

日本－タイ・インドネシア 国際共同研究「材料分野（マテリアルズ・インフォマティクス）」 2023 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	原子層・トポロジカル物質における高性能熱電材料のデータ駆動型計算デザイン
研究課題名（英文）	Data-driven computational design of high-performance thermoelectrics in atomic layers and topological materials
日本側研究代表者氏名	石井 史之
所属・役職	金沢大学 ナノマテリアル研究所 教授
研究期間	2023 年 4 月 1 日 ～ 2025 年 3 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
石井 史之	金沢大学・ナノマテリアル研究所・教授	研究統括と研究実施・ハイスループット計算コードの開発とハイスループット計算・データベースの開発

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

- (i) 2022 年度はハイスループット計算システムの構築およびデータベースを構築したが、そのデータベースを用いたランキングリスト活用ができていなかった。2023 年度は文献・実験・計算の情報をデータベースに集約することをさらに進め、高性能熱電材料物質のデータ駆動型計算デザインをめざして、計算の優先度のランキングを作成し、より効率的にハイスループット計算を実施する。
- (ii) 2022 年度は達成目的として計算する候補物質の数として 5000 物質のうち 786 物質（2023 年 2 月 2 日現在）を実施しており、3 月末までに 5000 物質の 1/3 程度である 1700 物質（年次目標）達成に向けて、二次元強磁性体のハイスループット計算を実施している。2023 年度も引き続きハイスループット計算を実施する。
- (iii) 計算手法開発：タイの実験グループの実験結果を予測する計算手法の開発を実施する。
- (iv) データベース中の物質から熱電能の高い物質について、インドネシアグループ、タイグ

ループと共同研究を推進し、論文を執筆する。

(v) 熱電効果の増大メカニズムについて、個別の系について詳しく調べる。

3. 日本側研究チームの実施概要

- (i) 計算の優先度のランキングを作成し、より効率的にハイスループット計算を実施した。バルク系、二次元系が報告されている構造については、計算に加えて文献情報（実験の文献を含む）をデータベースに集約することをさらに進めた。薄膜・単相系に加えて二相系のヘテロ構造（人工超格子系）も含めた系 $\text{CrI}_3/\text{WTe}_2$ 等のハイスループット計算に取り組んだ。
- (ii) 達成目的として設定した3年間で計算する候補物質 5000 の8割程度の4000構造の計算を実施した。
- (iii) 独自に開発した異常ネルンスト効果を見積もる高速な計算手法である局所ベリー位相法[Phys. Rev. B **107**, 024404 (2023)]を拡張し、タイグループ（実験）が取り組んでいるスピンゼーベック効果にも対応できるように、スピンホール伝導度の局所ベリー位相法による計算手法を開発し、今年度は量子化されたスピンホール伝導度（スピン Chern 数）を計算できるように計算プログラムの拡張に成功した。さらに金属系のスピンホール伝導度の計算プログラムの開発を進めている。
- (iv) 共同研究については、インドネシアのグループ(ITS, BRIN グループ)と磁性材料に関しての共同研究で遷移金属ハライド物質 MBr_3 ($\text{M}=\text{Pt}, \text{Pd}$)において、大きな異常 Nernst 係数が期待できることが明らかになった。これは論文にまとめて投稿中である。タイグループとはバルクのハーフホイスラー系 TiFeSb の論文原稿を準備中である。
- (v) Cr をドーピングした Bi_2Se_3 薄膜が量子化された異常ホール絶縁体(半導体)になることを示し、 $1.46 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ のホールもしくは電子ドーピングで $240 \mu\text{V/K}$ の大きなゼーベック係数を示し、このゼーベック効果とホール角度の積が寄与する巨大な異常ネルンスト係数 $\sim 120 \mu\text{V/K}$ を示す可能性があることを示した。[Japanese Journal of Applied Physics, **63**, 01SP26 (2024)]。二次元系であるカゴメ格子のカイラル磁性模型について、ノードルラインが存在しなくても、状態密度の van Hove 特異点が異常ネルンスト効果のみならず、ゼーベック効果の増大にも重要な役割を果たすことを明らかにした。これらの成果を K. Shibata, N. Yamaguchi, H. Sawahata, and F. Ishii, Journal of the Physical Society of Japan **92**, 124704 (2023)として出版した。論文は Journal of the Physical Society of Japan におけるトップダウンロード論文 (Top 20 Most Downloaded Articles) として J.Phys. Soc. Jpn.公式ページにて紹介された (最高2位 (2023/11))。