, *Scr. Mater.*, **202**, 113991 (2021). [8] V. P. Kumar, **S. Fujii**, E. Guilmeau *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **134**, e202210600 (2022).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 4件）

|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>藤井進   | 4. 巻<br>58            |
| 2. 論文標題<br>ナノスケールでの粒界熱伝導度の予測モデル構築と物理的解釈   | 5. 発行年<br>2021年       |
| 3. 雑誌名<br>材料の科学と工学  | 6. 最初と最後の頁<br>216-219 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>なし   | 査読の有無<br>無            |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  | 国際共著<br>-             |
| 1. 著者名<br>Susumu Fujii, Atsuto Seko   | 4. 巻<br>204           |
| 2. 論文標題<br>Structure and lattice thermal conductivity of grain boundaries in silicon by using machine learning potential and molecular dynamics | 5. 発行年<br>2022年       |
| 3. 雑誌名<br>Computational Materials Science   | 6. 最初と最後の頁<br>-       |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1016/j.commat.2021.111137   | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスとしている（また、その予定である）   | 国際共著<br>-             |
| 1. 著者名<br>Susumu Fujii, Kohei Funai, Tatsuya Yokoi, Masato Yoshiya  | 4. 巻<br>119           |
| 2. 論文標題<br>Grain-size dependence and anisotropy of nanoscale thermal transport in MgO   | 5. 発行年<br>2021年       |
| 3. 雑誌名<br>Applied Physics Letters   | 6. 最初と最後の頁<br>-       |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1063/5.0075854  | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスとしている（また、その予定である）   | 国際共著<br>-             |
| 1. 著者名<br>Wataru Sekimoto, Susumu Fujii, Masato Yoshiya   | 4. 巻<br>202           |
| 2. 論文標題<br>Direct numerical analyses of nanoscale thermal transport near MgO edge dislocations  | 5. 発行年<br>2021年       |
| 3. 雑誌名<br>Scripta Materialia  | 6. 最初と最後の頁<br>-       |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1016/j.scriptamat.2021.113991   | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスとしている（また、その予定である）   | 国際共著<br>-             |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>藤井進                          | 4. 巻<br>55            |
| 2. 論文標題<br>粒界熱伝導度の系統的計算と予測モデルの確立       | 5. 発行年<br>2020年       |
| 3. 雑誌名<br>セラミックス                       | 6. 最初と最後の頁<br>652-655 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>無            |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著<br>-             |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>藤井進                          | 4. 巻<br>40          |
| 2. 論文標題<br>機械学習による結晶粒界の熱伝導度の高精度予測      | 5. 発行年<br>2020年     |
| 3. 雑誌名<br>機能材料                         | 6. 最初と最後の頁<br>14-22 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>無          |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著<br>-           |

|   |                 |
|---|-----------------|
| 1. 著者名<br>V. P. Kumar, S. Passuti, B. Zhang, S. Fujii, K. Yoshizawa, P. Boullay, S. L. Tonquesse, C. Prestipino, B. Raveau, P. Lemoine, A. Paecklar, N. Barrier, X. Zhou, M. Yoshiya, K. Suekuni, E. Guilmeau | 4. 巻<br>61      |
| 2. 論文標題<br>Engineering Transport Properties in Interconnected Enargite Stannite Type $Cu_{2+x}Mn_{1-x}GeS_4$ Nanocomposites   | 5. 発行年<br>2022年 |
| 3. 雑誌名<br>Angewandte Chemie International Edition   | 6. 最初と最後の頁<br>- |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1002/anie.202210600  | 査読の有無<br>有      |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスとしている (また、その予定である)  | 国際共著<br>該当する    |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>M. Yoshiya, A. Nakamura, S. Fujii, Y. Oshima, T. Yokoi, K. Matsunaga | 4. 巻<br>61              |
| 2. 論文標題<br>Frontiers of Novel Functionality at Dislocation Cores               | 5. 発行年<br>2022年         |
| 3. 雑誌名<br>Materia Japan  | 6. 最初と最後の頁<br>629 ~ 633 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.2320/materia.61.629                             | 査読の有無<br>無              |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難   | 国際共著<br>-               |

〔学会発表〕 計31件（うち招待講演 6件 / うち国際学会 7件）

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人                           |
| 2. 発表標題<br>摂動分子動力学法を用いたMgO転位近傍の原子配位がフォノン熱伝導に与える影響 |
| 3. 学会等名<br>第32回日本MRS年次大会                          |
| 4. 発表年<br>2022年                                   |

|                                     |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>堀川貴矢、藤井進、吉矢真人            |
| 2. 発表標題<br>GaNにおける転位による構造変化と熱伝導度の関係 |
| 3. 学会等名<br>第32回日本MRS年次大会            |
| 4. 発表年<br>2022年                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>島崎克彦、藤井進、吉矢真人                                 |
| 2. 発表標題<br>メトロポリスモンテカルロ法による正方晶ジルコニアの粒界近傍におけるイットリウム偏析機構解明 |
| 3. 学会等名<br>第32回日本MRS年次大会                                 |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>原知史、関本渉、藤井進、吉矢真人                             |
| 2. 発表標題<br>SrTiO <sub>3</sub> 中刃状転位近傍の低周波モードによる格子熱伝導度減少 |
| 3. 学会等名<br>第32回日本MRS年次大会                                |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人                        |
| 2. 発表標題<br>計算科学的アプローチによる転位芯構造による熱伝導度低減機構の微視的理解 |
| 3. 学会等名<br>第16回物性科学領域横断研究会 凝縮系科学の最前線           |
| 4. 発表年<br>2022年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>藤井進                             |
| 2. 発表標題<br>計算科学と機械学習による格子欠陥構造-機能相関解明と新材料探索 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2022年秋期講演大会（招待講演）         |
| 4. 発表年<br>2022年                            |

|                                 |
|---------------------------------|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人         |
| 2. 発表標題<br>転位コア近傍の非調和原子振動と格子熱伝導 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2022年秋期講演大会    |
| 4. 発表年<br>2022年                 |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人                |
| 2. 発表標題<br>MgO転位近傍における格子熱伝導のフォノンモード依存性 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム      |
| 4. 発表年<br>2022年                        |

|                                     |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>浦田空、藤井進、吉矢真人             |
| 2. 発表標題<br>SiとSiOxによる海面での熱伝導低下機構の解析 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム   |
| 4. 発表年<br>2022年                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>島崎克彦、藤井進、吉矢真人                       |
| 2. 発表標題<br>正方晶ジルコニアの材料特性の向上に向けた粒界近傍の局所的配位環境の特定 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム              |
| 4. 発表年<br>2022年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>S. Fujii   |
| 2. 発表標題<br>Mechanisms of interfacial thermal transport at nanoscale examined by atomistic simulations |
| 3. 学会等名<br>International Conference on Advanced Materials (IUMRS-ICAM2021) (招待講演) (国際学会)              |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>浦田空、藤井進、吉矢真人                     |
| 2. 発表標題<br>Si/SiOx界面におけるフォノン散乱挙動解析と熱伝導機構の理解 |
| 3. 学会等名<br>第19回日本熱電学会学術講演会                  |
| 4. 発表年<br>2022年                             |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>磯部裕貴、藤井進、吉矢真人                               |
| 2. 発表標題<br>SrTiO <sub>3</sub> 中の粒界近傍の微視的構造が熱伝導低減に及ぼす影響 |
| 3. 学会等名<br>第19回日本熱電学会学術講演会                             |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人              |
| 2. 発表標題<br>転位コア構造と結合歪みがフォノン熱伝導に与える影響 |
| 3. 学会等名<br>第19回日本熱電学会学術講演会           |
| 4. 発表年<br>2022年                      |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Susumu Fujii, Tatsuya Yokoi, Craig A. J. Fisher, Masato Yoshiya  |
| 2. 発表標題<br>Accurately predicting thermal conductivities across ceramic grain boundaries using a machine learning approach |
| 3. 学会等名<br>8th International Congress on Ceramics (ICC8) (招待講演) (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>藤井進、横井達矢、世古敦人、吉矢真人             |
| 2. 発表標題<br>セラミックス材料における粒界構造－熱伝導度相関解明の取り組み |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム (招待講演)  |
| 4. 発表年<br>2021年                           |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Susumu Fujii, Tatsuya Yokoi, Atsuto Seko, Masato Yoshiya   |
| 2. 発表標題<br>Correlation between grain boundary structure and thermal conductivity: a computational and machine learning approach |
| 3. 学会等名<br>14th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM14) and GOMD 2021 Division Meeting (招待講演) (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Susumu Fujii, Tatsuya Yokoi, Atsuto Seko, Masato Yoshiya   |
| 2. 発表標題<br>Nanoscale thermal transport at ceramic interfaces: a computational and machine learning approach |
| 3. 学会等名<br>1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (招待講演) (国際学会)                               |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>藤井進、横井達矢、吉矢真人               |
| 2. 発表標題<br>計算科学と情報科学による粒界原子構造—熱伝導関連の解明 |
| 3. 学会等名<br>第15回物性科学領域横断研究会 凝縮系科学の最前線   |
| 4. 発表年<br>2021年                        |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人                     |
| 2. 発表標題<br>原子レベル計算によるMgO中の転位芯構造が格子熱伝導に与える影響 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム           |
| 4. 発表年<br>2021年                             |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>関本渉、藤井進、吉矢真人                |
| 2. 発表標題<br>摂動分子動力学法による転位近傍のフォノン伝導メカニズム |
| 3. 学会等名<br>第31回日本MRS年次大会               |
| 4. 発表年<br>2021年                        |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Wataru SEKIMOTO, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA   |
| 2. 発表標題<br>Impact of dislocation-core structures on phonon thermal conduction in MgO by perturbed molecular dynamics |
| 3. 学会等名<br>1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>原知史、関本渉、藤井進、吉矢真人                                |
| 2. 発表標題<br>SrTiO <sub>3</sub> 中刃状転位近傍の結合歪みによる格子熱伝導度抑制機構の解明 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2021年秋期講演大会                               |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>浦田空、藤井進、吉矢真人                                 |
| 2. 発表標題<br>Si/SiO <sub>2</sub> 界面近傍の局所原子配列がフォノン特性へ及ぼす影響 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム                       |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>日野雄太、藤井進、吉矢真人、石部貴史、中村芳明       |
| 2. 発表標題<br>PbTe/GeS異相界面における界面構造とフォノン伝導解析 |
| 3. 学会等名<br>第18回日本熱電学会学術講演会               |
| 4. 発表年<br>2021年                          |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>日野雄太、藤井進、吉矢真人、石部貴史、中村芳明         |
| 2. 発表標題<br>第一原理格子動力学法によるカルコゲナイド異相界面での熱伝導解析 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム          |
| 4. 発表年<br>2021年                            |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Yuta HINO, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA, Takafumi ISHIBE, Yoshiaki NAKAMURA                        |
| 2. 発表標題<br>Phonon thermal transport across heterogeneous interfaces by ab initio lattice dynamics calculation |
| 3. 学会等名<br>1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>吉澤圭太、藤井進、吉矢真人                         |
| 2. 発表標題<br>Cu-Zn-Sn-S系におけるカチオン配列の不規則性が電子伝導に及ぼす影響 |
| 3. 学会等名<br>第18回日本熱電学会学術講演会                       |
| 4. 発表年<br>2021年                                  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Keita YOSHIKAWA, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA   |
| 2. 発表標題<br>Comparisons of electronic conduction between ordered and disordered phases in quasi-ternary Cu-Zn-Sn-S sulfides |
| 3. 学会等名<br>1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>藤井進、横井達矢、Craig A. J. Fisher、森分博紀、吉矢真人 |
| 2. 発表標題<br>低熱伝導性をもたらす粒界局所構造の解明 系統的計算と機械学習        |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会第167回講演大会                       |
| 4. 発表年<br>2020年                                  |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>藤井進、横井達矢、吉矢真人             |
| 2. 発表標題<br>酸化物ナノ界面近傍における局所的フォノン熱伝導解析 |
| 3. 学会等名<br>第17回日本熱電学会学術講演会           |
| 4. 発表年<br>2020年～2022年                |

〔図書〕 計1件

|  |                 |
|--|-----------------|
| 1. 著者名<br>藤井進  | 4. 発行年<br>2022年 |
| 2. 出版社<br>シーエムシー・リサーチ  | 5. 総ページ数<br>18  |
| 3. 書名<br>計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向(担当:第VIII編マテリアルズ・インフォマティクス 第1章 結晶粒界における格子熱伝導機構と情報科学的手法による予測・理解) |                 |

〔産業財産権〕

〔その他〕

研究代表者個人ページ

<http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/members/fujii/>

6. 研究組織

|  | 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号) | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号) | 備考 |
|--|---------------------------|-----------------------|----|
|--|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |  |  |
|---------|---------|--|--|
| フランス    | CRISMAT |  |  |