



金沢大学ナノマテリアル研究所 年報 2020 年

Annual report

Nanomaterials Research Institute

Kanazawa University

目次

新規材料開発グループ P1-2

創エネデバイス開発グループ P3-5

省エネデバイス開発グループ P6-8

ナノ計測グループ P9-10

理論・計算科学グループ P11-12

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。より具体的には超分子の平衡を利用した刺激応答性エラストマーの開発、有機金属構造体-高分子複合体によるガス分離膜材料の開発を指向し研究を行っている。

規則正しい結晶構造・周期構造を持つ安定な構造体でありながら蒸気にさらす、擦るなどの極めて弱いマクロな刺激で容易に構造変換や相転移を起こす新奇物質群「ソフトクリスタル」の開発、及び機能発現のメカニズム解明を行っている。

<2020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。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 (*ACS Appl. Polym. Mater.* **2**, 1561-1568 (2020), *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 051008 (2020))。

固体高分子エラストマーを媒体とした機能性マテリアルの開発に向けた知見が得られつつある。また、有機金属構造体-高分子複合体に関する研究に関して、外部資金の獲得にも成功した (第12回北陸銀行若手研究者助成金)。さらに学外の共同研究者とともに“三重項-三重

項消滅に基づくフォトンアップコンバージョンを利用した太陽電池の高効率化”に関する論文発表 (*ChemPhotoChem*, **2020**, *4*, 5271-5278.)も行った。蒸気に応答して可逆的に色に変化するベイポクロミズム結晶のメカニズム解明に取り組んだ。

<異分野融合研究の推進状況>

新学術創成研究機構セルバイオノミクスユニット(UL:Richard Wong, 若手 PI: 羽澤勝治)、物質化学専攻化学コース西山助教との共同研究「液液相分離のマイクロな環境を評価可能な生体プローブの開発」を進めている。液液相分離は細胞内のタンパク質が凝集（相分離）する現象のことで、生じた凝集体は生化学反応の場として極めて重要な役割を果たすことが近年注目されており、生化学の分野でホットトピックとなっている。液液相分離で生じたたんぱく質凝集体が生化学反応に及ぼす影響を知るためには、マイクロな環境（粘度や極性などの物性）を評価する必要があるが、その物性を評価するためのツールは無い。本共同研究では本ユニットがマイクロな物性を評価可能な蛍光プローブの合成を担当し、西山が分光学的評価、羽澤が細胞内評価を行い、液液相分離のマイクロ物性の解明に向けて研究を進めている。

【 研究業績 】

<発表論文>

1. Hori, Y.; Suetake, T.; Shiota, Y.; Yoshizawa, K.; Shigeta, Y.; Ida, T.; Mizuno, M. “Local Structures and Dynamics of Imidazole Molecules in Poly(vinylphosphonic acid)-Imidazole Composite Investigated by Molecular Dynamics” *ACS Appl. Polym. Mater.* **2020**, *2*, 1561-1568.
2. Sunairi, Y.; Dekura, S.; Ueda, A.; Ida, T.; Mizuno, M.; Mori, H. “Anhydrous Purely Organic Solid-State Proton Conductors: Effects of Molecular Dynamics on the Proton Conductivity of Imidazolium Hydrogen Dicarboxylates” *J. Phys. Soc. Jpn.* **2020**, *89*, 051008 (2020).
3. Kinoshita, M.; Sasaki, Y.; Amemori, S.; Harada, N.; Hu, Z.; Liu, Z.; Ono, L. K.; Qi, Y.; Yanai, N.; Kimizuka, N. “Photon Upconverting Solid Films with Improved Efficiency for Endowing Near-Infrared Sensitivity to Perovskite Solar Cells” *ChemPhotoChem*, **2020**, *4*, 5271-5278.

<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 代表者, 令和元年度～令和3年度, 総額 1,350 万円
2. 新学術領域研究 (研究領域提案型) 「ソフトクリスタル」水野元博 代表者, 令和2年度～令和3年度, 総額 390 万円
3. 科学研究費補助金 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, 代表者, 平成30-令和2年度, 総額 4,030 千円
4. 北陸銀行若手研究者助成金 (第12回), 「高分子エラストマー空間を利用した分子集合体形成」, 雨森翔悟, 代表者, 令和2年度, 総額 500 千円

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
	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。

<2020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高性能化と高耐久性化を達成し、論文投稿を行った。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、論文として成果をまとめた。さらに、会社との共同研究や電情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無機材料の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、分子間相互作用を活用した新規長波長吸収材料開発を継続して行っている。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、高分子末端と太陽電池特性の関係を明らかにした。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継続して進めている。

【 研究業績 】

< 発表論文 >

1. M. Shahiduzzaman*, L. Wang*, S. Fukaya, E. Y. Muslih, A. Kogo, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, K. Tomita, J. M. Nunzi, T. Miyasaka and T. Taima*, “Ionic Liquid Assisted-MAPbI₃ Nanoparticle-Seeded Growth for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells”, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2021 (Accepted).
2. M. Shahiduzzaman*, E. Y. Muslih, A. K. M. Hasan, L. Wang, S. Fukaya, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, M. Akhtaruzzaman, J. M. Nunzi, and T. Taima*, “The Benefits of Ionic Liquids for the Fabrication of Champion Perovskite Photovoltaics”, *Chemical Engineering Journal*, 2021, 411, 128461.
3. L. Wang*, M. Shahiduzzaman*, S. Fukaya, E. Y. Muslih, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, K. Tomita, O. Lebel, J. M. Nunzi, and T. Taima*, “Low-cost Molecular Glass Hole Transport Material for Perovskite Solar Cells”, *Japanese Journal of Applied Physics*, 2021 (doi.org/10.35848/1347-4065/abde28.).
4. M. Shahiduzzaman*, M. I. Hossain, S. Visal, T. Kaneko, W. Qarony, S. Umezu, K. Tomita, S. Iwamori, D. Knipp, Y. H. Tsang, M. Akhtaruzzaman, J. M. Nunzi, T. Taima, and M. Isomura “Spray Pyrolyzed TiO₂ Embedded Multi-layer Front Contact Design for High-efficiency Perovskite Solar Cells,” *Nano-Micro Letters*, 2021, 13, 36.
5. M. Shahiduzzaman*, T. Horikawa, T. Hirayama, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, J. M. Nunzi and T. Taima*, “Switchable Crystal Phase and Orientation of Evaporated Zinc Phthalocyanine Films for Efficient Organic Photovoltaics,” *The Journal of Physical Chemistry C*, 2020, 124, 39, 21338.
6. N. Ohtsuka, M. Nakano, S. Nakagawa, M. Shahiduzzaman, M. Karakawa, T. Taima, and M. Minoura “Naphthalene diimide-incorporated helical thienoacene: a helical molecule with high electron mobility, good solubility, and thermally stable solid phase,” *Chemical Communications*, 2020, 56, 12343.
7. M. Shahiduzzaman*, D. Kuwahara, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, J. M. Nunzi and T. Taima*, “Low-Temperature Processed TiO_x Electron Transport Layer for Efficient Planar Perovskite Solar Cells,” *Nanomaterials*, 2020, 10, 1676.
8. T. Furuyama, S. Uchiyama, T. Chikamatsu, T. Horikawa, H. Maeda, M. Segi, H. Takahashi and T. Taima “Temperature-dependent changes in the molecular orientation and visible color of phthalocyanine films,” *RSC Advances*, 2020, 10, 31348.
9. M. Shahiduzzaman*, S. Fukaya, E. Y. Muslih, L. Wang, M. Nakano, M. Akhtaruzzaman, M. Karakawa, K. Takahashi, J. M. Nunzi and T. Taima*, “Metal Oxide Compact Electron Transport Layer Modification for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells,” *Materials*, 2020, 13, 2207.
10. M. Karakawa, K. Suzuki, T. Kuwabara, T. Taima, K. Nagai, M. Nakano, T. Yamaguchi, K. Takahashi “Factors contributing to degradation of organic photovoltaic cells,” *Organic Electronics*, 2020, 76, 105448.

11. M. Shahiduzzaman*, A. Kulkarni, S. Visal, L. Wang, M. Nakano, M. Karakawa, K. Takahashi, S. Umezu, A. Masuda, S. Iwamori, M. Isomura, T. Miyasaka, K. Tomita, and T. Taima*, “Single-Phase Brookite TiO₂ Nanoparticle Bridge Enhances the Stability of Perovskite Solar Cells,” *Sustainable Energy Fuels*, 2020, 4, 2009.
12. M. 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 Identified using Infrared Reflection Absorption Spectroscopy,” *Journal of Molecular Systems Design & Engineering*, 2020, 5, 559.
13. K. Shimada, M. Shahiduzzaman, and T. Taima*, “Platinum Leaf Counter Electrodes for Dye-sensitized Solar Cells,” *Japanese Journal of Applied Physics*, 2020, 59, SDDC07.

<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（令和2年度）代表：石島達夫、研究分担者：當摩哲也
3. 基盤研究（B）”大気下駆動可能な極長寿命ペロブスカイト太陽電池の実現とそのメカニズム解明” 代表：當摩哲也 分担：JAIST 大平圭介、産総研 宮寺哲彦、Md. Shahiduzzaman
4. 株式会社 ハーベス、共同研究（令和2年度），研究代表者：辛川誠
5. 令和2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>

学外

1. 合同資源との共同研究「Sn価数の違いの検討」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

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. Formation of U-shaped diamond trenches with vertical 111 sidewalls by anisotropic etching of diamond (110) surfaces
Nagai, M., Nakamura, Y., Yamada, T., Tabakoya, T., Matsumoto, T., Inokuma, T., Nebel, C.E., Makino, T., Yamasaki, S., Tokuda, N.
Diamond and Related Materials
Volume 103, March 2020, Article number 107713
2. Temperature dependence of diamond MOSFET transport properties
Traoré, A., Kato, H., Makino, T., Matsumoto, T., Tokuda, N., Ogura, M., Kato, Y., Takeuchi, D., Yamasaki, S.,
Japanese Journal of Applied Physics
Volume 59, Issue SG, 1 April 2020, Article number SGGD19
3. Insight into Al₂O₃/B-doped diamond interface states with high-temperature conductance method
Zhang, X., Matsumoto, T., Sakurai, U., Makino, T., Ogura, M., Sometani, M., Yamasaki, S., Nebel, C.E., Inokuma, T., Tokuda, N.
Applied Physics Letters
Volume 117, Issue 9, 31 August 2020, Article number 092104

4. Energy distribution of Al₂O₃/diamond interface states characterized by high temperature capacitance-voltage method
Zhang, X., Matsumoto, T., Sakurai, U., Makino, T., Ogura, M., Yamasaki, S., Sometani, M., Okamoto, D., Yano, H., Iwamuro, N., Inokuma, T., Tokuda, N.
Carbon
Volume 168, 30 October 2020, Pages 659-664

<著書・編書>

1. Step-edge growth and doping of diamond、共著、Tokuda, Norio、Semiconductors and Semimetals Volume 103, Pages 57 - 72、2020年

<特許>

1. ダイヤモンド、徳田規夫・長井雅嗣、出願2020/1/21（日本）
2. ダイヤモンド基板及びダイヤモンド自立基板、徳田規夫・猪熊孝夫・松本翼・野口仁・白井省三・牧野俊晴・小倉政彦・加藤宙光・川島宏幸・桑原大輔・山崎聡・竹内大輔、出願日2020/1/21/（日本）
3. 半導体装置、松本翼・徳田規夫・猪熊孝夫・加藤宙光・小倉政彦・牧野俊晴・山崎聡、出願2020/4/14（日本）
4. ダイヤモンドの表面平坦化処理方法、坂内和斗・徳田規夫・猪熊孝夫・松本翼・長井雅嗣・苺谷平、出願2020/5/28（日本）
5. ダイヤモンドの加工方法、徳田規夫・猪熊孝夫・松本翼・苺谷平・長井雅嗣・中村勇斗・坂内和斗・牧野俊晴・加藤宙光・山崎聡、出願2020/5/28（日本）
6. 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2020/11/13（台湾）
7. 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2020/11/16（US）
8. 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2020/11/17（中国）
9. 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2020/11/18（EP）
10. 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2020/11/18（韓国）

<外部資金>

1. 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）
2. 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
3. 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）

4. 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）
5. JST A-STEP の産学共同育成型、「半導体ダイヤモンドウェハの革新的製造技術の開発」、徳田規夫、令和2年－5年、直接経費総額 4,500 千円
6. 科学研究費 若手研究、「ダイヤモンド反転型 MOSFET におけるチャンネル移動度の制約因子の解明」、張 旭芳、令和2－4年、2,400 千円

<共同研究>

企業

4件

<その他特記事項>

金沢大学 プレス 2020年12月8日

「世界で初めてダイヤモンド-on-シリコン技術を用いてヘテロエピタキシャルダイヤモンド反転層チャンネルMOSFETを開発」

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

特任助教 森本 将行 (2020/07/01 着任)

【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. 浅川雅、液中で分子の構造・動きを観察する原子間力顕微鏡: 液中超解像 AFM と高速 AFM の技術発展 (特集 分子を見る最前線: 測定手法の革新と “新” 化学の発見)、*化学と工業*、**2020**、73(1)19–21.
2. Ohta, A.; Hossain, F.; Asakawa, H.; Asakawa, T. Study of the Antioxidative Properties of Several Amino Acid - type Surfactants and Their Synergistic Effect in Mixed Micelle. *J. Surfactants Deterg.* **2020**, 23 (1), 99–108.
3. Asakawa, H.; Matsui, S.; Trinh, Q. T.; Hirao, H.; Inokuma, Y.; Ogoshi, T.; Tanaka, S.; Komatsu, K.; Ohta, A.; Asakawa, T.; Fukuma, T. Chiral Monolayers with Achiral Tetrapod Molecules on Highly Oriented Pyrolytic Graphite. *J. Phys. Chem. C* **2020**, 124 (14), 7760–7767.

4. Yang, L.; Igarashi, T.; Cao, Y.; Holmström, E.; Hirata, K.; Asakawa, H.; Ohno, T.; Fukuma, T.; Foster, A. S. Photo-Sensitive 2D Arrangement of $-OH/H_2O$ on Brookite $TiO_2(210)$. *J. Phys. Chem. C* **2020**, 124 (35), 19091–19100.
5. Saga, Y.; Otsuka, Y.; Funakoshi, D.; Masaoka, Y.; Kihara, Y.; Hidaka, T.; Hatano, H.; Asakawa, H.; Nagasawa, Y.; Tamiaki, H. In Situ Formation of Photoactive B-Ring Reduced Chlorophyll Isomer in Photosynthetic Protein LH2. *Sci. Rep.* **2020**, 10 (1), 19383.

<著書・編書>

該当なし

<特許>

該当なし

<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・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, 分担, 2019–2022, 35,700 千円
3. 「科研費・基盤研究(B)」, 「3次元走査型 AFM による局所水和計測と疎水性相互作用の増強・抑制メカニズム解明」, 浅川雅, 代表, 2020–2023, 13,900 千円

<受賞等>

1. 高分子学会北陸支部若手会・ポスター賞 (高野、M2)

<共同研究>

学内

非公開

学外

非公開

理論・計算科学グループ

<スタッフ>

グループリーダー 准教授 石井 史之
特任助教 山口直也
博士研究員 シヤリアティ リフキィ

【研究概要】

理論・計算科学グループでは、物質中の電子状態が重要となる磁性・熱電性等の量子物性に注目し、相対論的量子力学と統計力学を基盤とした理論物理学・物性理論の手法とスーパーコンピュータを用いた大規模シミュレーション・計算科学の手法を駆使して、新たな機能物性の開拓や既知の機能物性の起源解明および高機能な新物質の探索を目指している。具体的には、創・省エネルギー材料として有望な熱電変換効果、光起電力効果、スピン流電流変換効果を示す物質系について、密度汎関数法に基づいた第一原理電子状態計算による研究を進めている。

これらの先導的研究を推進するには、電子状態計算の手法、第一原理バンド計算手法の開発が重要となる。我々のグループでは、主に国内で開発され、国際的に共同開発に発展している電子状態計算オープンソースソフトウェアである OpenMX の開発と公開に参画しており、第一原理バンド計算手法の開発を進めている。

<2020年の研究成果, 進展状況>

フレキシブルなエネルギー材料として期待されている磁気熱電効果（異常ネルンスト効果）を示す物質について主に取り組んだ。東京大学・理研のグループと共同で、室温・ゼロ磁場で世界最高の磁気熱電効果を実現する鉄系材料を予測・実証し、Nature に発表をおこない、プレスリリースを実施し、新聞等も報道された。トポロジカルな電子構造起源の熱電効果について、より詳細に議論した論文を報告した。また、継続して開発を進めてきた効率的に異常ホール効果、異常ネルンスト効果を計算が可能な第一原理バンド計算手法の開発に成功し、二次元物質に応用した論文を発表した。また、熱伝導率を磁性熱電材料について見積もる研究を実施し、論文として発表した。

【研究業績】

<発表論文>

1. R. Syariati, S. Minami, H. Sawahata, and F. Ishii, First-principles study of anomalous Nernst effect in half-metallic iron dichloride monolayer, APL Materials 8, 041105 (2020).
2. A. Sakai, S. Minami, T. Koretsune, T. Chen, T. Higo, Y. Wang, T. Nomoto, M. Hirayama, S. Miwa, D. Nishio-Hamane, F. Ishii, R. Arita and S. Nakatsuji, Iron-based binary ferromagnets for transverse thermoelectric conversion, Nature 581, 53-57 (2020).

3. A. Hori, S. Minami, M. Saito, and F. Ishii, First-principles calculation of lattice thermal conductivity and thermoelectric figure of merit in ferromagnetic half-Heusler alloy CoMnSb, Appl. Phys. Lett., 116, 242408 (2020).
4. M. Nur, N. Yamaguchi, and F. Ishii, Simple Model for Corrugation in Surface Alloys Based on First-Principles Calculations, Materials 13, 4444 (2020).
5. S. Minami, F. Ishii, M. Hirayama, T. Nomoto, T. Koretsune, and R. Arita, Enhancement of the transverse thermoelectric conductivity originating from stationary points in nodal lines, Phys. Rev. B 102, 205128(2020).

<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. 「日本学術振興会科学研究費 若手研究」, 「光-スピン流-電流変換物質の第一原理計算」, 山口直也 (代表), 2020年4月1日-2023年3月31日, 2900千円 (直接経費)
4. 「文部科学省 科学研究費 新学術領域 公募研究」, 「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)

<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「室温・ゼロ磁場で世界最高の磁気熱電効果を実現する鉄系材料」
<https://www.kanazawa-u.ac.jp/rd/79295>
 北國新聞, Web産業新聞 (日刊産業新聞), EE Times Japan, 電波新聞に掲載。