

Design of topological thermoelectric materials with nanoscale magnetic order

Publicly

All ▼

Project Area

Discrete Geometric Analysis for Materials Design

Project/Area Number

18H04481

Research Category

Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas (Research in a proposed research area)

Allocation Type

Single-year Grants

Research Institution

Kanazawa University

Principal Investigator

石井 史之 金沢大学, ナノマテリアル研究所, 准教授 (20432122)

Project Period (FY)

2018-04-01 – 2020-03-31

Project Status

Completed (Fiscal Year 2019)

Budget Amount *help

¥7,800,000 (Direct Cost: ¥6,000,000、Indirect Cost: ¥1,800,000)

Fiscal Year 2019: ¥3,900,000 (Direct Cost: ¥3,000,000、Indirect Cost: ¥900,000)

Fiscal Year 2018: ¥3,900,000 (Direct Cost: ¥3,000,000、Indirect Cost: ¥900,000)

Keywords

熱電効果 / トポロジカル材料 / 波動関数 / トポロジー / 異常ネルンスト効果 / 強磁性体 / 熱電変換 / 磁性 / 第一原理電子状態計算 / スキルミオン / トポロジカル不変量 / 磁気構造 / スカームイオン / 異常ホール効果

Outline of Annual Research Achievements

効率的なエネルギー利用を目指し、電子スピンと波動関数のトポロジーが重要となる熱電変換現象の一つである異常ネルンスト効果の研究に取り組んだ。密度汎関数法に基づく第一原理計算手法を用いて、Fe化合物や二次元物質について多く調べた。主な研究実績は、次の3点にまとめられる。

(1)強磁性状態のFeCl₂の単層について、異常ネルンスト効果を調べ、6mV/K程度の大きな異常ネルンスト係数が得られる可能性あること、その起源がブリルアンゾーンのK点近傍の大きなベリー曲率であることを明らかにした。この成果を論文論文 R. Syariati, S. Minami, H. Sawahata and F. Ishii, APL Materials 8, 041105/1-6 (2020)として出版した。

(2)実験グループと共同で、鉄にアルミやガリウムを添加した材料が鉄単体より20倍大きな異常ネルンスト効果を示すこと、その起源が、ノーダルウェブと呼ばれるトポロジカルなバンド構造に由来していることを明らかにした。この成果は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, Nature 581, 53-57 (2020) として出版し、複数の新聞等で報道された (2020年4月28日付 北國新聞, 2020年4月30日付 日刊産業新聞、等)。(3) 実験グループと共同で、運動量空間での非自明なスピン構造が銅に色素を塗るだけで生じ、スピン変換機能を付加することを明らかにした。この成果は 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, Nano Lett. 19, 7119(2019)として、出版した。

Research Progress Status

令和元年度が最終年度であるため、記入しない。

Strategy for Future Research Activity

令和元年度が最終年度であるため、記入しない。

Report (2 results)

2019 Annual Research Report

2018 Annual Research Report

Research Products (30 results)

All 2020 2019 2018 Other

All Int'l Joint Research (1 results)

Journal Article (10 results) (of which Int'l Joint Research: 2 results, Peer Reviewed: 10 results, Open Access: 2 results)

Presentation (19 results) (of which Int'l Joint Research: 11 results, Invited: 1 results)

[Int'l Joint Research] Gadjah Mada University(インドネシア)	▼
[Journal Article] Iron-based binary ferromagnets for transverse thermoelectric conversion	2020 ▼
[Journal Article] First-principles study of anomalous Nernst effect in half-metallic iron dichloride monolayer	2020 ▼
[Journal Article] Spin splitting with persistent spin textures induced by the line defect in the 1T phase of monolayer transition metal dichalcogenides	2020 ▼
[Journal Article] Realization of Spin-dependent Functionality by Covering a Metal Surface with a Single Layer of Molecules	2019 ▼
[Journal Article] First-principles Study of Spiral Spin Density Waves in Monolayer MnCl ₂ Using Generalized Bloch Theorem	2019 ▼
[Journal Article] Intrinsic persistent spin helix state in two-dimensional group-IV monochalcogenide MX monolayers (M=Sn or Ge and X=S, Se, or Te)	2019 ▼
[Journal Article] Electric-field-induced Z ₂ topological phase transition in strained single bilayer Bi(111)	2019 ▼
[Journal Article] Implementation of Generalized Bloch Theorem Using Linear Combination of Pseudo-Atomic Orbitals	2018 ▼
[Journal Article] First-principles study on thermoelectric properties of half-Heusler compounds CoM ₃ Sb (M=?Sc, Ti, V, Cr, and Mn)	2018 ▼

[Journal Article] Electric Field Dependence of Topological Edge States in One-Bilayer Bi(111): A First-Principles Study	2018	▼
[Presentation] First-principles Study of Anomalous Nernst Effect in The 2D Ferromagnetic Half-metal 1T-FeX ₂ (X = Br, Cl)	2019	▼
[Presentation] Implementation of computing anomalous Hall conductivity for high throughput screening of magnetic thermoelectric materials	2019	▼
[Presentation] First-Principles Study of the Surface Alloys M/Ag (111)- 3× 3 R 30°	2019	▼
[Presentation] First-principles Fully Relativistic Calculations of Insulators Under Finite Electric Fields by Using the LCAO Method	2019	▼
[Presentation] 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	2019	▼
[Presentation] 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	2018	▼
[Presentation] First-principles study of electric-field induced Z ₂ topological phase transition in strained one-bilayer Bi(111)	2018	▼
[Presentation] Bi薄膜のトポロ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	2018	▼
[Presentation] Z ₂ 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	2018	▼
[Presentation] 磁性ハーフホイスラー合金の熱伝導率の第一原理計算	2018	▼
[Presentation] First-principles study on anomalous Nernst effect in Fe ₃ Al and related compounds	2018	▼
[Presentation] First-principles calculations on anomalous thermoelectric effect of ferromagnetic Hustler alloys	2018	▼
[Presentation] 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	2018	▼
[Presentation] 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	2018	▼
[Presentation] 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	2018	▼
[Presentation] First-principles study of Berry-phase-mediated thermoelectric effects	2018	▼
[Presentation] Berry-phase-mediated Thermoelectric Effects in Magnetic Materials	2018	▼
[Presentation] Large anomalous Nernst effect in narrow-gap Chern insulator	2018	▼
[Presentation] First-principles study of anomalous thermoelectric effects	2018	▼

URL: <http://kaken.nii.ac.jp/grant/KAKENHI-PUBLICLY-18H04481/>

Published: 2018-04-23 Modified: 2021-01-27