飯田 健二 (助教) (2013年12月1日着任)

A-1) 専門領域：量子力学，電気化学，統計力学

A-2) 研究課題：

a) ナノ界面系の光や電圧に対する応答機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 異種物質が接して構成される界面系は，電子デバイスや触媒の開発に関連して盛んに研究が行われている。近年では，二次元層状物質や金属ナノクラスターなどを用いて幾何的構造が精密に設計されるようになっており，光・電子機能に対する原子レベルの理解の深化が求められている。これまで我々は，第一原理計算プログラム SALMON を用いて，ナノサイズの界面系の光電子物性を明らかにしてきた。本年度は，実験グループと連携しつつ，近接場光を利用する光触媒や受光素子について，光学応答性の解析を進めた。また，銀ナノクラスターを酸化チタンに担持したヘテロ構造における光励起電子ダイナミクスについて，SALMON を用いて解析を行った。それにより，銀ナノクラスターから生じる光誘起電場によって，銀から酸化チタンへと電子が直接移動することを明らかにした。

B-1) 学術論文

T. YATSUI, S. OKADA, T. TAKEMORI, T. SATO, K. SAICHI, T. OGAMOTO, S. CHIASHI, S. MARUYAMA, M. NODA, K. YABANA, K. IIDA and K. NOBUSADA, “Enhanced Photo-Sensitivity in a Si Photodetector Using a Near-Field Assisted Excitation,” *Commun. Phys.* **2**, 62 (8 pages) (2019).

T. YATSUI, Y. NAKAHIRA, Y. NAKAMURA, T. MORIMOTO, Y. KATO, M. YAMAMOTO, T. YOSHIDA, K. IIDA and K. NOBUSADA, “Realization of Red Shift of Absorption Spectra Using Optical Near-Field Effect,” *Nanotechnology* **30**, 34LT02 (8 pages) (2019).

M. NODA, K. IIDA, M. YAMAGUCHI, T. YATSUI and K. NOBUSADA, “Direct Wave-Vector Excitation in an Indirect-Band-Gap Semiconductor of Silicon with an Optical Near-Field,” *Phys. Rev. Appl.* **11**, 044053 (7 pages) (2019).

M. NODA, S. A. SATO, Y. HIROKAWA, M. UEMOTO, T. TAKEUCHI, S. YAMADA, A. YAMADA, Y. SHINOHARA, M. YAMAGUCHI, K. IIDA, I. FLOSS, T. OTOBE, K.-M. LEE, K. ISHIMURA, T. BOKU, G. F. BERTSCH, K. NOBUSADA and K. YABANA, “SALMON: Scalable Ab-Initio Light-Matter Simulator for Optics and Nanoscience,” *Comput. Phys. Commun.* **235**, 356–365 (2019).

B-4) 招待講演

K. IIDA, “First-Principles Study of Heterostructures Consisting of Two-Dimensional Layered Materials under Light and Voltage Bias,” 17th Japan-Korea Symposium on Molecular Science “Advances in Materials and Molecular Sciences,” 愛知，名古屋，2019年7月。

K. IIDA, “Massively Parallel Calculations for Photoexcited Electron Dynamics in Nanostructures,” 二国間共同研究オープンセミナー「Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems」，愛知，岡崎，2019年7月。

B-6) 受賞, 表彰

飯田健二, 第 12 回分子科学会奨励賞 (2019).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

分子研研究会「光とナノ物質の相互作用: 分子科学の未来にむけて」世話人 (2018).

第 21 回理論化学討論会実行委員 (2018).

B-10) 競争的資金

科研費若手研究, 「光と印加電圧の相乗効果によって発現する薄膜とナノ粒子間の電子移動の機構解明」, 飯田健二 (2019 年–2021 年).

科研費基盤研究(B), 「可視プラズモニクスの新展開: 第2世代材料の学理構築」(代表: 佐藤良太, 飯田健二(研究分担者)) (2018 年–2022 年).

文部科学省ポスト「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(代表: 矢花一浩), 「サブ課題B 光・電子融合デバイス」, 飯田健二(研究分担者) (2018 年–2019 年).

科学技術振興機構 A-STEP 機能検証フェーズ試験研究タイプ, 「アイセーフ波長用高効率 Si 受光センサの開発」(代表: 八井崇), 飯田健二(研究分担者) (2019 年–2020 年).