

令和 2 年 6 月 25 日現在

機関番号：82626

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K05412

研究課題名(和文)新規原子層物質における層間相互作用と電子輸送現象

研究課題名(英文) Inter-layer interaction and electron transport in new atomi-layered matters

研究代表者

中西 毅 (Nakanishi, Takeshi)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・ラボ長

研究者番号：00301771

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：この研究では原子層物質の層間相互作用を第一原理計算および有効質量近似により取り扱い、扁平したカーボンナノチューブ、2層ガリウムナイトライド原子層、グラフェン、シリセンなど原子層物質の構造と電子状態をあきらかにした。特にバックリングを伴う2層ガリウムナイトライド特有の最安定構造を示した。カイラル対称性のある2次元高次トポロジカル絶縁体間の層間相互作用を可変パラメータとして導入した理論を構築し、新たに3次元高次トポロジカル半金属体相を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

2層ガリウムナイトライド原子層については歪を加えることでバンドギャップが間接遷移から直接遷移型に変化することもわかり、ナノデバイス材料としての応用が期待される。数学により予言されていた特に対称性を前提としない新しい3次元高次トポロジカル絶縁体について、2次元高次トポロジカル絶縁体の層間相互作用を変えることによる相変化として理解した。さらにシリセンの化学修飾を調べ、分子センサーや分子吸蔵材料への応用が期待される成果を得た。また紫外光照射によりテラヘルツシグナル発信する小型のグラフェンナノリボンデバイスを提案した。

研究成果の概要(英文)：The inter-layer interaction between atomic layer materials is studied by first-principles calculation and effective-mass approximation. We have shown the structure and electronic states of atomic layer materials such as flattend carbon nanotubes, bilayer gallium nitride, graphene, and silicene. In particular, we show the most stable structure peculiar to bilayer gallium nitride with buckling. We constructed a theory of higher-order topological phase by introducing interlayer interaction between two-dimensional higher-order topological insulators with chiral symmetry as a variable parameter, and newly proposed a three-dimensional higher-order topological semimetallic phase.

研究分野：物性理論

キーワード：グラフェン カーボンナノチューブ 有効質量理論 時間依存密度汎関数法 シリセン 第一原理計算

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

グラフェンに引き続き、フォスフォレン、スタネン、シリセン、ゲルマネン、といった新しい原子層物質が2次元電子系として注目を集めている。これらの原子層物質は金属から絶縁体まで様々な特性をもつ。またファン・デル・ワールス相互作用により、原子層が弱く結合しながら積層し原子スケールの超格子、デバイスが実験的に実現され、もしくは理論的に予言されている。例えば黒リンの単原子層であるフォスフォレンのバンドギャップは室温中のデバイス動作に十分な1.6eV程度で、層数によってバルクのバンドギャップ0.35eVまで制御可能である。さらに数百 cm^2/Vs 程度のホール移動度が報告されており、p型の電子材料としてトランジスタ応用が期待される。またn型を示す MoS_2 などとp-n接合を作り、太陽電池などへの応用が期待される。これらの新しい原子層はグラフェンと同じく六角形の構造をもち、有効質量理論において、電子の運動は2行2列の有効八ミルトニアンで記述される。グラフェンでは、質量0のニュートリノに対するWeylの方程式となり電子状態は線形エネルギー分散で特徴付けられるのに対し、新しい原子層は有効質量があり、バンドギャップが開く。特に、フォスフォレンではx,y方向が異方的であり、これまでのグラフェン研究ではあまり考慮されてこなかった特徴を持ち興味深い。

申請者はこれまで、単層2層グラフェン境界を、有効質量近似の方法で調べた。そこでは、2層グラフェンの層間相互作用とそれによる減衰波が本質的に重要である。グラフェンには2種類のフェルミ点 K, K' があり、その付近の電子状態を K と K' バレー状態と呼ぶ。 K バレー状態の電子は入射方向に対して非対称に透過し、 K' バレーでその非対称性は逆転する。バレーの自由度は擬スピンと見なすことができ、スピントロニクスでバレー分極を定義すると、大きなバレー分極電導が示された。境界はバレー・トロニクスのバレー・フィルターとして働く。また、扁平したカーボンナノチューブ(図1)において面間相互作用を有効ポテンシャルとして取り入れ、任意の重なりについて電子状態の変化を明らかにした。これらの研究において、層間相互作用が電子状態、電気伝導に多様で顕著な影響を及ぼすことを明らかにした。

連携研究者(産業技術総合研究所 機能材料コンピュータシミュレーションデザイン研究センター 森下徹也主任研究員)は、本プロジェクト開始までに、 $\text{Si}(111)$ 面を表面に持つ単層及び2-5層の2次元 Si ナノシート(シリセン)及び分子修飾された単層シリセンに関して研究成果を挙げた。

2. 研究の目的

新しい原子層物質は、グラフェンと同様ファン・デル・ワールス相互作用で弱く結合し、絶縁体から金属まで様々な電気特性を示す。申請者はこれまで、グラフェン、カーボンナノチューブを有効質量近似により理論的に調べ、層欠陥における谷分極電導という特異な現象を理論的に予言し、扁平したカーボンナノチューブにおける層間相互作用の影響を明らかにしてきた。この研究では原子層物質間の層間相互作用を、第一原理計算を専門とする分担者と協力しながら有効質量近似により取り扱い、単層、複数層の電子状態と電気伝導特性、ヘテロ接合における面間、面内の電気伝導など、原子層の理論を構築する。

3. 研究の方法

グラフェンの層間相互作用には有効質量近似の方法を用い、層間の有効相互作用、有効境界条件さらには電子状態をモデル計算する。高次トポロジカル絶縁体の研究には格子モデルの直接対角化による電子状態計算を行う。多様な原子層物質の構造を調べるため、密度汎関数理論に基づく第一原理分子動力学シミュレーションを行い、さらには電子状態も決定する。さらに、レーザー電場下での原子層物質の反応を調べるため、時間依存密度汎関数理論による第一原理分子動力学計算を用いた。

4. 研究成果

(1)端が閉じた2層グラフェンの面間相互作用:本プロジェクト開始前に扁平したカーボンナノチューブを調べ、その電子状態の層間相互作用依存性を明らかにしたが、それを端が閉じた2層グラフェンとみなして再検討した。すなわち2層グラフェンを有効質量理論で取り扱い、2層の重なり方に依存する有効的な層間相互作用を導出した。閉じた端を有効的な境界条件により接続した1層グラフェンとして取り扱った。特に層間相互作用が重要となるアカイラルな構造の場合について詳しく調べた。アームチェア型、ジグザグ型ナノチューブが扁平したとき、層間相互作用は2層のずれによって大きく変化する。それに従い2層グラフェンの電子状態は大きく変化する。これらの状態の上下層の波動関数は導出した境界条件によく整合し、閉じた境界の影響をほとんど受けないことを明らかにした。その結果、半導体から金属へまた半導体へ変化する電子状態は、対応する2層グラフェンのエネルギー分散関係を離散化したものとして概ね理解された。

(2)2層GaN原子層の安定構造と電子状態:連携研究者およびポスドクのAnh Khoa Augustin Luと協力しIII-V族半導体物質の2次元構造を、密度汎関数理論に基づく第一原理分子動力学シミュレーションにより研

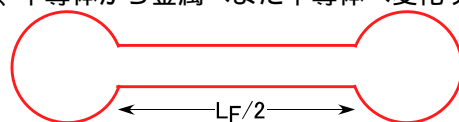


図1: 扁平したカーボンナノチューブ

究した。特に、GaNの2層2次元構造の安定構造を探索した。その結果、有限温度において準安定状態を含む複数の安定構造が得られた。これまでの先行研究で得られていた平面2層ハニカム構造は予想に反して最安定構造ではなく、図2に示すバックリングを伴うGaN特有の2次元構造が、最安定構造となることが初めて明らかになった。また、バックリングを伴う複数の構造は、室温以上で共存し得ることもわかった。歪を加えることでバンドギャップが間接遷移から直接遷移型に変化することもわかり、ナノデバイス材料としての応用が期待される。

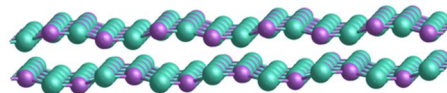


図2：2層GaNのバックリング構造

さらに、実験のGaN原子層は孤立しておらずキャップ層と化学結合していることをふまえ、2層GaN原子層の水素終端による影響を調べた。その結果、バックリングを伴うGaN特有の構造は変わらないものの、水素濃度により詳細な最安定構造が変化しうることを示した。

(3) 2次元、3次元高次トポロジカル絶縁体と層間の相互作用：カイラル対称性のある2次元において、コーナーに局在した状態の形状依存性を解明した。コーナーを形成する2つの辺が結晶方位となす角によって、コーナー状態が出現する条件を明らかにした。このとき2次元系の普通のトポロジカル指数は自明であり、高次トポロジカル絶縁体の一例となっているが、結晶の対称性を要請していない点が新しい。さらにカイラル対称性のある2次元を層状に積層したモデルの電子状態を計算し、コーナーまたはヒンジに局在した「トポロジカル・コーナー状態」を示した。形状依存性を調べ、2つの境界と結晶方位のなす角度を変えて、「トポロジカル・コーナー状態」が出現する条件を明らかにした。一般の凸多角形において、出現する「トポロジカル・コーナー状態」の数とその条件を解明した。この3次元モデルは、対称性を何も想定しないところに特徴があり、結晶トポロジカル絶縁体のコーナー、ヒンジ状態とは異なる。

さらにこの3次元高次トポロジカル絶縁体の理解を深めるため、2次元高次トポロジカル絶縁体間の層間相互作用を可変パラメータとして導入した理論を構築し、新たに3次元高次トポロジカル半金属体相を提案した。

(4) グラフェンナノリボンを用いた光信号変調：研究分担者は、紫外光をグラフェンナノリボンに照射し、レーザー偏光方向をナノリボンのシート方向に平行かつリボンの長手方向に垂直に指定した場合には、グラフェンナノリボンによる誘導電場がTH_zの周波数でその振幅が増減することを突き止めた。この結果は、光伝導特性を示す半導体とグラフェンナノリボンを組み合わせると、紫外光照射によりTH_zシグナル発信する小型のデバイスを作成できることを示唆している(図4)。

グラフェンナノリボンを、光伝導特性を有する半導体素子の上に置き、それに紫外線(UV)を照射するとUV光の強度がTH_zで変調され半導体素子に照射されるので、回路を流れる電流がTH_zで変調される。図4の下方で示されたアンテナに回路はつながっており、アンテナよりTH_z発振が生じる。

(5) 水分子の分解反応に向けた炭素材料：効果的な水分子の分解反応に応用できる炭素材料を調べた。水分子に直接レーザー照射するよりもおよそ4分の1のレーザーエネルギー強度(フルエンス)でグラフェン近傍に配置した水分子が分解できることを、グラフェン上に分子1層分に配置した水分子にて検証した。図5はランダムな3通りの水分子のグラフェン上の初期配置から決定された安定構造のもとでのレーザー照射による水分解の様子である。想定されたレーザー条件は基本波長300nm、半値幅10fs、最大レーザー強度6.5V/Å²である。

さらに、グラフェンの代わりにカーボンナノチューブ(CNT)を用いればさらに低い8分の1以下のレーザーエネルギー強度(フルエンス)で水の分解を促進することをシミュレーションで見出した。図6は、CNT周辺に配置した水分子の分解するシミュレーションの様子を示す。基本波長300nm、半値幅10fs、最大レーザー強度4V/Å²を想定した結果である。

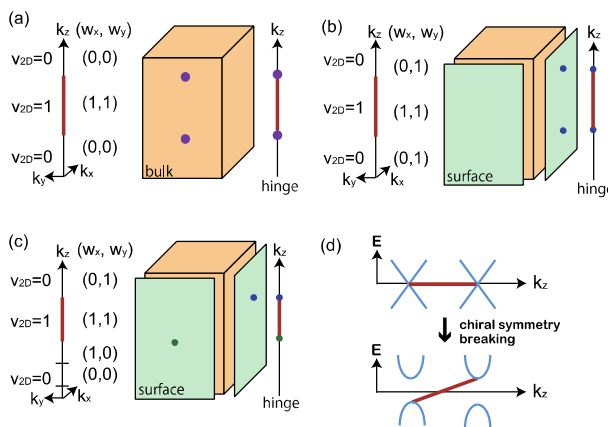


図3：z方向の層間相互作用を可変パラメータとしたときの、ヒンジ状態とトポロジカル指数

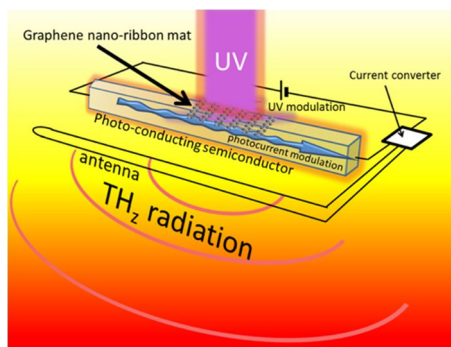


図4：グラフェンナノリボン小型デバイスの模式図

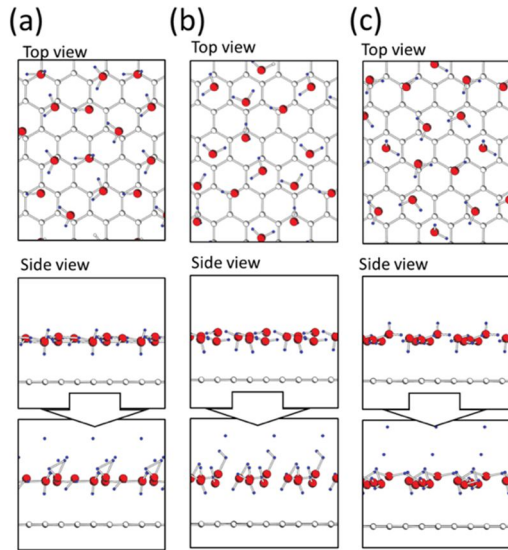


図5: グラフェン上の水分子のレーザー光による分解シミュレーション(a)、(b)、(c)の最上段はそれぞれ異なるランダム配置から構造決定されたグラフェン上1分子層の水分子。中断はそれをグラフェン層方向から見た図、最下段はレーザー照射後のシミュレーション結果。

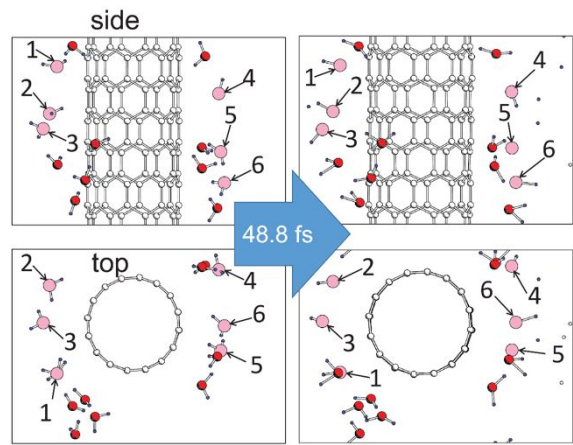


図6: (左) レーザー照射前の(8,0)ナノチューブとその周りの水分子。番号を打ったものが後に分解する。上の段がチューブ軸に垂直な方向より見た図。下の段がチューブ断面に垂直な方向より見た図。(右)レーザー照射後48.8 fs後のスナップショット。水分子の一部が分解されナノチューブ直径は少し大きくなるがその後元の大きさに戻る。

(6)化学修飾したシリセンの構造安定性と電子状態: 連携研究者はシリセンに関する研究を更に推進し、多層シリセンや金属表面上シリセンに関する以下の成果を挙げた。

CaSiF 結晶内で形成される2層シリセンの構造安定性を、シリセン表面のダングリングボンドに注目して第一原理計算により検証した。実験では、含有されるフッ素化合物の濃度により、CaSiF 内で形成される2層シリセンの構造が変化することが見出されている。CaSiF 層内のスリット空間内に形成される2層シリセン構造のフッ素化合物濃度による影響を明らかにする目的で、第一原理分子動力学(MD)計算を実行した。その結果、フッ素含有量が少ないと八ニカム格子の層から成る2層シリセンが安定に存在することがわかった。一方、フッ素含有量が増加すると、4員環と5員環を保持する波型の2層シリセン構造が形成されることがわかった。これは、シリセン層の表面に存在するダングリングボンドの影響によることが詳細な解析から明らかになった。即ち、フッ素含有量が少ない状況では、Ca からの電子によりシリセン表面のダングリングボンドが占有され、八ニカム格子から成る2層シリセン構造が安定になる。一方フッ素含有量が増加すると、ダングリングボンドを占有していた電子はフッ素に捕られるため、電子数が足りない状態になり構造が不安定になる。それにより、2層シリセンはダングリングボンドの数が少ない構造へ転移することがわかった。この成果により、シリセンとCaSiF 層との界面上のフッ素含有量を制御することで、シリセンの構造を制御できることがわかった。また、同様の効果がカルシウム原子の一部をカリウム原子に置換することでも得られることを見出した。カリウム原子に置換することで構造転移が起きることを理論的に予測し、それにより更にバンドギャップの制御も可能であることを明らかにした。

金属表面上の単層シリセンに関しては、表面分子吸着に関する研究成果を挙げた。第一原理MD 計算により、毒性ガスの構成分子であるSO₂、NO₂、H₂S 各分子のAg(111)/シリセン上における吸着サイトや吸着配向を同定し、さらに吸着エネルギーも評価した。その結果、SO₂ とNO₂ は化学吸着である一方、H₂S は物理吸着であることがわかった(図7)。また、NO₂ は吸着時に分子解離し、NO 分子を排出することもわかった。本成果より、シリセンの分子センサーや分子吸蔵材料への応用が期待される。

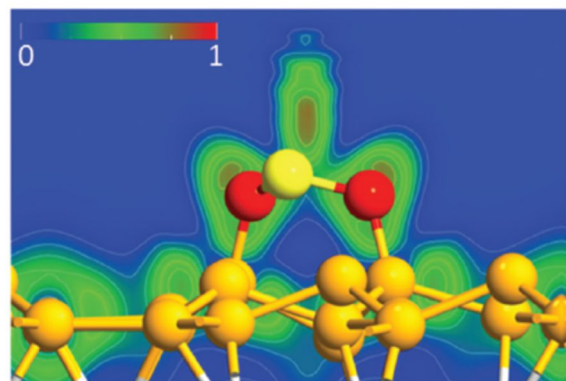


図7: Ag(111)/シリセンに吸着したSO₂分子の電子状態分布

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 6件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Augustin Lu Anh Khoa, Yayama Tomoe, Morishita Tetsuya, Spencer Michelle J. S., Nakanishi Takeshi	4. 巻 123
2. 論文標題 Uncovering New Buckled Structures of Bilayer GaN: A First-Principles Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 1939 ~ 1947
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b09973	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Miyamoto Yoshiyuki, Zhang Hong, Cheng Xinlu, Rubio Angel	4. 巻 99
2. 論文標題 Ab initio simulation of laser-induced water decomposition close to carbon nanotubes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 165424-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.165424	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Miyamoto Yoshiyuki	4. 巻 91
2. 論文標題 Electron dynamics on gold surfaces driven by short laser pulses	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The European Physical Journal B	6. 最初と最後の頁 228
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epjb/e2018-90091-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yayama Tomoe, Lu Anh Khoa Augustin, Morishita Tetsuya, Nakanishi Takeshi	4. 巻 58
2. 論文標題 First-principles study of two-dimensional bilayer GaN: structure, electronic properties and temperature effect	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SCCB35 ~ SCCB35
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab06b2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miyamoto Yoshiyuki, Zhang Hong, Cheng Xinlu, Rubio Angel	4. 巻 96
2. 論文標題 Modeling of laser-pulse induced water decomposition on two-dimensional materials by simulations based on time-dependent density functional theory	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115451
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.115451	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zhang Hong, Miyamoto Yoshiyuki, Cheng Xinlu	4. 巻 111
2. 論文標題 Detection of coherent electron dynamics in benzene and polycyclic aromatic hydrocarbons by two antiphase pulses: An ab initio study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 253301 ~ 253301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4998634	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Nakano Hideyuki, Tetsuka Hiroyuki, Spencer Michelle J. S., Morishita Tetsuya	4. 巻 19
2. 論文標題 Chemical modification of group IV graphene analogs	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 76 ~ 100
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/14686996.2017.1422224	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Takeshi Nakanishi and Tsuneya Ando	4. 巻 94
2. 論文標題 Boundary conditions at closed edge of bilayer graphene and energy bands of collapsed nanotubes	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 155401-1-22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.94.155401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ja-He Lin, Hong Zhang, Xinlu Cheng, Yoshiyuki Miyamoto	4. 巻 94
2. 論文標題 Two-dimensional wide-band-gap nitride semiconductors: Single-layer 1T-XN ₂ (X = S, Se, and Te)	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 195404-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.94.195404	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Okugawa Ryo, Hayashi Shin, Nakanishi Takeshi	4. 巻 100
2. 論文標題 Second-order topological phases protected by chiral symmetry	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235302-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.235302	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計30件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 16件)

1. 発表者名 徳田 悟 , 相馬 清吾, 佐藤 宇史, 高橋 隆, 中西 毅
2. 発表標題 ベイズ推定に基づくスペクトル分解: その数理とARPESへの展開
3. 学会等名 統計数理研究所・東北大学流体科学研究所・材料科学高等研究所合同ワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. K. A. Lu, T. Yayama, T. Morishita, T. Nakanishi,
2. 発表標題 New Buckled Structures of Bilayer GaN and their Properties
3. 学会等名 2018 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井村 健一郎, 吉村 幸徳, 林 晋, 中西 毅
2. 発表標題 Higher-order topological insulators and protected corner states
3. 学会等名 第3回研究会 科研基盤S「トポロジカル相でのバルク・エッジ対応の多様性と普遍性：固体物理を越えて分野横断へ」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 吉村 幸徳, 林 晋, 井村 健一郎, 中西 毅
2. 発表標題 トポロジカルにまもられたコーナー状態のシステム形状変形に対する頑強性
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 徳田 悟, 相馬 清吾, 佐藤 宇史, 高橋 隆, 中西 毅
2. 発表標題 ARPESによって観測されるディラックギャップのベイズ推定
3. 学会等名 第1回計測インフォマティクス研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Yayama, A. K. A. Lu, T. Morishita, T. Nakanishi,
2. 発表標題 First-principles molecular dynamics study of two-dimensional bilayer GaN
3. 学会等名 International Workshop on Nitride Semiconductors 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 屋山 巴, Lu Anh Khoa Augustin, 森下 徹也, 中西 毅
2. 発表標題 第一原理分子動力学法による2次元GaNの安定構造の探索
3. 学会等名 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Lu Anh Khoa Augustin, 屋山 巴, 森下 徹也, 中西 毅
2. 発表標題 Uncovering new structures of bilayer GaN and their properties
3. 学会等名 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. K. A. Lu, T. Yayama, T. Morishita, T. Nakanishi,
2. 発表標題 Study of 2D GaN: New bilayer structures displaying buckling and their properties
3. 学会等名 Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 屋山巴、A. K. A. Lu、森下徹也、中西毅、
2. 発表標題 第一原理分子動力学法による2次元GaNの新規構造探索
3. 学会等名 応用物理学会春季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Morishita
2. 発表標題 Logarithmic mean-force dynamics and its extension: polygonal silicene formation on the Al(111) surface
3. 学会等名 Computational Sciences Workshop 2019 (CSW2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Miyamoto, H. Zhang, X. Cheng, A. Rubio
2. 発表標題 Enhanced Laser Field by Planar and Curved Graphitic Materials Applied for Water Decomposition: A TDDFT Study
3. 学会等名 NT18、International Conf. on science and application of nanotubes and low-dimensional materials (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Zhang, Y. Miyamoto, X. Cheng, A. Rubio
2. 発表標題 TDDFT approach on laser field enhancement by carbon nanotube and photo-decomposition of water
3. 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Nakanishi
2. 発表標題 Effective-mass theory of inter-layer interaction in bi-layer graphene and collapsed carbon nanotubes
3. 学会等名 14th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 徳田;悟, 相馬;清吾, 佐藤;宇史, 高橋;隆, 中西 毅
2. 発表標題 ARPESに対するベイズ的スペクトル分解: バンド分散のモデル選択
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 吉村 幸徳, 林 晋, 中西 毅
2. 発表標題 トポロジカルにまもられたコーナー状態とシステム形状依存性について
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井村 健一郎, 吉村 幸徳, 林 晋, 中西 毅
2. 発表標題 多極子トポロジカル絶縁体・ポンプ系とコーナー状態/不変量
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Miyamoto
2. 発表標題 Application of real-time TDDFT approach on ultra-fast phenomena in condensed matters
3. 学会等名 Telluride School on Time Dependent Density Functional Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Miyamoto, H. Zhang, X. Cheng, A. Rubio
2. 発表標題 Laser-induced water decomposition near 2D sheets studied by TDDFT
3. 学会等名 APS March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tetsuya Morishita
2. 発表標題 Structural diversity of silicene
3. 学会等名 International Workshop on Computational Nanotechnology (IWCN2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 森下 徹也、Michelle Spencer、中野 秀之、八百川 律子
2. 発表標題 CaSi ₂ F _x 化合物内の2層シリセンの構造多形
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takeshi Nakanishi
2. 発表標題 Effective-mass theory for collapsed carbon nanotubes and bilayer graphene with closed edges
3. 学会等名 CCTN16: 11th International Symposium on Computational Challenges and Tools for Nanotubes (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Takeshi Nakanishi and T. Ando
2. 発表標題 Electronic states of collapsed carbon nanotubes: Displaced bilayer graphene with closed edges
3. 学会等名 NT16 The Seventeenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 T. Morishita
2. 発表標題 Microscopic mechanism of the oxidation of silicene on Ag(111)
3. 学会等名 International Conference on Pure and Applied Chemistry 2016: 2D symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 T. Morishita
2. 発表標題 First-principle study of electronic properties of double-layer silicene
3. 学会等名 Computational Science Workshop 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 森下徹也
2. 発表標題 Logarithmic mean-force dynamics (LogMFD) for sampling rare events and free-energy reconstruction
3. 学会等名 理研QBiCセミナー (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 森下 徹也、米澤康滋、伊藤篤史
2. 発表標題 複数レプリカを用いた対数平均力ダイナミクスによる自由エネルギー計算
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 宮本良之
2. 発表標題 Enhancement of laser-induced water decomposition by 2D sheets studied by first-principles simulations II
3. 学会等名 第52回フラレンナノチューブグラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Miyamoto
2. 発表標題 Comparison of electronic and photo-chemical properties of carbon nanotube and graphene studied by TDDFT simulations
3. 学会等名 2016-CNT25 INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON CARBON NANOTUBE (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Y. Miyamoto
2. 発表標題 Theory for UV to THz light conversion using graphene nano-ribbons
3. 学会等名 NT16 The Seventeenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	宮本 良之 (Miyamoto Yoshiyuki) (70500784)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・材料・化学領域・上 級主任研究員 (82626)	