

国際共同研究交通費補助 研究成果報告書

(適宜行追加可)

所属・職・氏名	理工学部・教授・若林 克法
共同研究者 所属・職・氏名	Department of Physics, Indian Institute of Science Education and Research (IISER), Tirupati, Assistant Professor, Dr. Sudipta DUTTA
研究課題	原子膜物質の電子物性におけるナノスケール効果に関する理論的研究
共同研究 実施期間	派遣期間： 年 月 日 ～ 年 月 日 招聘期間： 2018 年 6 月 10 日 ～ 2018 年 7 月 9 日
共同研究 実施場所	関西学院大学・理工学部

1. 研究の成果（本共同研究によって得られた新たな知見、成果等を簡潔に記述してください。該当しない場合は「該当なし」と記載してください。）

(1) 学術的価値（本研究により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果）

グラフェンや遷移金属カルコゲナイド系物質などの系の厚さが一原子層である原子膜物質は、熱力学的に安定であるとともに、透明かつ、機械的にフレキシブルであることから、次世代デバイスのキーマテリアルとして研究が爆発的に展開している。本国際共同研究では、これら原子膜物質において、結晶格子がつくるネットワークポロジータが電子物性に及ぼす影響を理論計算の立場から解明し、原子膜物質での新奇物性を見出すとともに、新しい機能を設計・提示するものである。今回の共同研究実施期間においては、昨年からの継続的に共同研究をおこなってきた、遷移金属ダイカルコゲナイド系物質におけるオゾンによる酸化プロセスの理論解析を集中的に行い、論文の取りまとめをおこなった。幸いにして、一報の論文をアメリカ化学会(ACS)の Journal of Physical Chemistry C に出版することができた。

(2) 相手国との交流（海外の研究者と学術交流することによって得られた効果）

Dutta博士は、2017年に本学理工学部へ客員教員として1ヶ月滞在し、本学大学院生と既に共同研究を実施しているなど、学生の研究活動にも大きな貢献をしている。さらに、理工学部物理学科および先進エネルギーナノ工学科の学生向けに、理論解析力学の集中講義を実施するなど、教育に関しても多大なる貢献をしている。今回の滞在期間中においても、共同研究課題の実施だけでなく、学部学生および大学院生を対象として、密度汎関数理論の基礎講座および第一原理計算実習を実施して頂いた。博士の人柄もあり、学生たちには大きな学術的および文化的な刺激となった。

(3) 社会貢献（社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献）

原子膜物質は、フレキシブルデバイスや超低消費電力素子への応用が期待されている。そのなかで、本研究課題では、原子膜物質を用いた電子デバイス・光デバイスなどを設計する上で必要となる基礎的な電子状態解析を行っているおり、デバイス設計や新機能設計の基礎を与えるものである。原子膜デバイスの実現によって、IoT(ものインターネット)などの高度情報処理社会や省エネルギー社会への貢献が期待できる。

(4) 若手研究者養成への貢献 (若手研究者養成への取り組み、成果)

今回の共同研究は、特に研究室の学生に大きな学術的な刺激をもたらすものであった。特に、第一線で活躍している研究者とFace-to-Faceで議論することで、学生たちの研究への取り組み方や意識の持ち方に大きな良い影響をもたらしたと考えている。

(5) 将来発展可能性 (本研究を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

共同研究者とは、2010年から国際共同研究を行ってきており、既に10報を超える共著論文を、学術雑誌に出版している。また、2017年には、兵庫海外研究ネットワーク(HORN)事業の支援により、本学に客員教員として、1ヶ月間滞在して頂いた。その間にも、継続中の共同研究課題を遂行するとともに、本学大学院生との共同研究を行ってきた。今回の招聘では、これまでの研究交流実績をベースに、大学院生の相互交流および、日本学術振興会二国間交流事業等への展開などへ発展させていく計画である。

(6) その他 (上記(1)～(5)以外に得られた成果があれば記述してください。)

例：大学間協定の締結、他事業への展開、受賞、産業財産権の出願・取得等

今後、大学院生の交流および、日本学術振興会二国間交流事業等への展開を計画している。

2. 研究発表 (本共同研究の一環として発表 (予定含む) したものについて記述してください。なお、印刷物がある場合は1部添付してください。)

例：共著論文、口頭発表、出版、ポスター発表

今回の招聘期間の直接的成果として、次の論文を出版した。

S. R. Das, K. Wakabayashi, M. Yamamoto, K. Tsukagoshi and Sudipta Dutta, "Layer-by-layer Oxidation Induced Electronic Properties of Transition-Metal-Dichalcogenides", J. Phys. Chem C 122, 17001 (2018).