

熊 谷 悠

学 歴 平成12年3月 滋賀県立膳所高等学校卒業
平成13年4月 京都大学工学部地球工学科入学
平成17年3月 京都大学工学部資源工学科卒業
平成17年4月 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻修士課程入学
(指導教員 田中 功教授)
平成19年3月 同 上 修 了
平成19年4月 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻博士課程入学
(指導教員 田中 功教授)
平成22年3月 同 上 修 了

学 位 工学博士 (平成22年3月 京都大学)
職 歴 平成22年4月 京都大学大学院工学研究科 特定研究員
平成23年4月 日本学術振興会海外特別研究員
(チューリッヒ工科大、Prof. Nicola A. Spaldin)
平成24年12月 東京工業大学元素戦略研究センター 特任助教
平成27年9月 同 特任講師
平成28年10月 JST さきがけ(研究員 (兼任))
平成28年12月 東京工業大学元素戦略研究センター 特任准教授
現在に至る

専 門 分 野

半導体理論構築とその第一原理手法の開発

I. 学位論文 (論文題目, 学位, 取得大学・年月日)

1. コバルト複合酸化物における $L_{2,3}$ 端 XANES の理論計算
修士(工学), 京都大学, 2007年3月23日
2. 第一原理計算による $3d$ 遷移金属酸化物の原子配列と電子構造の相関
博士(工学), 京都大学, 2010年3月23日

II. 原著論文 (著書名, 論文題目, 雑誌名, 号 (巻), 年, ページ)

1. Y. Kumagai, N. Tsunoda (共同第一著者), F. Oba
“Point defects and p -type doping in ScN from first principles”
Phys. Rev. Applied, x (2018) xxxxx-1-xx, *in-press*.
2. J. Mundy, J. Schaab, Y. Kumagai (共同第一著者), A. Cano, M. Stengel, I. Krug, D. Gottlob, H. Doganay, M. Holtz, R. Held, Z. Yan, E. Bourret, C. Schneider, D. Schlom, D. Muller, R. Ramesh, N. A. Spaldin, and D. Meier

“Functional electronic inversion layers at ferroelectric domain walls”

Nat. Mater., **16** (2017) 622-627.

3. Y. Kumagai, K. Harada, H. Akamatsu, K. Matsuzaki, F. Oba
“Carrier-Induced Band-Gap Variation and Point Defects in Zn_3N_2 from First Principles”
Phys. Rev. Applied, **8** (2017) 014015-1-12, *Editors' suggestion*.
4. Y. Kumagai, K. T. Butler, A. Walsh, F. Oba
“Theory of ionization potentials of nonmetallic solids”
Phys. Rev. B, **95** (2017) 125309-1-10.
5. Y. Hinuma, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba
“Band alignment of semiconductors and insulators using dielectric-dependent hybrid functionals: Toward high-throughput evaluation”
Phys. Rev. B, **95** (2017) 075402-1-10.
6. L. A. Burton, Y. Kumagai, A. Walsh, F. Oba
“DFT investigation into the underperformance of sulfide materials in photovoltaic applications”
J. Mater. Chem. A, **5** (2017) 9132-9140.
7. L. Ding, P. Manuel, D. D. Khalyavin, F. Orlandi, Y. Kumagai, F. Oba, W. Yi, A. A. Belik,
“Unusual magnetic structure of the high-pressure synthesized perovskites $ACrO_3$ ($A=Sc, In, Tl$)”
Phys. Rev. B, **95** (2017) 054432-1-7.
8. Y. Hinuma, G. Pizzi, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba
“Band structure diagram paths based on crystallography”
Comput. Mater. Sci., **128** (2017) 140-184.
9. K. Fujita, T. Kawamoto, I. Yamada, O. Hernandez, H. Akamatsu, Y. Kumagai, F. Oba, P. Manuel, R. Fujikawa, S. Yoshida, M. Fukuda, and K. Tanaka
“Perovskite-Type $InCoO_3$ with Low-Spin Co^{3+} : Effect of In--O Covalency on Structural Stabilization in Comparison with Rare-Earth Series”
Inorg. Chem., **56** (2017) 11113-11122.
10. A. A. Belik, Y. Matsushita, Y. Kumagai, Y. Katsuya, M. Tanaka, S. Stefanovich, B. Lazoryak, F. Oba, K. Yamaura
“Complex Structural Behavior of $BiMn_7O_{12}$ Quadruple Perovskite”
Inorg. Chem., **56** (2017) 12272-12281.
11. Y. Hinuma, H. Hayashi, Y. Kumagai, I. Tanaka, and F. Oba
“Comparison of approximations in density functional theory calculations: Energetics and structure of binary oxides”
Phys. Rev. B, **96** (2017) 094102-1-24.
12. Y. Kumagai, L. A. Burton, A. Walsh, and F. Oba
“Electronic structure and defect physics of tin sulfides: SnS , Sn_2S_3 , and SnS_2 ”
Phys. Rev. Applied, **6** (2016) 014009-1-14.

13. Y. Hinuma, T. Hatakeyama, Y. Kumagai, L. A. Burton, H. Sato, Y. Muraba, S. Imura, H. Hiramatsu, I. Tanaka, H. Hosono, and F. Oba
“Discovery of earth-abundant nitride semiconductors by computational screening and high-pressure synthesis”
Nat. Commun., **7** (2016) 11962-1-10.
14. A. A. Belik, W. Yi, Y. Kumagai, Y. Katsuya, M. Tanaka, and F. Oba
“LiNbO₃-type oxide (Tl_{1-x}Sc_x)ScO₃: High-pressure synthesis, crystal structure, and electronic properties”
Inorg. Chem., **55** (2016) 1940-1945.
15. S. Toyoda, K. Fukuda, K. Horiba, M. Oshima, K. Kumagai, Y. Kumagai, F. Oba, Y. Uchimoto, and E. Matsubara
“Ligand-driven controlling of covalency and metallicity in ruthenium two-dimensional system”
Chem. Mat., **28** (2016) 5784-5790.
16. S. Katayama, H. Hayashi, Y. Kumagai, F. Oba, and I. Tanaka
“Electronic structure and defect chemistry of tin(II) complex oxide SnNb₂O₆”
J. Phys. Chem. C, **120** (2016) 9604-9611.
17. K. T. Butler, Y. Kumagai, F. Oba, and A. Walsh
“Screening procedure for structurally and electronically matched contact layers for high-performance solar cells: hybrid perovskites”
J. Mater. Chem. C, **4** (2016) 1149-1158.
18. Y. Hinuma, Y. Kumagai, F. Oba, and I. Tanaka
“Categorization of surface polarity from a crystallographic approach”
Comput. Mater. Sci., **113** (2016) 221-230.
19. S. Okamoto, T. Ichitsubo, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, K. Shimokawa, N. Goto, E. Matsubara
“Intercalation and Push-Out Process with Spinel-to-Rocksalt Transition on Mg Insertion into Spinel Oxides in Magnesium Batteries”
Adv. Sci., **2** (2015) 150072-1-9.
20. T. Ichitsubo, S. Okamoto, T. Kawaguchi, Y. Kumagai, F. Oba, S. Yagi, N. Goto, T. Doi, E. Matsubara
“Toward “rocking-chair type” Mg-Li dual-salt batteries”
J. Mater. Chem. A, **19** (2015) 10188-10194.
21. F.-T. Huang, X. Wang, S. M Griffin, Y. Kumagai, O. Gindele, M.-W. Chu, Y. Horibe, N. A. Spaldin, S.-W. Cheong
“Duality of Topological Defects in Hexagonal Manganites”
Phys. Rev. Lett., **113** (2014) 267602-1-5.

22. Y. Kumagai, and F. Oba
“Electrostatics-based finite-size corrections for first-principles point defect calculations”
Phys. Rev. B, **89** (2014) 195205-1-15, *Editors’ suggestion*.
23. Y. Kumagai, M. Choi, Y. Nose, and F. Oba
“First-principles study of point defects in chalcopyrite ZnSnP₂”
Phys. Rev. B, **90** (2014) 125202-1-12.
24. W. Yi, Y. Kumagai, N. A. Spaldin, Y. Matsushita, A. Sato, I. A. Presniakov, A. V. Sobolev, Y. S. Glazkova, and A. A. Belik
“Perovskite-Structure TiMnO₃: A New Manganite with New Properties”
Inorg. Chem., **53** (2014) 9800-9808.
25. Y. Kumagai, and N. A. Spaldin
“Structural Domain Walls in Polar Hexagonal Manganites”
Nat. Commun., **4** (2013) 1540-1-8.
26. Y. Hinuma, F. Oba, Y. Kumagai, and I. Tanaka
“Band offsets of CuInSe₂/CdS and CuInSe₂/ZnS (110) interfaces: A hybrid density functional theory study”
Phys. Rev. B, **88** (2013) 035305-1-12.
27. H. Akamatsu, Y. Kumagai, F. Oba, K. Fujita, K. Tanaka, and I. Tanaka
“Strong spin-lattice coupling through oxygen octahedral rotation in divalent europium perovskites”
Adv. Funct. Mater., **23** (2013) 1864-1872.
28. M. Choi, F. Oba, Y. Kumagai, I. Tanaka
“Antiferrodistortive-like Oxygen-Octahedron Rotation Induced by the Oxygen Vacancy in Cubic SrTiO₃”
Adv. Mater., **25** (2013) 86-90.
29. Y. Hinuma, F. Oba, Y. Kumagai, and I. Tanaka
“Ionization potentials of (112) and (11-2) facet surfaces of CuInSe₂ and CuGaSe₂”
Phys. Rev. B, **86** (2012) 245433-1-7.
30. Y. Kumagai, A. A. Belik, M. Lilienblum, N. Leo, M. Fiebig, and N. A. Spaldin
“Observation of persistent centrosymmetry in the hexagonal manganite family”
Phys. Rev. B, **85** (2012) 174422-1-7.
31. H. Akamatsu, K. Fujita, H. Hayashi, T. Kawamoto, Y. Kumagai, Y. Zong, K. Iwata, F. Oba, I. Tanaka, and K. Tanaka
“Crystal and Electronic Structure and Magnetic Properties of Divalent Europium Perovskite Oxides EuMO₃ (M = Ti, Zr, and Hf): Experimental and First-Principles Approaches”
Inorg. Chem., **51** (2012) 4560-4567.
32. Y. Kumagai, Y. Soda, F. Oba, A. Seko, and I. Tanaka

- “First-principles calculations of the phase diagrams and band gaps in CuInSe₂-CuGaSe₂ and CuInSe₂-CuAlSe₂ pseudobinary systems”
Phys. Rev. B, **85** (2012) 033203-1-4.
33. S. M. Griffin, M. Lilienblum, K. Delaney, Y. Kumagai, M. Fiebig, and N. A. Spaldin
“Scaling behavior and beyond in the hexagonal manganites”
Phys. Rev. X, **2** (2012) 041022-1-10.
34. D. Meier, J. Seidel, A. Cano, K. Delaney, Y. Kumagai, M. Mostovoy, N. A. Spaldin, R. Ramesh, and M. Fiebig
“Anisotropic conductance at improper ferroelectric domain walls”
Nat. Mat., **11** (2012) 284-288.
35. Y. Kumagai, A. Seko, F. Oba, and I. Tanaka
“Ground-state search in multicomponent magnetic systems”
Phys. Rev. B, **85** (2012) 012401-1-4.
36. H. Akamatsu, Y. Kumagai, F. Oba, K. Fujita, K. Tanaka and I. Tanaka
“Antiferromagnetic superexchange via 3d states of titanium in EuTiO₃ as seen from hybrid Hartree-Fock density functional calculations”
Phys. Rev. B, **83** (2011) 214421-1-6.
37. Y. Kumagai, F. Oba, I. Yamada, M. Azuma, and I. Tanaka
“First-principles study of defect-induced potentials in Ca₂CuO₂Cl₂”
Phys. Rev. B, **80** (2009) 085120-1-9.
38. 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** (2009) 144117-1-6.
39. Y. Kumagai, H. Ikeno, and I. Tanaka
“All-electron CI calculations of 3d transition-metal L_{2,3} XANES using zeroth-order regular approximation for relativistic effects”
J. Phys.: Condens. Matter, **21** (2009) 104209-1-5.
40. Y. Kumagai, H. Ikeno, F. Oba, K. Matsunaga, and I. Tanaka
“Effects of crystal structure on Co x-ray absorption near-edge structure and electron energy-loss near-edge structure of trivalent cobalt oxides”
Phys. Rev. B, **77** (2008) 155124-1-9.
41. H. Ikeno, T. Mizoguchi, Y. Koyama, Y. Kumagai, and I. Tanaka
“First-principles multi-electron calculations for L_{2,3} ELNES/XANES of 3d transition metal monoxides”
Ultramicroscopy, **106** (2006) 970-975.

Ⅲ. 著（訳）書，解説 等（著書名，書名，出版社名（掲載誌名），年，ページ）

1. “半導体材料探索に向けた計算材料データベースの開発”
熊谷 悠、大場 史康
化学工業, **69**, 18-26 (2018).
2. “半導体材料探索に向けた計算データベースの開発”
熊谷 悠、大場 史康
固体物理, **52**, 151-158 (2017).
3. “第一原理計算による半導体の物性予測と物質探索”
大場 史康，日沼 洋陽，熊谷 悠
まてりあ, **56** (2016) 554-559.
4. “半導体点欠陥の第一原理計算”
熊谷 悠
まてりあ, **55** (2016) 221-224.
5. “先進計算科学による半導体物性の高精度予測と新物質探索”
大場 史康，日沼 洋陽，熊谷 悠
工業材料, **64** (2016) 30-34.
6. “過去，現在，そして未来の研究”
熊谷 悠
セラミックス誌, **50** (2015) xxx-xxx.
7. “半導体の基礎物性・格子欠陥特性の高精度理論予測と物質・材料探索への展開”
大場 史康，日沼 洋陽，熊谷 悠
セラミックス誌, **50** (2015) 542-545.
8. “第一原理熱力学計算によるセラミックス材料の相平衡”
世古 敦人，熊谷 悠，大場 史康，田中 功
セラミックス誌 **47** (2012) 494-499.

Ⅳ. 国際会議報告（講演者名，講演名，学会誌等名、号（巻），年、ページ）

1. Y. Kumagai, L. A. Burton, A. Walsh, and F. Oba
“*Ab Initio* Study of Point Defects in Tin Sulfides”
AMTC Letters, **5** (2016) 140-141. [査読有]
2. K. Harada, Y. Kumagai, K. Matsuzaki, T. Susaki, and F. Oba
“First-principles Study of Point Defects in Copper Nitride”
AMTC Letters, **5** (2016) 138-139. [査読有]

3. Y. Kumagai and F. Oba
“Finite-size correction for first-principles point defect calculations using a supercell approach”
AMTC Letters, **4** (2014) 88-89. [査読有]
4. H. Akamatsu, F. Oba, Y. Kumagai, K. Fujita, K. Tanaka, and I. Tanaka
“Role of d states of B-site cations for spin-lattice coupling in Eu^{2+} perovskite oxides”
AMTC Letters, **3** (2012) 250-251. [査読有]
5. Y. Kumagai, A. Seko, F. Oba, and I. Tanaka
“Ground-State Structures in MgO-NiO Crystalline Solutions”
AMTC Letters, **2** (2010) 180-181. [査読有]
6. H. Akamatsu, Y. Kumagai, F. Oba, K. Fujita, K. Tanaka, and I. Tanaka
“First-Principles Study of Magnetism and Electronic Structure in Eu^{2+} Perovskite Oxides”
AMTC Letters, **2** (2010) 162-163. [査読有]
7. Y. Kumagai, H. Ikeno, and I. Tanaka
“First-principles Study of Co $L_{2,3}$ XANES and ELNES of Trivalent Cobalt Compounds”
AMTC Letters, **1** (2008) 138-139. [査読有]

V. その他特記事項 等 (特許 等)

招待講演

1. “半導体材料開発のための計算材料データベース” (予定)
熊谷 悠
日本物理学会第 73 回年次大会、東京、3/25 (2018).
2. “Computational materials database toward discovering novel semiconductors” (予定)
Yu Kumagai
第 32 回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザインワークショップ、大阪、3/2 (2018).
3. “半導体材料開発のための計算材料データベース”
熊谷 悠
さがけマテリアルズインフォ公開シンポジウム、東京、2/22 (2018).
4. “半導体材料開発のための第一原理計算”
熊谷 悠
ポスト新機能物質開発のための戦略会議、東京、11/14 – 11/15 (2017).
5. “First-principles calculations on point defects in semiconductors and insulators”
Y. Kumagai
The 20th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Nanjing, China, Oct. 30 – Nov. 1 (2017).
6. “半導体材料探索に向けた計算データベースの開発”
熊谷 悠
新機能デバイス・高性能材料のための産官学連携フォーラム 第 3 回会合、東京、9/11 (2017)
7. “First-principles calculations on point defects in semiconductors”
Y. Kumagai

Frontiers in Materials Science 2017, Greifswald, Germany Sep. 4 – Sep.6 (2017).

8. “Computational materials database toward discovering novel semiconductors”
Y. Kumagai
Interdisciplinary symposium on modern density functional theory – iDFT, 和光、6/19 – 6/23 (2017)
9. “First-principles investigation of point defects in non-metallic materials”
Y. Kumagai
第 26 回日本 MRS 年次大会, 横浜, 12/19-12/20 (2016).
10. “Predictions of point defect properties in semiconductors”
Y. Kumagai
PACRIM11, Jeju, Korea, Aug. 30 – Sept 4 (2015).
11. “第一原理に基づく点欠陥計算の高精度化とその応用”
熊谷 悠, 大場 史康
日本金属学会秋期講演大会 2015, 9/15 – 9/18 (2015).
12. ”Structural domain walls in polar hexagonal manganites”
Y. Kumagai
APS March meeting 2014, Denver, March 3–7 (2014).

賞罰

第 25 回日本金属学会奨励賞 [物性部門] (平成 27 年)

第 53 回セラミックス基礎科学討論会 国際セッション優秀賞 (平成 27 年)

The 25th Annual Meeting of MRS-J Award for Encouragement of Research (平成 28 年)

第 39 回本多記念研究奨励賞 (平成 30 年)