

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：13301

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2023

課題番号：20K15115

研究課題名（和文）光-スピン流-電流変換物質の第一原理計算

研究課題名（英文）First-principles Calculation of Light-Spin-Charge Conversion Materials

研究代表者

山口 直也（Yamaguchi, Naoya）

金沢大学・ナノマテリアル研究所・特任助教

研究者番号：70868116

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の主要な成果は、擬原子基底線形結合とベリー位相法に基づく一様電場下での第一原理計算手法の開発を世界で初めて完成させたことである。それは、扱える原子数が世界最大級であるために、電場印加下でのナノスケール材料において高効率に電子状態が予測できるという特徴がある。また、太陽電池材料の設計指針について、近年の有機薄膜太陽電池材料の論文から材料特性データを抽出し、高性能な材料の条件を導出したことである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の主要な成果である電場印加計算コード等のナノスケールの電子材料に特化した第一原理計算コードを公開することで、ナノ電子材料の物質設計に役立つと期待される。開発手法を実装したOpenMXは、国内外の、物性物理学・化学・材料科学分野等における大学・企業研究者のシミュレーション研究基盤を担っており、本研究での拡張版を公開し、様々な研究者に利用されることで、先駆的な研究成果の創出への寄与が期待できる。

研究成果の概要（英文）：The major achievement of this research is the world's first completion of the development of a first-principles calculation method under a uniform electric field based on the linear combination of pseudo atomic orbitals and the Berry phase method. It is characterized by the world's largest number of atoms that can be handled, which enables highly efficient prediction of electronic states in nano-scale materials under the application of an electric field. In addition, we extracted material property data from recent papers on organic thin-film photovoltaic cell materials to derive design guidelines for solar cell materials, and derived the conditions for high-performance materials.

研究分野：計算物質科学

キーワード：スピントクスチャ ベリー位相 電場 第一原理計算 太陽電池 磁気熱電性 データベース 計算コード開発

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

将来のIoT(モノのインターネット)社会において、環境発電を用いた電力供給を必要としないセンサなどが必要不可欠であるなど依然としてエネルギーの有効利用が課題である。スピン角運動量の流れであるスピン流は電流と異なり、ジュール熱によるエネルギー損失を伴わないため、スピン流を用いたデバイス応用を目指したスピントロニクスの研究が盛んに行われている。ラシュバ効果はスピン軌道相互作用がもたらす現象の一つであり、空間反転対称性が破れた系において生じ、電子は有効磁場を感じて振る舞う。近年、ラシュバ効果が生じる表面・界面などで起こる逆エデルシュタイン効果によって高効率なスピン流-電流変換(スピン流から電流への変換)機能が得られるという報告がなされている。ラシュバ効果によって電子状態は波数空間でのエネルギーバンド構造においてスピン分裂と呼ばれる幅のある分裂を有し、光電子分光法などの実験によって観測できる。スピン分裂が大きいほどスピン流-電流変換効率は大きくなる。従来実験で観測される系は規則正しく整列した結晶表面などに限られていたが、最近ラシュバ界面におけるスピン流-電流変換がアモルファス Bi_2O_3 /金属界面、フタロシアニン/金属界面などの不規則系で観測された。また、 Bi_2O_3 /Cu(111)界面において、光を入射することで非占有の界面ラシュバ状態を介したスピン流-電流変換が観測された。ラシュバ効果の応用はスピン電界効果トランジスタなどフェルミ準位近傍のラシュバ状態について従来研究が行われてきたが、スピン流-電流変換によって、これまで注目されてこなかった不規則系のラシュバ状態、非占有ラシュバ状態も注目すべきであることが分かった。非占有ラシュバ状態は光電子分光法などで実験的に直接観測することは困難であり、電子状態の第一原理計算を用いれば予測可能であるが、フェルミ準位近傍のラシュバ状態に比べ、ほとんど調べられてこなかったため自明ではない。

2. 研究の目的

本研究では光誘起のスピン流-電流変換、いわば『光-スピン流-電流変換』が生じる物質について、密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって行い、物質設計の指針を導く。また、太陽電池のように光起電力効果を有する物質にそうした変換機能を付加できれば、光から電流への変換の高効率化が見込まれるため、その電界効果を調べる。

3. 研究の方法

本研究は、第一原理電子状態計算コードである OpenMX を使用して、材料をモデリングし、その電子状態を予測・解析することで実施される。また、独自にコードに拡張し、新機能を追加することによって、新規の物理量の計算が可能になる。スピン分裂特性を調べるには独自に開発したスピントクスチャ計算コードを、電場下特性を調べるには、本研究で独自に開発した電場印加計算コードを用いた。得られた計算結果データから、材料設計指針を提案する。

4. 研究成果

(1)光誘起スピン流-電流変換が生じる Bi_2O_3 /Cu(111)界面のような複雑な二次元系のモデリングを素早く行うために、まず、簡単な構造であるが巨大なラシュバスピン分裂を生じる Bi/Ag 表面合金系を対象としてモデルの提案を試みた。ピスマス原子を III-V 族の 15 種類の原子に置換した M/Ag 表面合金系(Mは置換原子)に対して、密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって決定された構造パラメータ(原子座標など)と剛体球モデルから、表面合金系の構造の記述に特化した原子半径を提案した。この第一原理的に決定された原子半径を用いれば、欠陥など入った系、すなわち、大きな周期系に対しても、ある程度良い表面合金モデリングが可能になることが期待される。また、第一近似として、この原子半径から構築した表面合金モデルを初期構造として、構造最適化のステップの省略も行えると期待できる。

(2)電界効果によるスピン流-電流変換の制御性を調べるために、種々の絶縁体結晶を対象として電場印加計算を行った。自身で周期系への適用も可能なベリー位相の方法による電場印加機能を開発し、OpenMX に実装することで、計算を行った。III-V、II-VI 族半導体、IV 族絶縁体に対して誘電率、ポルン有効電荷の計算を行い、先行研究の値の再現に成功した。ZnTe、CdTe、AlSb の誘電特性についてはスピン軌道相互作用の影響も調べた。コードの定式化など手法開発の成果は国際学術誌 Comput. Phys. Commun. に掲載され、擬原子基底線形結合法とベリー位相法に基づく一様電場下での第一原理計算手法の開発を世界で初めて完成させた。それは競合コードと比較して、局在基底を用いた方法であるため、扱える原子数が世界最大級である。また、一様電場下での任意の k 点における固有値・固有ベクトルの計算手法について開発・検証し、それを応用することで、開発しているスピントクスチャ計算コードを電場印加下の場合においても対応

できるように拡張した。

(3) 巨大なバルクラシユバ効果を示す BiTeI を対象とした結晶構造予測によって得られたいくつかの準安定構造に、最安定構造と同様にスピン分裂が生じるものがあることが分かり、詳細に解析した結果、最安定構造とは異なるテクスチャ(形状)を持つスピン分裂を持つことが分かった。その準安定相の詳細な解析から、860 meV のワイドギャップトポロジカル絶縁体相や、最安定構造と同様にスピン分裂が生じる相があることが分かった。電場印加計算コードからボルン有効電荷を求める応用計算を行うことで結合特性の解析を行った。この研究成果は論文としてまとめられ、国際学術誌 Appl. Phys. Express へ掲載された。

(4) スピン分裂の候補物質として集中的に太陽電池材料を調べるのに関連して、太陽電池デバイスグループとの共同研究を通じてデータベースを作成し、太陽電池材料の設計指針の提案を行った。約 1500 の近年の有機薄膜非フラーレン系太陽電池材料の論文から材料の特性データを抽出し、データ科学的手法に基づいて、高性能な材料の条件を導出した。得られた成果は国際学術誌 Jpn. J. Appl. Phys. に掲載され、注目論文 (Spotlights) 及び 2022 年ハイライト論文として選出された。

(5) スピンテクスチャコードの高速化・高精度化を行い、それを活用して水酸基終端ダイヤモンド表面における永久スピンらせん状態の予測がなされ、論文としてまとめられ、国際学術誌 Appl. Phys. Express に掲載された。

(6) 磁気熱電効果である異常ネルンスト効果と異常ホール効果の物性評価計算コードの開発に貢献した。その提案手法は、同物理量の計算で難点であった Wannier 関数の生成と反復計算がいずれも不要であり、従来手法と比較しても効率的に計算が実施できるという点で優れている。提案手法のルーチンの高度化に貢献し、具体的には、先述の電場印加計算コード開発で得られた副産物である、最適化済みのベリー位相計算ルーチンを転用することで実践的な計算が可能となった。そのコードの手法開発の論文として、国際学術誌 Phys. Rev. B に掲載され、さらにそのコードの応用計算により、鉄シリサイド系と原子層物質の MnBi_2Te_4 に関して、特異な磁気熱電性が予測され、それぞれ国際学術誌 Jpn. J. Appl. Phys. 及び Appl. Phys. Express で掲載に至った。高効率に磁気熱電性を評価する局所ベリー位相法の計算コードの開発にも貢献した。磁気熱電効果である異常ネルンスト効果と異常ホール効果の物性評価計算コードによる応用計算として、チャーン絶縁体となる Cr ドープの Bi_2Se_3 における異常ネルンスト係数の予測の研究に携わった(国際学術誌 Jpn. J. Appl. Phys. に掲載)。また、van Hove 特異点が誘起する巨大な磁気熱電効果の機構の理論的研究にも同コードが活用された(国際学術誌 J. Phys. Soc. Jpn. に掲載)。当該計算コードは GitHub を通じて既に公開済みである。

(7) 有限系におけるスピン軌道分裂を調べるための、スピン分解巨大分子バンドアンフォールディング法の開発を行った。これは有限系から有効的なバンド分散を抽出するバンドアンフォールディング法として、巨大分子バンドアンフォールディング法を提案した上で、スピン分解機能を付加したものである。有限系のバンド分散が可視化できるようになれば、近似結晶での記述が難しい不規則系でのバンド分散やそこで生じるスピン分裂の評価も可能になると期待される。実際に、遷移金属ダイカルコゲナイド WS_2 のフレークにおけるスピン-バレーロッキングにかかわるスピン分裂の可視化に成功した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Mizuno Motohiro, Hosoe Nanaka, Kurihara Takuya, Shigeta Yasuhiro, Amemori Shogo, Yamaguchi Naoya, Ishii Fumiuyuki	4. 巻 245
2. 論文標題 Solid-state 2H NMR investigation of molecular motion in proton-conducting polyacrylic acid/imidazole composites	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Interactions	6. 最初と最後の頁 33 ~ 33
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10751-024-01867-4	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 Shibata Kaiki, Yamaguchi Naoya, Sawahata Hikaru, Ishii Fumiuyuki	4. 巻 92
2. 論文標題 Thermoelectric Effect in Kagome Lattice Enhanced at Van Hove Singularities	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 124704 ~ 124704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.124704	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 Watanabe Ryota, Kurihara Takuya, Shigeta Yasuhiro, Amemori Shogo, Yamaguchi Naoya, Ishii Fumiuyuki, Ida Tomonori, Mizuno Motohiro	4. 巻 399
2. 論文標題 Structural and physical properties of proton-conducting polyacrylic acid/alginic acid/1,2,4-Triazole composite membranes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Solid State Ionics	6. 最初と最後の頁 116299 ~ 116299
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssi.2023.116299	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 Syariati Rifky, Saraswati Vierta, Sawahata Hikaru, Yamaguchi Naoya, Ishii Fumiuyuki	4. 巻 63
2. 論文標題 First-principles study of anomalous Nernst effect in Cr-doped Bi2Se3	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 01SP26 ~ 01SP26
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acfe17	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 Zhang Yaotang, Yamaguchi Naoya, Sawahata Hikaru, Ishii Fumiyuki	4. 巻 16
2. 論文標題 Prediction of wide-gap topological insulating phase in metastable BiTeI	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 053002 ~ 053002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acccd3	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 Morishima Yume, Yamaguchi Naoya, Sawahata Hikaru, Ishii Fumiyuki	4. 巻 16
2. 論文標題 Seebeck-induced anomalous Nernst effect in van der Waals MnBi ₂ Te ₄ layers	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 043003 ~ 043003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/accacc	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 Kadarisman Hana Pratiwi, Yamaguchi Naoya, Ishii Fumiyuki	4. 巻 16
2. 論文標題 Persistent spin helix on a diamond surface	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 023001 ~ 023001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/acb486	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 Tominaga Takahiro, Yamaguchi Naoya, Sawahata Hikaru, Ishii Fumiyuki	4. 巻 62
2. 論文標題 First-principles study of anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect in Fe ₂ Si	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SD1019 ~ SD1019
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acaca6	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 Sawahata Hikaru, Yamaguchi Naoya, Minami Susumu, Ishii Fumiyuki	4. 巻 107
2. 論文標題 First-principles calculation of anomalous Hall and Nernst conductivity by local Berry phase	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 024404 ~ 024404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.024404	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 280
2. 論文標題 First-principles LCPAO approach for insulators under finite electric fields with forces	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 108487 ~ 108487
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2022.108487	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, Sano Hiroaki, Sawahata Hikaru, Nakano Masahiro, Taima Tetsuya, Ishii Fumiyuki, Karakawa Makoto	4. 巻 61
2. 論文標題 Statistical analysis of properties of non-fullerene acceptors for organic photovoltaics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 030905 ~ 030905
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac4894	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 Nur Monika, Yamaguchi Naoya, Ishii Fumiyuki	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 ~ 4444
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計44件(うち招待講演 1件/うち国際学会 22件)

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 強束縛密度行列を用いたベリー位相及び電気分極の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 井上仁、山口直也、石井史之
2. 発表標題 2次元層状物質の量子輸送計算におけるスピン軌道相互作用の影響
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Hana Pratiwi Kadarisman, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of persistent spin helix on OH-terminated diamond, Si, and Ge surfaces
3. 学会等名 APS March Meeting 2024 (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 S. Akatsuka, M. Sakano, H. Nakajo, T. Kato, N. Yamaguchi, F. Ishii, T. Yamamoto, N. Mitsuishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. Kitamura, K. Horiba, K. Sugawara, S. Souma, T. Sato, H. Kumigashira, Y. Seo, S. Masubuchi, T. Machida, K. Ishizaka
2. 発表標題 micro-focused ARPES study of electronic structure in Janus monolayer transition metal dichalcogenides
3. 学会等名 APS March Meeting 2024 (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Khusnul Yakin, Naoya Yamaguchi, Motohiro Mizuno, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-Principles Study on Proton Transfer in Poly(acrylic acid)-Triazole Molecules
3. 学会等名 The 18th Asian Conference on Solid State Ionics (ACSSI-2024) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Nadia Maharani Chadiza, Hana Pratiwi Kadarisman, Naoya Yamaguchi, and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of the van der Waals ZnO layers
3. 学会等名 JAIST International Symposium on Nano-Materials for Novel Devices (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Sulthan W. A. Wisesa, Rifky Syariati, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 A first-principles study of hydrogen and oxygen adsorption in mercury iodide HgI ₂ monolayer
3. 学会等名 JAIST International Symposium on Nano-Materials for Novel Devices (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Yedija Yusua Sibuea Teweng, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study on bulk photovoltaic effect in topological insulator phase of halide perovskites
3. 学会等名 JAIST International Symposium on Nano-Materials for Novel Devices (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Salsabila Amanda Putri, Naoya Yamaguchi, M. Adhib Ulil Absor, Rifky Syariati, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-Principles Study of Spin-Splitting and Electric Dipole Moment in Two-Dimensional Janus WSSe and Related Materials
3. 学会等名 MRM2023/IUMRS-ICA2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 三浦昌平, 山口直也, 石井史之
2. 発表標題 ペロブスカイトCsPbX ₃ (X=Cl, Br, I)表面の第一原理計算
3. 学会等名 第37回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yume Morishima, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of surface anomalous Hall effect in van der Waals antiferromagnets
3. 学会等名 The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM11) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yedija Yusua Sibuea Teweng, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles calculation of bulk photovoltaic effect in ferroelectric topological insulator phase of halide perovskite
3. 学会等名 2023年第84回秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Syifa FauziaHariyanti Putri, Naoya Yamuguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of anomalous valley Hall effect in WTe ₂ /CrI ₃ van der Waals heterostructures
3. 学会等名 2023年第84回秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Khusnul Yakin, Naoya Yamaguchi, Motohiro Mizuno, and Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 FIRST-PRINCIPLES STUDY ON MECHANISM OF PROTON TRANSFER AT POLY(ACRYLIC-ACID)-TRIAZOLE
3. 学会等名 The 26th IUPAC International Conference of Chemical Thermodynamics (ICCT-2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Wardah Amalia, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Study of Electronic Structure of Incommensurate Twisted Graphene Flakes using Band Unfolding Method
3. 学会等名 Materials Today Conference 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hana Pratiwi Kadarisman, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Emergence of the persistent spin helix on diamond (111) surface with OH termination
3. 学会等名 Materials Today Conference 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yaotang Zhang, Naoya Yamaguchi, Xufang Zhang, Norio Tokuda, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of the energy band alignment at the diamond/Al2O3 interface
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yedija Yusua Sibuea Teweng, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles calculation of strain effect induced topological phase transition in halide perovskite CsPbI3
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Syifa Fauzia Hariyanti Putri, Rifky Syariati, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of spin-valley splitting in WTe2/CrI3 2D van der Waals heterostructures
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Vierta Saraswati, Rifky Syariati, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of anomalous Nernst effect in Cr-doped Bi2Se3
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Organic and Inorganic Electronic Materials and Related Nanotechnologies (EM-NANO2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 LCPAO法における一様電場下第一原理計算手法の開発とスピネクスタへの応用
3. 学会等名 物性研究所パソコン共同利用・CCMS合同研究会「計算の時代における物性科学」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 盛島夢、山口直也、澤端日華瑠、石井史之
2. 発表標題 磁性半導体MnBi ₂ Te ₄ 超薄膜における横型熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 2023年第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hana Pratiwi Kadarisman, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles calculation of the persistent spin helix on an OH-terminated diamond surface
3. 学会等名 2023年第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 盛島夢、山口直也、澤端日華瑠、石井史之
2. 発表標題 ファンデルワールス磁性体MnBi ₂ Te ₄ 薄膜における横型熱電効果の第一原理計算
3. 学会等名 学術変革領域研究(A)「2.5次元物質科学：社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト」第4回領域会議
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 擬原子基底線形結合法とベリー位相法に基づく一様電場下での第一原理計算手法の開発
3. 学会等名 第36回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yaotang Zhang, Naoya Yamaguchi, Xunfang Zhang, Norio Tokuda, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 Ab-initio study of defects states in diamond/Al2O3 interface
3. 学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Juhri Hendrawan, Rifky Syariati, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-Principles Study of Spin-Splitting in PbS/Ag(111)
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山口直也、Sefty Yunitasari、石井史之
2. 発表標題 バンドアンフォールディング法によるグラフェンナノフレークの電子状態の第一原理解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yedija Yusua Sibuea Teweng、山口直也、石井史之
2. 発表標題 First-principles study of topological phase transition in strained CsPbI3
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 柴田海輝、盛島夢、澤端日華瑠、山口直也、石渡弘治、石井史之
2. 発表標題 (MnBi ₂ Te ₄) _m (Bi ₂ Te ₃) _n 系における熱電効果およびアクション項の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 盛島夢、山口直也、柴田海輝、澤端日華瑠、石井史之
2. 発表標題 3層MnBi ₂ Te ₄ における異常ネルンスト効果の第一原理的研究
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yedija Yusua Sibuea Teweng, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-principles study of topological phase transition on the strained inorganic halide perovskite
3. 学会等名 The 5th International Union of Materials Research Societies International Conference of Young Researchers on Advanced Materials (IUMRS-ICYRAM 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Juhri Hendrawan, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First Principles Study of Monolayer PbS on Au (111)
3. 学会等名 The 5th International Union of Materials Research Societies International Conference of Young Researchers on Advanced Materials (IUMRS-ICYRAM 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takahiro Tominaga, Naoya Yamaguchi, Hikaru Sawahata, Susumu Minami, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 First-Principles Calculation of Thermoelectric Property for Iron Silicides
3. 学会等名 The 6th Asia-Pacific Conference on Semiconducting Silicides Science and Technology Towards Sustainable Optoelectronics (APAC-Silicide 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hana Pratiwi Kadarisman, Naoya Yamaguchi, Fumiyuki Ishii
2. 発表標題 The Study of Electronic Properties of Nitrogen-vacancy Center in Diamond Using Band-unfolding Method
3. 学会等名 APS March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 張耀棠、山口直也、張旭芳、徳田規夫、石井史之
2. 発表標題 AI2O3/ダイヤモンド界面の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会 (2022年)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 柴田海輝、山口直也、盛島夢、石渡弘治、石井史之
2. 発表標題 磁性絶縁体におけるアクシオンパラメータの第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会 (2022年)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 V. Saraswati, R. Syariati, H. Sawahata, N. Yamaguchi and F. Ishii
2. 発表標題 First-principles study of anomalous Nernst Effect in Cr-doped Bi ₂ Se ₃
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS9) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 富永崇央、山口直也、澤端日華瑠、見波将、石井史之
2. 発表標題 鉄シリサイドの結晶構造予測と熱電性の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口直也、石井史之
2. 発表標題 一様電場下の磁性絶縁体におけるジャロシンスキー・守谷相互作用の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 張耀棠、山口直也、澤端日華瑠、石井史之
2. 発表標題 BiTeIの結晶構造予測とスピン分裂の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 柴田海輝、澤端日華瑠、山口直也、石井史之
2. 発表標題 カゴメ格子・パイクロア格子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 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Sefty Yunitasari, Fumiyuki Ishii, Naoya Yamaguchi
2. 発表標題 The study of Dirac cones in graphene flakes using band-unfolding method
3. 学会等名 20th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoya Yamaguchi
2. 発表標題 First-principles Calculation of Control of Spin Splitting for Spin-to-charge Conversion
3. 学会等名 Frontiers of Computational Physics from meV to MeV (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020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
---------	---------