

信 定 克 幸（准教授）（2004 年 6 月 1 日着任）*）

A-1) 専門領域：分子物理学，理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

- a) ナノ構造体の光応答理論の開発と光・電子融合デバイスの理論設計
- b) ヘテロ界面系の電子物性と光励起ダイナミクスの理論
- c) 不均一系触媒の第一原理分子動力学計算
- d) 金属クラスターの光電子物性
- e) 光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラム SALMON の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 最近では，数～十数 nm 程度の極めて精密な高次ナノ構造体を作成することが可能となってきた。この様なナノ構造体と光が相互作用すると，従前の光応答では見られなかった局所領域での近接場光励起ダイナミクスが起り，そのダイナミクスに起因する新たな光・電子融合機能が発現することが期待できる。我々は，十数 nm 程度以下の実在系ナノ構造体の光応答を記述するためのナノ光応答理論と，その理論に基づく光励起電子ダイナミクス第一原理計算プログラムを開発してきた。当初は，このプログラムは GCEED と名付けていたが，孤立系，ナノ構造体，周期系バルク，表面・界面等，様々な系の光応答を取り扱うために，GCEED を大幅に改変し，SALMON (Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience) として開発を進めた。SALMON を用いて金属有機構造体 (MOF) 中のアセチレンを二倍波励起できることを実証した。また，シリコン薄膜を対象として，始状態と終状態が異なる波数を持つバンド間の波数励起ができることを実証した。いずれの光励起も近接場光励起に起因するものである。
- b) 金属，半導体，絶縁体等の異なる物質が接するヘテロ界面が生み出す電子物性は，その多彩な電子的特性解明のための基礎理学的研究に留まらず，多彩さ故に様々な機能発現の鍵を握っていることが多く，新規機能デバイス開発に関わる応用科学，さらには産業開発の分野でも高い注目を浴びている。しかし，その理論的解明は非常に遅れている。我々は，ナノ構造体の光応答の研究において開発してきた計算手法 SALMON を用いて，ヘテロ界面の電子物性を明らかにした。更に，ヘテロ界面系への電圧及び光の印加による電子物性の変化や外場に対する電気応答特性を記述するための理論及び計算手法の開発を進めている。本年度は， MoS_2 -Graphene の光励起過程の詳細を明らかにした。
- c) プラチナ，ロジウム，パラジウムを用いた三元触媒は，自動車排ガス浄化触媒として使われているが，いずれの金属も高価であり，これらの金属を豊富に存在する安価な物質で代替した触媒の開発が望まれている。本研究課題では第一原理 (カー・パリネロ) 分子動力学計算法を用いて， CeO_2 表面に Cr と Cu がドーピングされている系の NO 還元の触媒反応のメカニズム解明を行った。
- d) 金とチオラートから構成されるクラスターは，その安定性と機能材料への応用の期待から盛んに研究が行われている。昨年に引き続き本年も国内外の実験グループと共同で，金チオラートクラスターの構造や光電子物性の研究を行った。本年度も，異種金属原子のドーピングによる電子物性及び光励起ダイナミクスの研究を進めた。

- e) 孤立系, ナノ構造体, 周期系バルク, 表面・界面等様々な系を対象として, その光励起電子ダイナミクスの計算を行う第一原理超並列計算プログラム SALMON の開発を行った。ソースコードまで含めて公開した。<http://salmon-tddft.jp>

B-1) 学術論文

T. YATSUI, H. SAITO and K. NOBUSADA, "Angstrom-Scale Flatness Using Selective Nano-Scale Etching," *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 2181–2185 (2017).

T. YATSUI, M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Nano-Scale Chemical Reactions Based on Non-Uniform Optical Near-Fields and Their Applications," *Prog. Quantum Electron.* **55**, 166–194 (2017).

K. KOIZUMI, M. HATAKEYAMA, M. BOERO, K. NOBUSADA, H. HORI, T. MISONOU and S. NAKAMURA, "How Seaweeds Release the Excess Energy from Sunlight to Surrounding Sea Water," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 15745–15753 (2017).

M. NODA, M. YAMAGUCHI and K. NOBUSADA, "Second Harmonic Excitation of Acetylene by the Optical Near Field Generated in a Porous Material," *J. Phys. Chem. C* **121**, 11687–11692 (2017).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, "Development of Theoretical Approach for Describing Electronic Properties of Hetero-Interface Systems under Applied Bias Voltage," *J. Chem. Phys.* **146**, 084706 (10 pages) (2017).

K. IIDA and K. NOBUSADA, "Atomically Modified Thin Interface in Metal-Dielectric Hetero-Integrated Systems: Control of Electronic Properties," *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 145503 (8 pages) (2017).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "An Atomic-Level Insight into the Basic Mechanism Responsible for the Enhancement of the Catalytic Oxidation of Carbon Monoxide on a Cu/CeO₂ Surface," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3498–3505 (2017).

K. KOIZUMI, K. NOBUSADA and M. BOERO, "Simple but Efficient Method for Inhibiting Sintering and Aggregation of Catalytic Pt Nanoclusters on Metal-Oxide Supports," *Chem. –Eur. J.* **23**, 1531–1538 (2017).

B-3) 総説, 著書

T. YATSUI and K. NOBUSADA, "Near-Field Assisted Chemical Reactions and Its Applications," *Progress in Nanophotonics* **4**, 57–86 (2017).

B-4) 招待講演

信定克幸, 「近接場光励起により発現する新奇光機能場の計算科学的設計」, 第4回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会, コクヨホール, 東京品川, 2017年11月.

B-5) 特許出願

特願 2017-159786, 「可視光プラズモニック合金ナノ粒子, その製造方法, 及びその用途」, 佐藤良太, 寺西利治, 川脇徳久, 信定克幸, 飯田健二, 2017年.

B-6) 受賞, 表彰

信定克幸, 平成 28 年度実施課題における HPCI 利用研究課題優秀成果賞 (2017).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本物理学会領域1 (原子・分子分野) 世話人 (2003–2004).

理論化学討論会第3期世話人 (2009–).

学会の組織委員等

分子構造総合討論会プログラム委員 (2001).

日韓共同シンポジウム実行委員 (2005).

総研大アジア冬の学校実行委員 (2005–2006).

理論化学シンポジウム運営委員会代表 (2006–2008).

The Seventh Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Local Organizing Committee (2009–2011).

理論化学討論会世話人幹事 (2017–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005–2006).

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員 (2007–2009).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2013–2015).

筑波大学計算科学研究センター共同研究委員会委員 (2015–).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2016–).

その他

次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム運営委員会委員, 戦略課題小委員会(第2部会)委員, 人材育成・教育小委員会委員 (2011–2016).

ハイパフォーマンスコンピューティング研究運営委員会運営委員 (2015–).

ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」課題実施準備委員 (2015–2016).

B-8) 大学での講義, 客員

筑波大学計算科学研究センター, 共同研究員, 2006 年 6 月–.

京都大学実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点ユニット, 拠点准教授, 2012 年 9 月–.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「ナノメートルサイズの分子における多電子ダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2005 年–2007 年).

科研費特定領域研究(計画研究), 「エネルギー散逸を伴う電子ダイナミクスの理論と材料物性」, 信定克幸 (2006 年–2010 年).

科研費基盤研究(B), 「近接場光励起による金属表面の局所電子ダイナミクスの理論」, 信定克幸 (2009 年–2012 年).

科研費基盤研究(B),「光エネルギー変換のナノ光学理論と広帯域可視光応答ナノ構造体設計への展開」, 信定克幸 (2013年–2016年).

科研費基盤研究(B),「近接場光励起を用いた光高機能ナノ物質の計算科学的設計」, 信定克幸 (2017年–2020年).

C) 研究活動の課題と展望

柔軟な電子構造と化学的性質の多様性を持つナノ構造体は、新規機能を生み出す高い可能性を持っている。また、ナノ構造体が光と相互作用し、光の自由度を露に取り込むことができれば、従前の電子デバイスや光デバイスとは異なる光・電子融合機能を併せ持った高機能物質の開発へと繋がると期待できる。理論的研究の立場から言えば、実在系に即したナノ構造体を対象として、光と物質(電子系)の露な相互作用を記述するナノ光応答理論の開発を行い、その理論に基づく実用に耐え得る超並列第一原理計算手法の開発が急務である。我々は、既にその様な第一原理計算プログラム SALMON を世界にさきがけて開発済みである。今後は、ナノ光応答理論と計算科学的手法 SALMON から得られた知見を踏まえ、物質に任意の光・電子機能を付加する指導原理を見出すことが極めて重要になると考える。

*) 2018 年 1 月 15 日逝去