

令和 3 年 6 月 11 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2016～2020

課題番号：16K04875

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）Thermoelectric nanomaterials design utilizing anomalous quantum transport by first-principles methods

研究代表者

石井 史之（Ishii, Fumiyuki）

金沢大学・ナノマテリアル研究所・准教授

研究者番号：20432122

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,600,000円

研究成果の概要（和文）：ナノサイズ化・低次元化によって熱電変換効率が向上することは以前から知られていたが、本研究では低次元化によって現象として顕著にあらわれる、量子異常効果を活用した熱電変換効率の向上をめざした。二次元水素原子モデル系において、Skyrmion結晶の第一原理計算をおこない、巨大な異常ネルンスト効果を示しうることを明らかにした。酸化物EuOについて超薄膜を仮定した小さなSkyrmion結晶モデルについても同様の研究をおこなった。さらにホイスラー合金系のバルク物質等について、大きな異常ネルンスト効果がk空間でエネルギー縮退した連なった固有値群であるノードラインが起源であることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

排熱等を有効利用するための工学的応用の基礎原理として、結晶の端に温度差（温度勾配）を与えた場合に電子が流れ、結晶の内部で片方に偏りができることによって電位差が生じる熱電効果が知られている。我々は磁性体で起こる熱電効果について調べた。磁場がある場合に温度勾配で誘起された電流に寄与する電子の軌道が曲げられて起こるホール効果（ネルンスト効果と呼ばれる）が、磁性体内部では磁場が無い場合にも生じ（異常ネルンスト効果と呼ぶ）、温度差を与えた方向とは直交する方向に電位差が生じるため、広い面積の熱源に応用でき、幅広い応用が期待されている。この現象は原子層物質、トポロジカル物質で顕著であることを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：It has long been known that the thermoelectric conversion is improved by making the nanosize and lower dimensions, but in this research, we aimed to improve the thermoelectric efficiency by utilizing the quantum anomalous effect, especially remarkably by lowering the dimensions. In a two-dimensional hydrogen model system, by using first-principles methods, we calculated the Skyrmion crystal that can show a huge anomalous Nernst effect. Furthermore, for the Heusler alloys, it was clarified that the large anomalous Nernst effect is caused by the nodal line, which is a series of eigenvalue groups with energy degeneracy in k-space.

研究分野：計算物性物理学

キーワード：熱電効果 異常ホール効果 異常ネルンスト効果 第一原理計算 スキルミオン ナノマテリアル 磁性 熱電変換材料

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

低消費電力デバイス実現に向けて、電子のスピンを自由度を利用するスピントロニクスの研究が重要になってきている。基礎的な観点では、ナノ物質において、電場でスピンを制御する学理が構築されつつある。我々はグラフェンナノリボン (NR)、二層グラフェン NR、グラファイト NR について、電界効果ドーピングで、エッジ間のスピンの反強磁性から強磁性までキャリアドーピング量で連続的に制御しうる可能性を提案し、非自明なノンコリニア磁性相の出現を予言している (Nano. Lett. 2009, Nature Physics 誌 Research Highlight, Appl. Phys. Lett. 2014)。スピんに依存した伝導現象の起源を明らかにするには、波数空間のスピンの構造が重要となる。角度分解光電子分光の技術的発展により、物質表面でのナノスケールでの電場と重い原子核のポテンシャルに起因したスピン軌道相互作用によって起こる Rashba 効果 (エネルギー準位のスピン分裂と波数空間でのスピン渦の発生) が多くの系で測定されており、波数空間でのスピンの構造が明らかになってきている。我々は Bi 超薄膜 (Jpn. J. Appl. Phys. 2013)、酸化物バルク (Appl. Phys. Express 2014)、酸化物ナノ薄膜 (Appl. Phys. Express 2015)、酸化物ナノ界面 (Mol. Simul. 2015)、トポロジカル絶縁体表面 (Mol. Simul. 2015) について、波数空間の多彩なスピン構造を第一原理計算により明らかにし、従来からよく知られている Rashba 効果に加え、スピン寿命が長時間になる”永久スピン螺旋状態”を見出している。以上のように実空間と波数空間でのスピン構造を電場・ナノ構造化で制御できれば、ナノ物質における輸送現象を制御することが可能になると期待される。

電子デバイス等の微小な排熱を有効利用する、エネルギーハーベスティングの研究においても、スピンを有効利用する研究が盛んになってきている。例えば、温度勾配によってスピンの蓄積がおこる、スピンゼーベック効果 (Uchida et al., Nature 2008) を用いて、デバイス中の排熱を有効利用することも提案されている。しかし、スピンゼーベック効果を熱電発電に利用するためには、スピン流を電流に変換する必要があり、(逆)スピンホール係数の大きな物質を探索する必要があるため、まだ高効率な熱電発電変換物質としての可能性は未知である。他方、我々は 2013 年より、ゼーベック係数に異常ホール係数が寄与する可能性についてモデル計算により調べてきた。特に、ナノ界面 (半導体ヘテロ界面) を想定した Rashba ハミルトニアンに Zeeman 項を加えたモデル Bi_2Te_3 などのトポロジカル表面を想定した Dirac ハミルトニアンに Zeeman 項を加えたモデルについて詳しく調べ、現実的なモデルパラメータ領域で、数十%程度の寄与があることを明らかにした。これらのモデル計算より、異常ホール係数が大きい系において、巨大なゼーベック係数もしくは異常ネルンスト係数を示す可能性があることが明らかになり、近年盛んに研究がされているトポロジカル絶縁体表面、ワイル半金属、スカーミオン物質などを低次元化したナノ物質(大きな(量子)異常ホール効果が期待される系。スカーミオン系では巨大な異常ホール効果が理論的に予言されており (Hamamoto et al., PRB2015)、我々も第一原理計算で再現している) は巨大な熱電能を示すと期待される。

2. 研究の目的

本研究の目的は密度汎関数法に基づく第一原理計算手法によって非自明な実空間・波数空間のスピン構造が誘起する異常な量子輸送現象 (異常ホール効果, 異常ネルンスト効果) を活かして、熱電変換効率の高いナノ物質をデザインすることである。近年これまで考慮されていなかったスピンを熱電発電に活かそうという機運が高まっている。本研究ではナノ界面、ナノ薄膜における伝導現象において重要となる低次元性に起因する量子異常効果を活かし、新たなアイデアで高い熱電変換効率を持つナノ物質をデザインすることを目的とする。

3. 研究の方法

「非自明なスピン構造が誘起する異常な量子輸送現象を活かして、熱電変換効率の高いナノ物質をデザインする」という研究目的を達成するために、次の 3 つのサブテーマを計画する。巨大異常ホール効果, 熱電能の探索を

(A)スカーミオン秩序を示す系のナノ薄膜, (B)非自明なスピン構造をもつナノ界面系,(C)磁性トポロジカル物質ナノ薄膜, の 3 種の物質群についておこなう。

第一原理シミュレーションの手法は我々がこれまで開発に加わってきており、物理量計算などの拡張が容易である高速な擬ポテンシャル LCPAO 法 (OpenMX) を用いておこなう。熱電変換効率の見積りのみならず、実験との比較、新物質デザインまでおこなう。

4. 研究成果

①Fe 化合物について、大きな異常ネルンスト効果を発見し、その起源が運動量空間で固有エネルギーが縮退したノーダルラインが複雑に絡み合ったノーダルウェブ構造およびその停留点であることを明らかにした。

②電子スピンの形成する渦構造の一種“スキルミオン”が巨大な熱電効果(異常ネルンスト効果)を生む可能性を計算機シミュレーションにより明らかにした。また、Eu0 原子層 (単層) のスキ

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

ルミオン結晶では、電子ドープで量子化された異常ホール効果が生ずるトポロジカルに非自明な Chern 数が 2 である Chern 絶縁体になることを明らかにした。

③トポロジカル絶縁体を特徴づけるトポロジカル指数である Z_2 不変量およびベリー曲率, Chern 数を計算する方法をオープンソースプログラムである OpenMX に実装し, トポロジカル絶縁体であることが報告されている Bi 二原子層に電場を掛けて生じるトポロジカル相転移が生じること, その歪み依存性を明らかにした。

④磁気モーメントがノンコリニア (非共線) となる磁気構造の系について物質デザインをおこなった。磁気フラストレーションを示すスピネル型 Ir 酸化物について, 基板制御を仮定した計算から, 量子スピン液体状態 (絶対零度でも量子揺らぎでスピンの秩序化しない量子液体状態) が実現される可能性のある物質デザインをおこなった。

⑤二次元物質, 酸化物界面等において, 面内における一方向への鏡映対称性の破れ (電気分極) によって, スピン緩和時間が長時間になると予想される, 運動量空間でのスピンの特殊な構造 (永久スピンらせん) を明らかにし, スピン型電界効果トランジスタ材料としての可能性を明らかにした。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 18件／うち国際共著 3件／うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Syariaty Rifky, Minami Susumu, Sawahata Hikaru, Ishii Fumiyuki	4. 巻 8
2. 論文標題 First-principles study of anomalous Nernst effect in half-metallic iron dichloride monolayer	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 041105-1,6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.5143474	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -
1. 著者名 Onoda Shigeki, Ishii Fumiyuki	4. 巻 122
2. 論文標題 First-Principles Design of the Spinel Iridate Ir2O4 for High-Temperature Quantum Spin Ice	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 067201-1,6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevLett.122.067201	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -
1. 著者名 Mizuta Yo Pierre, Sawahata Hikaru, Ishii Fumiyuki	4. 巻 98
2. 論文標題 Large anomalous Nernst coefficient in an oxide skyrmion crystal Chern insulator	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205125-1,7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.98.205125	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -
1. 著者名 Prayitno Teguh Budi, Ishii Fumiyuki	4. 巻 87
2. 論文標題 Implementation of Generalized Bloch Theorem Using Linear Combination of Pseudo-Atomic Orbitals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 114709-1,9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.87.114709	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Minami Susumu, Ishii Fumiyuki, Mizuta Yo Pierre, Saito Mineo	4. 巻 113
2. 論文標題 First-principles study on thermoelectric properties of half-Heusler compounds CoMSb (M=?Sc, Ti, V, Cr, and Mn)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 032403-1,5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5029907	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Tanaka Yuto, Saito Mineo, Ishii Fumiyuki	4. 巻 57
2. 論文標題 Anisotropic thermoelectric effect on phosphorene and bismuthene: first-principles calculations based on nonequilibrium Green's function theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125201-1,6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.125201	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Yamaguchi Naoya, Ishii Fumiyuki	4. 巻 16
2. 論文標題 First-principles Study of Rashba Spin Splitting at Strained SrTiO ₃ (001) Surfaces	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 360, 363
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2018.360	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Sawahata Hikaru, Yamaguchi Naoya, Kotaka Hiroki, Ishii Fumiyuki	4. 巻 16
2. 論文標題 Electric Field Dependence of Topological Edge States in One-Bilayer Bi(111): A First-Principles Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 427, 430
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/ejssnt.2018.427	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 N. Yamaguchi and F. Ishii	4. 巻 10
2. 論文標題 Strain-induced large spin splitting and persistent spin helix at LaAlO ₃ /SrTiO ₃ interface	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 123003-1,3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/APEX.10.123003	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi, Hiroki Kotaka, Fumiyuki Ishii	4. 巻 57
2. 論文標題 First-principles study of electric-field-induced topological phase transition in one-bilayer Bi(111)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 030309-1,4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.030309	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 F. Ishii and Y.P. Mizuta	4. 巻 6
2. 論文標題 Large Anomalous Nernst Effect in a Skyrmion Crystal	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 28076-1,6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/srep28076	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii	4. 巻 468
2. 論文標題 First-principles study of Rashba effect in ultra-thin bismuth surface alloys	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 688, 690
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2016.09.075	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Moh. Adhib Ulil Absor, Iman Santoso, Naoya Yamaguchi, and Fumiyuki Ishii	4. 巻 101
2. 論文標題 Spin splitting with persistent spin textures induced by the line defect in the 1 T phase of monolayer transition metal dichalcogenides	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155410-1,10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.155410	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Susumu Minami, Fumiyuki Ishii, Motoaki Hirayama, Takuya Nomoto, Takashi Koretsune, and Ryotaro Arita	4. 巻 102
2. 論文標題 Enhancement of the transverse thermoelectric conductivity originating from stationary points in nodal lines	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205128-1,9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.205128	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 M. Nur, N. Yamaguchi, and F. Ishii	4. 巻 13
2. 論文標題 Simple Model for Corrugation in Surface Alloys Based on First-Principles Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials	6. 最初と最後の頁 4444-1,9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ma13194444	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 A. Hori, S. Minami, M. Saito, and F. Ishii	4. 巻 116
2. 論文標題 First-principles calculation of lattice thermal conductivity and thermoelectric figure of merit in ferromagnetic half-Heusler alloy CoMnSb	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 242408-1,5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5143038	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Moh. Adhib Ulil Absor and Fumiyuki Ishii	4. 巻 103
2. 論文標題 Large band splitting with tunable spin polarization in the two-dimensional ferroelectric Ga X Y family (X = Se , Te ; Y = Cl , Br , I)	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 045119-1,10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.045119	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

〔学会発表〕 計55件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 26件)

1. 発表者名 Rifky Syariati, Susumu Minami, Hikaru Sawahata and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles Study of Anomalous Nernst Effect in The 2D Ferromagnetic Half-metal 1T-FeX ₂ (X = Br, Cl)
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi, Susumu Minami and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Implementation of computing anomalous Hall conductivity for high throughput screening of magnetic thermoelectric materials
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山口直也、Chi-Cheng Lee、尾崎泰助、石井史之
2. 発表標題 バンドアンフォールディングを用いたBi/Ag表面合金系におけるラシュバ効果の第一原理的解析
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 電場印加下の誘電体バルクにおけるスピン軌道分裂の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口直也、Chi-Cheng Lee、尾崎泰助、石井史之
2. 発表標題 スピン分解アンフォーディング法による表面ラシュバ状態の解析
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamaguchi, Chi-Cheng Lee, Taisuke Ozaki, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles Study on Effects of Surface Coverage on Spin Splitting in Bi/Ag Surface Alloys
3. 学会等名 The International Summer workShop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations (ISS2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 スピン流-電流変換制御に向けた界面スピン分裂の第一原理計算
3. 学会等名 H30年度ポスト「京」重点課題(7)第3回CDMSI研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles Wannier Function Based Analysis of Rashba States in Ferroelectric Oxides and Bismuth Surface Alloys
3. 学会等名 One-Day Symposium on Spintronic Properties of Graphene and Related 2D Materials (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 電場印加下におけるバルクの第一原理計算と磁性系への応用
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of electric-field induced Z ₂ topological phase transition in strained one-bilayer Bi(111)
3. 学会等名 The 21st Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculation (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 澤端日華瑠, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 Bi薄膜のトポジカル絶縁体相における歪みと電界効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 澤端日華瑠, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 Z2不変量の第一原理計算コードの開発と2原子層Bi(111)への応用
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 堀彰紘, 田中悠斗, 見波将, 石井史之, 斎藤峯雄
2. 発表標題 磁性ハーフホイスラー合金の熱伝導率の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Susumu Minami, Fumiyuki Ishii, Mineo Saito
2. 発表標題 First-principles study on anomalous Nernst effect in Fe ₃ Al and related compounds
3. 学会等名 The 21st Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculation (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Susumu Minami, Fumiyuki Ishii, Mineo Saito
2. 発表標題 First-principles calculations on anomalous thermoelectric effect of ferromagnetic Hustler alloys
3. 学会等名 The International Summer Workshop 2018 on First-Principles Electronic Structure Calculations in ISSP (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 斎藤峯雄
2. 発表標題 強磁性ホイスラー合金における熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ビエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 強磁性ハーフホイスラー化合物CoMnSbにおける熱電特性の第一原理計算
3. 学会等名 H30年度ポスト「京」重点課題(7)第3回CDMSI研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ビエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 ハーフホイスラー型化合物CoMSb (M=Sc,Ti,V,Cr,Mn)における異常ネルンスト効果の第一原理計算
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of Berry-phase-mediated thermoelectric effects
3. 学会等名 The 21st Asian Workshop on First-principles Electronic Structure Calculation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Fumiyuki Ishii, Susumu Minami, Yo Pierre Mizuta, Hikaru Sawahata, Akihiro Hori, Yuto Tanaka and Mineo Saito
2. 発表標題 Berry-phase-mediated Thermoelectric Effects in Magnetic Materials
3. 学会等名 19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yo Pierre Mizuta, Hikaru Sawahata, and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Large anomalous Nernst effect in narrow-gap Chern insulator
3. 学会等名 International Workshop on Computational Design and Discovery of Novel Materials (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of anomalous thermoelectric effects
3. 学会等名 8th Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 杉田 恵, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 酸化物強誘電体/金属界面におけるラッシュバ係数の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見波将, 斎藤峯雄, 石井史之, 粕田浩義, 小口多美夫
2. 発表標題 半導体中ミュオニウムの電子構造計算
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 Bi酸化物並びに貴金属のヘテロ構造におけるラシュバ効果の第一原理計算
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ピエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 ハーフホイスラー型化合物XYSb(X=Sc, Ti, V, Cr, Mn; Y=Fe, Co, Ni)における磁性と熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 第2回CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 Bi界面系におけるスピン軌道相互作用の第一原理計算
3. 学会等名 第2回CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hikaru Sawahata, Yo Pierre Mizuta, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Large Chern number in skyrmion crystals
3. 学会等名 International Symposium on Computational Science 2017 (ISCS2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Teguh Budi Prayitno, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Implementation of Generalized Bloch Theorem for Calculating Magnon Dispersion of Bcc Iron Using both Conventional and Primitive Constraint Scheme Methods
3. 学会等名 International Symposium on Computational Science 2017 (ISCS2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ピエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 ハーフホイスラー型化合物における磁性と熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本金属学会 2017年秋季講演大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 酸化物表面・界面におけるラシュバ係数の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田中悠斗, 斎藤峯雄, 石井史之
2. 発表標題 非平衡グリーン関数法を用いたナノ構造における熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 杉田恵, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 ペロブスカイト型酸化物/貴金属界面におけるラッシュバ効果の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ピエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 Prediction of thermoelectricity in Heusler compounds
3. 学会等名 Satellite Workshop of Kanamori Memorial Symposium -Recent Progress in Materials Science for Spintronics and Energy Applications- (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石井史之
2. 発表標題 First-principles study of thermoelectricity in magnetic materials
3. 学会等名 Satellite Workshop of Kanamori Memorial Symposium -Recent Progress in Materials Science for Spintronics and Energy Applications- (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 杉田恵, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 First-principles calculation of the Rashba effect at the Bi/M (M=Cu, Ag, and Au) interface
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi, Hiroki Kotaka and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of topological phase in two-dimensional Bismuth
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山口直也、杉田恵、石井史之
2. 発表標題 First-principles Study of Rashba Spin Splitting at Surfaces/Interfaces Using Wannier functions
3. 学会等名 The 8th International Symposium on Surface Science (ISSS-8) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ビエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 Anomalous Nernst Effect in Half-Heusler Alloys
3. 学会等名 The 20th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石井史之, 見波将, 水田耀ビエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 ハーフホイスラー合金の表面電子状態と異常熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 第11回物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 杉田恵, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 Bi化合物/貴金属界面の第一原理電子状態計算
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 澤端日華瑠, 山口直也, 小鷹浩毅, 石井史之
2. 発表標題 二次元Biのトポロジカル相図の第一原理計算
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ビエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 ホイスラー合金における熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 First-principles Carrier Function Analysis of Surface Rashba States
3. 学会等名 第3回CDMSI (ポスト「京」重点課題(7))シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hikaru Sawahata, Naoya Yamaguchi and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of topological phase transition in two-dimensional bismuth and its alloys
3. 学会等名 APS March meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見波将, 石井史之, 水田耀ビエール, 斎藤峯雄
2. 発表標題 First-principles study of anomalous thermoelectric effect in CoMSb(M=Sc,Ti,V,Cr,Mn)
3. 学会等名 APS March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 First-principles Wannier Function Approach to Rashba Effect
3. 学会等名 APS March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 水田耀ピエール、石井史之
2. 発表標題 大きな異常熱電効果を示すスキルミオン結晶物質の第一原理的探索に向けて
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 水田耀ピエール、石井史之
2. 発表標題 スキルミオン結晶薄膜における巨大Chern数と異常ネルンスト係数の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 澤端日華瑠， 水田耀ピエール， 石井史之
2. 発表標題 Large Chern number in oxide thin films
3. 学会等名 International workshop on nano-spin conversion science & quantum spin dynamics. (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 澤端日華瑠， 水田耀ピエール， 石井史之
2. 発表標題 酸化物薄膜における異常ホール効果と 異常ネルンスト効果の第一原理計算
3. 学会等名 第10回物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 石井史之, 水田耀ピエール, 澤端日華瑠
2. 発表標題 First-principles calculation of thermoelectric properties
3. 学会等名 The Winter School on DFT: Theories and Practical Aspects (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 石井史之, 水田耀ピエール, 澤端日華瑠
2. 発表標題 First-principles study of anomalous Nernst effect in skyrmion crystals
3. 学会等名 18th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 水田耀ピエール, 澤端日華瑠, 石井史之
2. 発表標題 Skyrmion-driven thermoelectric conversion: An ab initio study
3. 学会等名 International Workshop on Computational Science 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Teguh Budi Prayitno, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-Principle Study of Carrier-Induced Spin Spiral State by Using Generalized Bloch Theorem
3. 学会等名 日本物理学会第72回年次大会(2017)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (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
---------	---------