



# 金沢大学ナノマテリアル研究所 年報 2019 年

Annual report

Nanomaterials Research Institute

Kanazawa University

## 目次

新規材料開発グループ . . . . . P1-3

創エネデバイス開発グループ . . . . . P4-7

省エネデバイス開発グループ . . . . . P8-9

ナノ計測グループ . . . . . P10-11

理論・計算科学グループ . . . . . P12-14

## 新規材料開発グループ

### <スタッフ>

|          |      |       |
|----------|------|-------|
| グループリーダー | 教授   | 水野 元博 |
|          | 助教   | 雨森 翔悟 |
|          | 特任助教 | 重田 泰宏 |

### 【研究概要】

当グループでは、超分子の特性を活かした革新的なマテリアル研究を推進し、次世代のエネルギー・環境材料、及び生活の質的向上に繋がる材料の開発を目指す。実用化の観点から、固体材料の開発は極めて重要であるが、これまでの超分子を用いた材料開発では液体が主であり、固体材料の開発は未開拓な分野である。当グループでは、固体 NMR などを用いた物質の局所構造やダイナミクスの解析を物質設計にフィードバックし、超分子を用いた高機能固体材料の開発を推進する。

具体的な研究テーマとしては、燃料電池への活用が期待される固体プロトン伝導物質の開発に取り組んでおり、高分子、メソポーラスシリカ、有機結晶などのナノ空間にプロトン伝導媒体となる有機分子を配置することで、高いプロトン伝導性を持つ固体電解質の開発を行っている。

“高分子エラストマーの網目空間内における超分子化学”を柱とし、革新的な機能性マテリアルの開発を目指し精力的に研究を行っている。従来の超分子は多くの場合、低分子の液体媒体中で生成・利用されてきた。本研究では“ゴム(エラストマー)を超分子形成の媒体として利用する”という独自のアイデアを基に、超分子の平衡による機能性をエラストマーに付与し、新規の機能性固体超分子-高分子材料の創成を進めている。

### <2019年の研究成果、進展状況>

固体中の分子の運動が関与したプロトン伝導プロセスに着目し、高プロトン伝導性固体材料の開発に取り組んだ。本年度は、プロトン伝導性有機結晶、プロトン伝導性高分子複合膜を用いたプロトン伝導性材料について開発と物質内部の構造・分子運動の解析を行った。プロトン伝導性高分子複合膜については、アルギン酸にイミダゾールを加えた複合膜について、プロトン伝導性とイミダゾール分子の運動性との関係を調べた。イミダゾールの量が少ないときは、高分子鎖間にイミダゾールを介した水素結合による架橋が形成され、イミダゾール分子は架橋内でフリップ運動をしていることが見出された。架橋内でのフリップ運動は共同研究により理論計算を用いて考察を進めている。また、固体NMR法を用いて様々な機能性物質の解析を行い、物質の機能と分子運動の関係を明らかにした。

高分子エラストマーの網目空間内における超分子集合体の集合挙動の解析と、力学的刺激に応答した高分子エラストマーの創成を目指し精力的に研究を遂行した。具体的には架橋したポリジメチルシロキサン (PDMS) エラストマー中と無架橋の PDMS 中における電荷移動錯

体の集合挙動（特に会合定数）の解析を行った。結果として架橋の有無による会合定数の違いはほとんど示唆されなかった。本結果は媒体のマクロな流動が抑制された環境中（エラストマー中）においても、液体中と同様に分子間の会合定数を議論できることを示している。固体中における特異な超分子化学への展開が期待される。

また PDMS エラストマー中における多孔性配位高分子の *in situ* 合成による混合マトリックス膜の開発を推進した。ガス分離特性に優れる多孔性配位高分子と高分子の複合化によって作製される混合マトリックス膜は高性能なガス分離膜材料として近年注目されている。一方で、多孔性配位高分子の高分子中における凝集が課題となっていた。これを解決する手段として高分子エラストマー中における多孔性配位高分子の *in situ* 合成法の開拓を進めた。現在、PDMS エラストマー中における多孔性配位高分子の形成を示唆する結果が得られている。

## 【 研 究 業 績 】

### <発表論文>

1. Ohashi, R.; Michal, C.; Mehr, H.; Nguyen, T.; MacLachlan, M.; Mizuno, M. “Solid-state  $^{23}\text{Na}$  NMR spectroscopy studies of ordered and disordered cellulose nanocrystal films” *Solid State Nucl. Magn. Reson.*, **2019**, 97, 31-39.
2. Ogoshi, T.; Maruyama, K.; Sakatsume, Y.; Kakuta, T.; Yamagishi, T.; Ichikawa, T.; Mizuno, M. “Guest Vapour-Induced State Change of Structural Liquid Pillar[6]arene” *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, 141, 785-789.
3. Ogoshi, T.; Hamada, Y.; Sueto, R.; Sakata, Y.; Akine, S.; Moeljadi, A. M. P.; Hirao, H.; Kakuta, T.; Yamagishi, T.; Mizuno, M. “Host-Guest Complexation Using Pillar[5]arene Crystals: Crystal-Structure Dependent Uptake, Release, and Molecular Dynamics of an Alkane Guest” *Chem. Eur. J.*, **2019**, 25, 1-7. (Hot Paper, Front Cover)
4. Ogoshi, T.; Sueto, R.; Yagyu, M.; Kojima, R.; Kakuta, T.; Yamagishi, T.; Doitomi, K.; Tummanapelli, A. K.; Hirao, H.; Sakata, Y.; Akine, S.; Mizuno, M. “Molecular weight fractionation by confinement of polymer in one-dimensional pillar[5]arene channels” *Nat. Commun.*, **2019**, 10, 479.
5. Ohata, Y.; Kamebuchi, H.; Watanabe, K.; Kouchi, T.; Suzuki, Y.; Imaizumi, T.; Sugaya, T.; Mizuno, M.; Tadokoro, M. “Slow Dynamics of Premelting Water Molecules Confined in a Hydrophilic Nanoporous Space” *ChemistrySelect* **2019**, 4, 6627–6633.
6. Hori, Y.; Shiota, Y.; Ida, T.; Yoshizawa, K.; Mizuno, M. “Local structures and electronic properties of In atoms in In-doped ZnO” *Thin Solid Films* **2019**, 685, 428-433.

### <外部資金>

(ユニット主体)

1. 基盤研究 B, 「最適な分子運動空間構築に基づいた高プロトン伝導材料の開発」, 水野元博, 代表, 2019-2021 年度, 配分額 総額 直接経費 13,500 千円 (H31: 6,400 千円)
2. 科研費 若手研究「エラストマーを利用した超分子集合体の力学的制御と力学的刺激応

答性材料への応用」雨森翔悟，代表， 2018-2021 年度，直接経費 3,100 千円

<共同研究>

学外

1. 「ナノセルロースクリスタルの新規物性と局所構造解析」水野元博（代表者），雨森翔悟，大橋竜太郎，Mark J MacLachlan (University of British Columbia)
2. 「固体プロトン伝導物質の研究」水野元博（代表者），大橋竜太郎，清水禎（物質・材料研究機構），丹所正孝（物質・材料研究機構）
3. 「グラファイト層間化合物の局所構造解析」後藤和馬（岡山大学，代表者），水野元博
4. 「多孔性ピラーアレーン結晶に吸着された有機ゲストの分子運動とホスト-ゲスト間相互作用の解析」生越友樹（代表者，京都大学），水野元博
5. 「ナノポーラス空間における水分子の運動状態解析」田所誠（代表者，東京理科大），水野元博

## 創エネデバイス開発グループ

### <スタッフ>

|                |      |                   |
|----------------|------|-------------------|
| グループリーダー       | 教授   | 當摩 哲也             |
|                | 准教授  | 辛川 誠              |
|                | 特任助教 | Md. Shahiduzzaman |
| 招聘型リサーチプロフェッサー |      | Jean-Michel Nunzi |

### 【研究概要】

太陽電池は再生可能エネルギーの代表格だが、主流のシリコン太陽電池はその重さや形状から設置場所が限られる。そこで注目を集めているのが、薄い、軽い、曲げられるなどのメリットを持つ有機系薄膜太陽電池である。金沢大学ではこれまで、塗って作る太陽電池の技術開発に貢献するなど、当該分野で顕著な実績を上げてきた。当グループではこうしたアドバンテージを活かし、さまざまな観点・技術から有機系太陽電池の性能向上に取り組んでいる。例えば、光吸収の増加や電荷輸送効率の向上は重要な要素である。真空蒸着により基板に蒸着された有機半導体分子は、基板に対して垂直に立つ、水平に寝るなどの配向をとるが、後者のほうがよく光を吸収し、よく電力を流すことが分かっている。当グループでは、*in situ*測定が可能な製膜装置を独自に開発し、分子の配向制御技術を追求している。また、「近赤外光」を利用した太陽電池用有機材料の分子設計・合成にも挑戦している。人の目に見えない波長の光を吸収する材料は無色透明になることから、色のない太陽電池として従来にない製品デザインが期待できる。最後に、有機・無機ハイブリッド型の太陽電池も研究対象としており、シリコン系に迫る変換効率を持つ「ペロブスカイト太陽電池」について、多層構造の接合面を制御することで、高性能化の可能性を探索している。有機系薄膜太陽電池が普及にいたる壁のひとつは耐久性ですが、当グループでは様々な研究機関と連携することで、劣化メカニズムを探求し、実用化につなげて行く予定である。

### <2019年の研究成果、進展状況>

有機無機ハイブリッドであるペロブスカイト太陽電池の研究では、イオン液体添加によるナノ構造制御により論文と特許を取得し、基礎的研究として太陽電池の劣化機構の解明を行った。東海大学との研究として、酸化チタン層の結晶層の制御と高性能を検討し、その成果は Nature Index の Springer Nature の編集チームの”Research Highlight”に選ばれた。さらに、無機型ペロブスカイト太陽電池として、蒸着可能な Cs を元にした太陽電池の開発に成功している。この他、会社との共同研究や RSET の教員との融合研究として、大気圧プラズマジェットを用いた新規製膜法の開発を行っている。若手 PI が中心となり研究を行っている有機半導体創製の研究において、海外研究者との共同研究において新規半導体のトランジスタ応用に成功し、さらに新規太陽電池用材料の創製にも成功している。さらに、有機薄膜太陽電池の劣化および耐久性研究を学内研究者との共同研究として行い、光吸収発電層内で生じる有機半導

体材料の経時変化を独自の手法により化学分析することに成功した。この成果は金沢大学 paper of the month に選出された。国立大学附置研究所のアライアンス事業へ参画し、東京工業大学との共同研究として、有機薄膜太陽電池構造を使った光触媒素子の研究を行い、可視光を効果的に吸収することで従来の数倍の光触媒機能の発現に成功し、金沢大学と東京工業大学で同時にプレスリリースを行った。

## 【 研究業績 】

### < 発表論文 >

1. Md. Shahiduzzaman, T. Sakuma, T. Kaneko, K. Tomita, M. Isomura, T. Taima, S. Umezu & S. Iwamori, "Oblique Electrostatic Inkjet-Deposited TiO<sub>2</sub> Electron Transport Layers for Efficient Planar Perovskite Solar Cells" *Scientific Reports* 9, pp.19494 (2019.12).
2. Md. Shahiduzzaman, T. Hirayama, T. Chikamatsu, T. Koganezawa, M. Nakano, T. Miyadera, M. Karakawa, K. Takahashi and T. Taima, "Substrate-Driven Switchable Molecular Orientation in Bulk Heterojunction Films and Identified by Infrared Reflection Absorption Spectroscopy", *Molecular Systems Design & Engineering* (2020) accepted.
3. K. Shimada, Md. Shahiduzzaman, and T. Taima, "Platinum leaf counter electrodes for dye-sensitized solar cells", *Japanese Journal of Applied Physics* 59, pp.SDDC07 (2020.1).
4. R. Sato, Y. Chiba, M. Chikamatsu, Y. Yoshida, T. Taima, M. Kasu, and A. Masuda, "Characteristics change in organic photovoltaics by thermal recovery and photodegradation", *Japanese Journal of Applied Physics* 59, pp.SCCD04 (2020). (Published online 2019.11.)
5. Y. Wada, K. Shinohara, H. Asakawa, S. Matsui, T. Taima, and T. Ikai, "One-Step Synthesis of One-Dimensional Supramolecular Assemblies Composed of Helical Macromolecular Building Blocks", *J. Am. Chem. Soc.* 141, pp.13995–14002(2019.8).
6. N. Ohashi, T. Miyadera, T. Taima, and Y. Yoshida, "Evaluation of exciton diffusion length in highly oriented fullerene films of fullerene/p-Si (100) hybrid solar cells", *Japanese Journal of Applied Physics* 58, pp.121004 (2019.11).
7. Md. Shahiduzzaman, K. Hamada, K. Yamamoto, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, and T. Taima, "Thermal Control of PbI<sub>2</sub> Film Growth for Two-Step Planar Perovskite Solar Cells" *Cryst. Growth Des.* 19, pp. 5320–5325(2019.7).
8. R. Sato, Y. Chiba, M. Chikamatsu, Y. Yoshida, T. Taima, M. Kasu, and A. Masuda, "Investigation of the power generation of organic photovoltaic modules connected to the power grid for more than three years", *Japanese Journal of Applied Physics* 58, pp. 052001 (2019.4).

9. K. Hamada, K. Yonezawa, K. Yamamoto, T. Taima, S. Hayase, N. Ooyagi, Y. Yamamoto and K. Ohdaira, "Vacuum deposition of CsPbI<sub>3</sub> layers on textured Si for Perovskite/Si tandem solar cells", *Japanese Journal of Applied Physics* 58, pp. SBBF06 (2019.2).
10. K. Yamamoto, T. Miyadera, Y. Matsuo, T. Kuwabara, K. Takahashi, T. Taima, and M. Chikamatsu, "Effects of optical interference and optimized crystallinity in organic photovoltaic cells with a low-bandgap small molecule fabricated by dry process" *Japanese Journal of Applied Physics* 58, pp. SBBG12 (2019.2).
11. Md. Shahiduzzaman, R. Yamada, T. Chikamatsu, T. Ono, Y. Tanaka, Y. Uesugi, M. Karakawa, T. Kuwabara, K. Takahashi, T. Ishijima, T. Taima, "Thin film deposition method for ZnO nanosheets using low-temperature microwave-excited atmospheric pressure plasma jet", *Thin Solid Films* 674-31 pp. 58-63 (2019.3).
12. Md. Shahiduzzaman, S. Visal, M. Kuniyoshi, T. Kaneko, S. Umezu, T. Katsumata, S. Iwamori, M. Kakihana, T. Taima, M. Isomura, K. Tomita, "Low-Temperature-Processed Brookite-Based TiO<sub>2</sub> Heterophase Junction Enhances Performance of Planar Perovskite Solar Cells", *Nano Lett.* 19-1, pp. 598-604(2019).

#### <著書・編書>

1. 當摩哲也, 辛川誠, 高橋光信, 有機薄膜太陽電池のナノレベルでの構造解明と高性能化, 応用物理 88(10) 2019 年
2. 當摩哲也, イオン液体によるペロブスカイトナノ粒子膜の作製とその生成メカニズム, 鉦山(Web) 72(4) 2019 年

#### <外部資金>

1. 公益財団法人中部電気利用基礎研究振興財団, 「交互蒸着による低コスト・高性能な有機-無機ハイブリット太陽電池の開発」(2019~2020 年度), 1,700 千円, 研究代表者: 當摩哲也
2. 株式会社 EMD、共同研究 (平成 31 年度) 代表: 石島達夫、研究分担者: 當摩哲也
3. 平成 29 年度~31 年度, 基盤研究(C), 「逆型有機薄膜太陽電池の劣化機構の解明を基軸とした高耐久性素子の創成」代表: 高橋光信、研究分担者: 辛川誠
4. 株式会社 ハーベス、共同研究 (平成 31 年度), 研究代表者: 辛川誠
5. 平成 31 年度 「ヘミバルクヘテロ構造を有する有機薄膜を用いた光触媒システムの開発」アライアンス共同研究事業 東京工業大学化学生命科学研究所、代表: 辛川誠

#### <共同研究>

##### 学内

1. 當摩とRSET石島の共同研究「プラズマジェットを用いた製膜法の開発」
2. 當摩と新学術創成研究機構仁宮の共同研究「イオン液体添加によるペロブスカイトナノ粒子化」

3. 辛川とRSET石島、北川の共同研究「有機太陽電池を電源とするIoTデバイスの開発」

#### 学外

1. 住化分析センターとの共同研究「有機系太陽電池の評価と観察」 當摩哲也
2. 株式会社ハーベスとの共同研究「有機薄膜太陽電池の効率向上」 辛川誠
3. 日産化学工業株式会社との共同研究「新規蓄熱材の開発」 辛川誠

## 省エネデバイス開発グループ

### <スタッフ>

|          |      |                    |
|----------|------|--------------------|
| グループリーダー | 教授   | 徳田 規夫              |
|          | 准教授  | 松本 翼               |
|          | 特任助教 | 張 旭芳               |
|          | 特任教授 | 山崎 聡               |
|          | 特任教授 | Christoph E. Nebel |

### 【研究概要】

省エネデバイス開発グループでは、ダイヤモンド半導体デバイスの早期社会実装を目指し、独自の高密度プラズマを始めとするダイヤモンド成膜技術とニッケルの炭素固溶反応を用いた独自の高速エッチング技術を駆使して、ダイヤモンドウェハ開発からデバイス開発までの各要素技術の研究開発に取り組んでいる。

### 【研究業績】

#### <発表論文>

1. Conductive-probe atomic force microscopy and Kelvin-probe force microscopy characterization of OH-terminated diamond (111) surfaces with step-terrace structures  
Nagai, M., Yoshida, R., Yamada, T., Tabakoya, T., Nebel, C.E., Yamasaki, S., Makino, T., Matsumoto, T., Inokuma, T., Tokuda, N.  
Japanese Journal of Applied Physics  
Volume 58, Issue SI, 2019, Article number SIIB08
2. Inversion channel mobility and interface state density of diamond MOSFET using N-type body with various phosphorus concentrations  
Matsumoto, T., Kato, H., Makino, T., Ogura, M., Takeuchi, D., Yamasaki, S., Inokuma, T., Tokuda, N.  
Applied Physics Letters  
Volume 114, Issue 24, 17 June 2019, Article number 242101
3. High-Rate Growth of Single-Crystalline Diamond (100) Films by Hot-Filament Chemical Vapor Deposition with Tantalum Filaments at 3000 °C  
Tabakoya, T., Kanada, S., Wakui, Y., Takamori, Y., Yamada, T., Nagai, M., Kojima, Y., Ariyada, O., Yamasaki, S., Nebel, C.E., Matsumoto, T., Inokuma, T., Tokuda, N.  
Physica Status Solidi (A) Applications and Materials Science  
Volume 216, Issue 21, 1 November 2019, Article number 1900244

### <著書・編書>

1. Homoepitaxial diamond growth by plasma-enhanced chemical vapor deposition  
単著, Tokuda, Norio, Topics in Applied Physics, 2019

### <特許>

1. ダイヤモンド基板およびその製造方法、徳田規夫・松本翼・野口仁、出願日2019/11/18
2. ダイヤモンド基板およびその製造方法、徳田規夫・松本翼・野口仁、出願日2019/12/23

### <外部資金>

1. 科学研究費 基盤研究B 「低損失縦型ダイヤモンドパワーMOSFET」 徳田規夫（研究代表者），平成29-31年 ， 9,700千円（直接経費）
2. 科学研究費 挑戦的研究（萌芽） 「ダイヤモンドを用いた革新的アンモニア合成法の開発」， 徳田規夫（研究代表者），平成29-31年 ， 5,000千円（直接経費）
3. 科学研究費 基盤研究 B 「強誘電体の巨大分極を利用した超低損失ダイヤモンドパワーFETの創出」， 川江健（研究代表者），徳田規夫（研究分担者），平成29-31年 17,940千円
4. 科学研究費 基盤研究A 「ダイヤモンド表面核スピン格子を用いた室温量子シミュレータの基盤構築」， 山崎聡（研究代表者）徳田規夫（研究分担者），平成30-令和2年 平成31年3,700千円（直接経費）,平成30年5,000千円（直接経費）
5. 科学研究費 国際共同研究強化A 「ダイヤモンドパワーエレクトロニクスの創成」 ， 徳田規夫（研究代表者）， 11,500千円（直接経費）,平成30-令和3年
6. NEDO未踏チャレンジ2050「パワーデバイスの技術革新」， 松本翼（研究代表者）， 令和元-5年（最長）,100,000千円（間接経費込み最大）
7. 科学研究費 若手研究「窒素ドーピング技術を用いた超低損失反転層ダイヤモンドMOSFETの開発」,松本翼（研究代表者）,平成31-令和2年, 3,300千円（直接経費）

### <受賞等>

第3回薄膜・表面物理分科会論文賞、松本翼・徳田規夫・山崎聡・猪熊孝夫

### <共同研究>

企業

3件

## ナノ計測グループ

### <スタッフ>

グループリーダー      准教授      浅川 雅

### 【研究概要】

ナノ計測グループではさまざまなナノマテリアルの構造・物性・機能の定量評価や、原子・分子スケールの微視的理解まで新規ナノマテリアルの創出に資する分析手法の開発を目指している。特に液中で原子分解能を有する原子間力顕微鏡 (Atomic Force Microscopy: AFM) を中心に開発・応用展開を進めており、固液界面現象(触媒反応、分子吸着、結晶成長など)の原子・分子スケールの理解を大幅に進展させて、次世代材料の設計に有用な知見を得ることが目標である。この目標を達成するために、まず液中原子分解能 AFM の再現性・定量性を大幅に向上し、これまで取得困難であった原子・分子スケール情報を獲得することを目指して、AFM 探針の精密設計に取り組んでいる(課題①)。また固液界面に存在する溶媒和構造などの界面構造が分子間相互作用やどのような影響を与えているのか理解するために、材料表面と探針間の相互作用計測に取り組んでいる(課題②)。さらに表面・界面を精密に分子設計し、構造・機能を発現させるための方法論を確立することを目指している(課題③)。表面・界面における分子集合体をナノサイズの建築物(アーキテクチャ)として捉え、これを自在に設計・建築する「分子ナノアーキテクチャ界面」という概念を着想した。特に物理的・化学的刺激を引き起こす外場を駆使した自在な分子表面・界面のナノ分子集合体の精密・自在な建築を実現する方法論を確立する。これらの取り組みを通して「分子ナノアーキテクチャ界面」の概念を深化させて、表面・界面の分子スケール設計を実現できる新しい学問領域を切り開く。

### 【研究業績】

#### <発表論文>

1. Yamamoto, S.; Ohta, A.; Hossain, F.; Anjani, G.; Asakawa, H.; Asakawa, T. Solubilization of Genistein in Phospholipid Vesicles and Their Antioxidant Capacity. *J. Oleo Sci.* **2019**, 68 (1), 61–66.
2. Saga, Y.; Kawano, K.; Otsuka, Y.; Imanishi, M.; Kimura, Y.; Matsui, S.; Asakawa, H. Selective Oxidation of B800 Bacteriochlorophyll a in Photosynthetic Light-Harvesting Protein LH2. *Sci. Rep.* **2019**, 9 (1), 3636.
3. Sakamoto, H.; Koto, A.; Takamura, E.-I.; Asakawa, H.; Fukuma, T.; Satomura, T.; Suye, S.-I. Development of Biofuel Cell Using a Complex of Highly Oriented Immobilized His-Tagged Enzyme and Carbon Nanotube Surface Through a Pyrene Derivative. *J. Nanosci. Nanotechnol.* **2019**, 19 (6), 3551–3557.

4. Asakawa, T.; Fujii, A.; Yoneda, N.; Ohta, A.; Asakawa, H. Enhanced Aggregation of Stimuli Responsive Surfactants by Esterolytic Reactions. *J. Oleo Sci.* **2019**, 68 (6), 573–580.
5. Wada, Y.; Shinohara, K.-I.; Asakawa, H.; Matsui, S.; Taima, T.; Ikai, T. One-Step Synthesis of One-Dimensional Supramolecular Assemblies Composed of Helical Macromolecular Building Blocks. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141 (35), 13995–14002.
6. 浅川雅、液中超解像原子間力顕微鏡を用いた固液界面現象の直接観察、C & I Commun (日本化学会コロイドおよび界面化学部会誌)

#### <外部資金>

1. 「科研費・国際共同研究加速基金(国際共同研究強化)」, 「多角的計測・計算の連携による界面分子鎖の構造・物性に関する分子論的理解」, 浅川雅, 代表, 2017–2020, 7,800 千円
2. 「科研費・若手研究(B)」, 「3次元走査型 AFM による界面分子鎖の立体構造・ダイナミクス実空間計測」, 浅川雅, 代表, 2017–2019, 3,400 千円
3. 「科研費・基盤研究(A)」, 「3次元空間イメージングによるキラル分子・高分子の革新的解析・分離手法の開拓」, 浅川雅, 代表, 2019–2022, 35,700 千円
4. 「物質・デバイス領域共同研究拠点・基盤共同研究」, 「探針先端に固定化した機能性分子の配向性・ダイナミクスの1分子スケール評価」, 浅川雅, 代表, 2019, 100 千円

#### <受賞等>

1. 文部科学大臣表彰 若手科学者賞 (浅川雅)
2. 第17回ホスト-ゲスト・超分子化学シンポジウム、優秀ポスター賞 (波多野、M1)

#### <共同研究>

学内

非公開

学外

非公開



5. J. Puebla, F. Auvray, N. Yamaguchi, M. Xu, S.Z. Bisri, Y. Iwasa, F. Ishii, and Y. Otani, Photoinduced Rashba Spin-to-Charge Conversion via an Interfacial Unoccupied State, Phys. Rev. Lett. 122, 256401(2019).
6. M.A.U. Absor and F. Ishii, Intrinsic persistent spin helix state in two-dimensional group-IV monochalcogenide MX monolayers (M=Sn or Ge and X=S, Se, or Te), Phys. Rev. B 100, 115104(2019).
7. T.B. Prayitno and F. Ishii, First-principles Study of Spiral Spin Density Waves in Monolayer MnCl<sub>2</sub> Using Generalized Bloch Theorem, J. Phys. Soc. Jpn. 88, 104705-1--6 (2019).
8. M.N. Manaf, S. Minami, F. Ishii and M. Saito, First-principles calculation of anomalous muonium in silicon: origin of the negative Fermi contact interaction constant, Jpn. J. Appl. Phys. 58, 081008 (2019).
9. H. Isshiki, K. Kondou, S. Takizawa, K. Shimose, T. Kawabe, E. Minamitani, N. Yamaguchi, F. Ishii, A. Shiotari, Y. Sugimoto, S. Miwa and Y. Otani, Realization of Spin-dependent Functionality by Covering a Metal Surface with a Single Layer of Molecules, Nano Lett. 19, 7119(2019).

#### <外部資金>

1. 「日本学術振興会科学研究費 基盤研究(C)」, 「第一原理手法による異常量子輸送を活用した熱電変換ナノ物質デザイン」, 石井史之 (代表), 2016年4月1日-2021年3月31日, 3600千円 (直接経費)
2. 「日本学術振興会科学研究費 基盤研究(B)」, 「最適な分子運動空間構築に基づいた高プロトン伝導材料の開発」, 石井史之 (分担), 2019年4月1日-2022年3月31日, 3000千円 (直接経費)
3. 「文部科学省 科学研究費 新学術領域 公募研究」, 「ナノスケールのスピン構造が誘起するトポロジカル熱電変換物質デザイン」, 石井史之 (代表), 2018年4月1日-2020年3月31日, 6000千円 (直接経費)
4. 「文部科学省 科学研究費 新学術領域 公募研究」, 「第一原理手法によるナノスピン変換物質デザイン」, 石井史之 (代表), 2017年4月1日-2019年3月31日, 2000千円 (直接経費)

#### <共同研究>

##### 学内

1. 「最適な分子運動空間構築に基づいた高プロトン伝導材料の開発」, 水野元博(代表者), 石井史之, 山口直也

##### 学外

1. 「二次元物質におけるスピン分裂」石井史之 (代表者), M.A.U. Absor (ガジヤマダ大学)

<その他特記事項>

1. プレスリリース「単極子を制御できる新たな物質 ―高温で量子スピンアイスとして振る舞う物質を理論設計・解析―」  
<https://www.kanazawa-u.ac.jp/rd/64554>  
EE Times Japanに掲載。
2. プレスリリース「銅に色素を塗るだけでスピン変換機能を発現」  
<https://www.kanazawa-u.ac.jp/rd/71439>  
北國新聞に掲載。