

<元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>>

◎物質・材料研究機構 元素戦略磁性材料研究拠点（ESICMM）

- P-01 First-Principles Simulation of Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B/Nd-Rich Phases  
平井大介（東京大学）
- P-02 高輝度軟 X 線による Nd-Fe-B 永久磁石の粒界磁性解明  
保井晃（JASRI）
- P-03 放射光高温 in-situ X 線回折による Nd-Fe-B 焼結磁石における副相物質の含有量の変化  
上野若菜（JASRI）
- P-04 Single Crystal Structure Analysis of a Single Sm<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>N<sub>3</sub> Particle  
井波暢人（KEK）
- P-05 希土類永久磁石 Sm<sub>2</sub>Fe<sub>17</sub>N<sub>3</sub> の磁気構造解析  
斉藤耕太郎（KEK）

◎京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点（ESICB）

- P-06 銀クラスター/θ - アルミナ(110)面の接合界面周縁部における H<sub>2</sub> 分子の共同的活性化に関する密度汎関数法による研究  
福田良一（分子科学研究所）
- P-07 二次電池正極材料の固体電子論  
小口多美夫（大阪大学）
- P-08 アークプラズマ法によって調製した高分散担持金属触媒の局所構造解析  
日隈聡士（熊本大学）
- P-09 京を用いた第一原理計算と連携した新規高安定電解液の開発  
山田裕貴（東京大学）
- P-10 電極表面におけるラマン散乱の超並列第一原理計算  
飯田健二（分子科学研究所）
- P-11 放射光 X 線による構造解析と中性子実験への展開  
西村真一（東京大学）
- P-12 Studies on Electrode Materials for Rechargeable Na Batteries by Synchrotron Radiation  
藪内直明（東京理科大学）
- P-13 XAFS によるパラジウム 1 原子を精密ドーブした担持金属クラスター触媒の構造解明とその触媒作用  
山添誠司（東京大学）

- P-14 Au/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> の水素化反応における Au 粒子サイズ効果  
大山順也 (名古屋大学)
- P-15 Additive Effect on Reductive Decomposition and Binding of Carbonate-Based Solvent toward Solid Electrolyte Interphase Formation in Lithium-Ion Battery  
館山佳尚 (物質・材料研究機構)

◎東工大 元素戦略拠点 (TIES)・元素戦略研究センター (MCES)

- P-16 元素戦略のための広エネルギー帯域軟 X 線ビームライン KEK-PF BL-2 の建設  
堀場弘司 (KEK)
- P-17 時間分解 XRD による圧電体のドメインダイナミックスの測定  
舟窪浩 (東京工業大学)
- P-18 HAX-PES による酸化物半導体の欠陥構造と界面電子構造解析  
神谷利夫 (東京工業大学)
- P-19 硬 X 線光電子分光を利用した電子材料の評価・解析  
大橋直樹 (物質・材料研究機構)
- P-20 鉄系超伝導体における新奇磁気相と結晶構造の相関  
山浦淳一 (KEK)
- P-21 極性材料を用いた材料探索と物性評価  
安井伸太郎 (東京工業大学)
- P-22 強相関酸化物 SrVO<sub>3</sub> 金属量子井戸状態における異常な有効質量増大の起源  
小林正起 (KEK)
- P-23 ミュオンと中性子で観る LaFeAsO<sub>1-x</sub>H<sub>x</sub> 高ドーピング域における反強磁性磁気秩序  
平賀晴弘 (KEK)
- P-24 ミュオンスピン緩和を用いた C12A7 中の水素状態測定  
小嶋健児 (KEK)
- P-25 常誘電体/強誘電体ナノ複合セラミックスにおける誘電特性向上機構の発現  
和田智志 (山梨大学)

◎京都大学 構造材料元素戦略研究拠点 (ESISM)

- P-26 SPring-8 を用いた超微細粒アルミニウムの引張変形時の転位密度その場測定  
足立大樹 (兵庫県立大学)
- P-27 SPring-8 産業利用ビームライン BL19B2 の小角 X 線散乱装置の紹介  
佐藤眞直 (JASRI)
- P-28 SPring-8 における Mg 基 LPSO 相の弾性的性質の研究  
田中克志 (神戸大学)
- P-29 引張試験中性子その場回折による超微細粒 HCP チタンの特異なすべり挙動の解析  
寺田大将 (京都大学)
- P-30 J-PARC 高強度・高分解能飛行時間型中性子回折法を用いて目指す構造材料研究

相澤一也 (J-PARC)

- P-31 構造用金属材料の微細組織の解明と設計：第一原理計算によるアプローチ  
香山正憲 (産業技術総合研究所)

<大型研究施設>

- P-32 課題解決基盤 SPring-8 –ナノアプリケーションによる元素戦略–  
高田昌樹 (理化学研究所)
- P-33 J-PARC MLF | 物質・生命科学実験施設 世界最高強度を持つパルス中性子・  
ミュオン実験施設  
藤井保彦 (CROSS 東海)
- P-34 冷中性子ディスクチョッパー型分光器 AMATERAS  
中島健次 (J-PARC)
- P-35 J-PARC BL01 チョッパー分光器「四季」  
梶本亮一 (J-PARC)
- P-36 PHOTON FACTORY  
村上洋一 (KEK)

<CMSI 関連>

- P-37 第一原理計算と硬 X 線電子分光法による B-チタン合金の電子状態解析  
佐原亮二 (物質・材料研究機構)
- P-38 強誘電体のドメイン構造の分子動力学シミュレーション  
～ドメインエンジニアリングとその場観察に向けて～  
西松毅 (東北大学)
- P-39 ホタルルシフェリン分子の光吸収スペクトル計算  
野口良史 (東京大学)
- P-40 強相関電子系/スピン系の汎用シミュレータ:ALPS  
藤堂眞治 (東京大学)
- P-41 MateriApps: 物質科学シミュレーションのポータルサイト  
五十嵐亮 (東京大学)
- P-42 平面波基底第一原理計算ソフト xTAPP と入力支援・可視化ソフト TAPIOCA  
吉本芳英 (東京大学)
- P-43 8 員環欠陥を持つナノカーボン物質のフラットバンド電子状態  
小野頌太 (横浜国立大学)
- P-44 大規模系に適した高速・多機能な局在基底第一原理電子状態計算プログラム：  
OpenMX  
尾崎泰助 (北陸先端科学技術大学院大学)
- P-45 超並列量子化学計算プログラムの開発  
石村和也 (分子科学研究所)

- P-46 超並列計算機向け第一原理電子状態計算コード「RSDFT」の開発と応用  
岩田潤一（東京大学）
- P-47 スラブ系電子構造計算の開発と実装  
小田竜樹（金沢大学）
- P-48 電子・原子論に基づく Fe-Si 合金の強度予測  
譯田真人（大阪大学）
- P-49 Au/Pd 合金ナノクラスターによるウルマンカップリング反応の理論解析  
櫻井英博（分子科学研究所）

<一般>

- P-50 多孔性配位高分子を用いた新しいプロトン伝導体の中性子散乱研究  
古府麻衣子（東京大学）
- P-51 乳酸菌中のヘム濃度恒常性維持に関与する転写調節因子の構造生物化学  
青野重利（分子科学研究所）
- P-52 in situ and operando analysis of electronic structure in carbon-based cathode  
catalysts for polymer electrolyte fuel cells  
丹羽秀治（東京大学）
- P-53 磁気コンプトン散乱+磁化率測定と電子状態計算による希土類磁石のスピン・  
軌道磁気モーメントの評価  
石橋章司（産業技術総合研究所）
- P-54 NTChem: 分子科学計算ソフトウェア  
中嶋隆人（理化学研究所）
- P-55 in situ XAFS による高温反応下における排ガス触媒の構造解析  
山元隆志（榊原レリサーチセンター）
- P-56 M ドープ SrTiO<sub>3</sub>(M=Rh,Ir)の光触媒活性と電子状態の関係性  
川崎聖治（東京大学）
- P-57 超高分解能レーザー励起光電子顕微鏡によるナノスケール化学イメージング・  
磁気イメージング  
谷内敏之（東京大学）
- P-58 物性研究所における非破壊パルスマグネットを用いた研究の現状  
徳永将史（東京大学）