

令和 3 年 6 月 1 日現在

機関番号：34504

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H01154

研究課題名(和文)原子膜物質におけるバレー流の熱・光学制御、新規トポロジカル材料の設計

研究課題名(英文)Thermal and Optical Control of Valley-Polarized Current and Theoretical Design of Novel Topological Materials

研究代表者

若林 克法(Wakabayashi, Katsunori)

関西学院大学・理工学部・教授

研究者番号：50325156

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,100,000円

研究成果の概要(和文)：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では、エッジや表面などの境界面の効果によって、特異な電子物性が発現する。本研究課題では、電荷・スピンに次ぐ、第三の自由度であるバレーの状態に着目した電子物性の光学制御に関する理論、バレー接続に着目したトポロジカル物質の設計指針に関する理論提案を行った。さらに、フォトニック結晶への展開をすることで、実験グループに新たなデバイス設計指針を提示した。本研究課題の成果によって、原子膜エレクトロニクスデバイスの物理の基礎学理の発展だけでなく、新たなトポロジカル物質やデバイス設計への展開をもたらすものと期待される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

現代の高度情報化社会を支える電子デバイスは、電子のもつ電荷の自由度を制御することで、情報の伝達・処理を行っている。本研究課題では、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に着目し、電荷・スピンに次ぐ、第三の自由度であるバレーの状態に着目した電子物性の光学制御、バレー接続に着目したトポロジカル物質やデバイスの設計指針の提案を行った。本研究課題の成果によって、原子膜エレクトロニクスデバイスの物理の基礎学理の発展だけでなく、新たなトポロジカル物質やデバイス設計への展開が今後期待できる。

研究成果の概要(英文)：In atomically-thin materials such as graphene and transition metal chalcogenides, where the thickness of the system is one atomic layer, unique electronic properties emerge owing to their boundary effects such as edges and surfaces. In this research project, we have focused on the third degree of freedom, the valley state, after the charge and spin states, for optical control of electronic properties. In addition, we proposed a new material exploration and device design for experimental groups by developing photonic crystals. The results of this research project are expected to contribute not only to the fundamental physics of atomically-thin electronics devices, but also to the development of new topological materials and device designs.

研究分野：ナノサイエンス

キーワード：原子膜物質 トポロジカル物質 グラフェン 物性理論 計算物理学 トポロジー ナノエレクトロニクス スピントロニクス

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、研究者個人に帰属します。

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19（共通）

### 1. 研究開始当初の背景

現代の高度情報化社会を支える電子デバイスは、電子のもつ電荷の自由度を制御することで、情報の伝達・処理を行っている。電子デバイスのさらなる高速化、大容量化・集積化の技術的な追求によって、電子デバイスの微細化はナノメートルスケールの領域まで達している。さらに近年では、電子のもつ電荷の自由度だけでなく、より多くの自由度を利用したデバイスの研究が活発化している。代表的なものとしては、スピンの自由度を制御したスピントロニクスデバイスであり、磁気抵抗効果デバイスなどとして実用化されている。

電荷・スピンの自由度の他に、結晶内の運動量に着目したバレートロニクスの可能性が提案され、理論・実験の両面から盛んに研究が展開されている。また、低消費電力でのスピン流の輸送については、物質のトポロジカル状態を制御することで、散逸の極めて少ない表面スピン流を伝搬可能であることが、近年のトポロジカル絶縁体の研究から明らかになっている。そこで、これらの物性を有する物質・材料の探索や設計が重要な課題となっている。そこで、本研究課題では、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に着目し、その光学応答特性やトポロジカル特性を理論数値的に解析することで、研究を進めた。さらに、新しい物性や機能を設計する方針を提示した。

原子膜物質の特徴は、機能設計を行う上で、その高い自由度と柔軟性にある。たとえば、グラフェンを例にとっても、層の枚数や形状を変えるだけで、その電子状態を変調すること、機能を付加することが可能である。また、様々な異なる原子膜を、レゴブロックのように人工積層することで、天然にはない人工物質や機能設計ができる。さらに、原子膜物質は、電荷そしてスピンの他に、バレーの自由度を使ったバレートロニクス素子を設計する上で、絶好の材料と目されている。バレー偏極流の生成制御には、円偏光電磁場に励起が極めて有効であり、実験的な実証が進められている。

上記の背景を踏まえて、我々は、本研究課題を開始する前に、(1) カーボンナノチューブに円偏光電磁場を照射することで、バレー偏極状態が生成できること、さらには、(2) トポロジカルドメイン境界でのバレー・ゼーベック効果によってバレー流が生成できることを示した。さらに、(3) ベリー曲率だけでなく、ベリー接続に着目することで、トポロジカル物質の新しい設計指針の可能性を見出した。本研究課題では、上記の3つのアイデアを有機的に結合することで、バレー流の生成・制御の方法の提案、トポロジカル状態の制御、原子膜・分子膜における新奇電子物性と光学応答特性を主題として、研究を推進した。

### 2. 研究の目的

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では、エッジや表面などの境界面によって、特異な電子物性が発現することを、我々は明らかにしてきた。本研究課題では、電荷・スピンに次ぐ、第三の自由度であるバレーに着目し、その生成方法と輸送制御性を、円偏光電磁場照射などによる光学的な方法などによって実現することを目的とし、その基礎理論の整備を行う。さらに、運動量空間におけるベクトルポテンシャルに対応するベリー接続に着目した、新しいアプローチによるトポロジカル材料の設計指針の提案を行い、実験グループに新たな物質探索・合成指針を提示する。本研究課題によって、原子膜材料からなる系における、バレー流の生成・制御の新しいアプローチの展開、新たなトポロジカル状態の制御の指針が期待されるだけでなく、「原子膜エレクトロニクスデバイスの物理」の基礎学理に新たな展開を惹起させる。

### 3. 研究の方法

本研究課題では、グラフェンおよび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の電子物性を理論的に解析し、新奇物性やトポロジカル特性の解明を通して、新しい機能や物性を有する新物質や新機能デバイスの設計を行うことを目的としている。そのために、原子膜物質の電子状態を強結合モデルおよび有効電子モデルによって記述した上で、線形応答理論によって光学応答特性や電子スピン伝導特性を解析した。さらに、リボン系や接合系の伝導解析にはランダウアー公式によって解析を行った。さらに、硫化スズにおけるフォノンモード解析や、WSe<sub>2</sub>の酸化過程における電子状態解析については、実験結果との定量的な比較解析が必要であったため、第一原理電子状態計算によって行った。

### 4. 研究成果

本研究課題の研究成果は、原子膜物質の電子物性からトポロジカル物質の理論まで、広範囲におよぶ。ここで、代表的な幾つかについて、その概要を述べる。

## (1) 高次トポロジカル状態によるコーナー局在状態

近年、電子エネルギーバンド構造の位相幾何学（トポロジー）的な性質から、電子材料を区別し、新しい電子相を有する物質を探索する研究が、世界中で爆発的に行われている。特に、トポロジカル絶縁体と呼ばれる物質では、物質の表面やエッジなどの境界面において、無散逸なスピンの流が現れることが知られている。この特性を利用することで、超低消費電力の電子デバイスや量子計算素子への応用が期待されている。

従来から知られているトポロジカル絶縁体では、スピン軌道相互作用が重要な役割を果たしている。我々は、スピン軌道相互作用を導入せずに、高次のトポロジカル状態を実現する物質群の理論設計指針を提示した。さらに、エッジに沿って電流が散逸をせずに完全に伝導する機構があるだけでなく、その逆の極限である電子をコーナーに強く局在させる機構も併存させることが可能であることを指摘した(F. Liu, H.-Y. Deng, K. Wakabayashi, PRL(2019))。この成果を活かすれば、超低消費電力で光や電子を伝搬させる光・電子デバイスへの応用へと期待できる。また、コーナー状態を利用することで、光や電子を空間的に閉じ込める量子ドットや光共振器を設計することが可能である。

本研究課題では、図1に示すような最近節格子間の電子ホッピングエネルギーが空間的に異なる六角格子を、理論モデルとして考えた。薄い黄色のひし形の領域は単位胞である。単位胞内部での電子ホッピングエネルギー( $\gamma$ )を青色の実線、単位胞間同士での電子ホッピングエネルギー( $\gamma'$ )をオレンジ色の実線で表している。

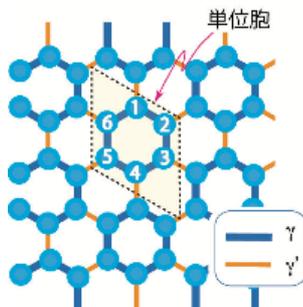


図1：トポロジカル状態を示す2次元六角格子の模式図。最近接格子点は実線で結ばれており、破線のひし形は単位胞を表しています。また、単位胞内部での電子ホッピングエネルギー( $\gamma$ )を太線、単位胞間同士( $\gamma'$ )での電子ホッピングエネルギーを青色の実線として表しています。単位胞間のホッピングエネルギー $\gamma'$ の大きさが、 $\gamma$ の大きさより大きい場合に、トポロジカル状態が実現する。

単位胞間のホッピングエネルギー( $\gamma'$ )を徐々に小さくしていくことで、電子状態が変化し、 $|\gamma| < |\gamma'|$ となると、トポロジカル状態が出現する。リボン状構造での電子状態を考えると、 $|\gamma| < |\gamma'|$ の条件下では、図2に示すように、青線と赤線で示す新しいエネルギー分散がバンドギャップ内部に現れる。これらのエネルギー分散を担う電子の状態は、エッジ付近にのみ振幅をもっており、電流はエッジのみを伝って流れる。このようなエッジが担う電流は、不純物や欠陥による電子散乱を受けにくいいため、極めて高い電子伝導性の起源となり、超低消費電力で光や電子を伝搬させる光・電子デバイスへの応用が期待できる。

さらに、有限サイズの構造を考えると、図3に示すように、電子は試料のコーナー部分に強く局在を起し、コーナー状態が現れる。この性質を用いると、電子や光を空間のある一部分に閉じ込めることが可能になる。この結果を用いることで、光や電子を空間的に閉じ込める量子ドットや光共振器を設計することが可能になる。

本研究成果によって、高次のトポロジカル状態をもつ物質では、エッジに沿って電流が散逸をせずに完全に伝導する機構があるだけでなく、その逆の極限である電子をコーナーに強く局在させる機構も併存させることが可能であることが明らかになった。本研究で明らかになった原理は、広く2次元の電子材料に適用でき、さらに、スピン軌道相互作用を必要としないため、フォトニック結晶に対しても適用できる。今後、この理論指針にしたがった物質設計およびデバイス設計が期待される。

また、本研究成果に関連して、東京大学生産技術研究所の実験グループと共同研究を実施し、フォトニック結晶におけるトポロジカルコーナー状態の観測に関する理論的サポートを行った(Y.Ota et al., Optica (2019))。

## (2) 2D SSHモデルの波動関数の解析解の導出とトポロジカル相転移

Su-Schrieffer-Heeger (SSH) モデルは、トポロジカル物理を記述する基本的な理論模型の一つとして、近年活発に研究が進められている。SSHモデルは、電子の飛び移り積分が単位胞内( $\gamma$ )と単位胞間( $\gamma'$ )とで異なる値を有する一次元の強結合モデルとして記述される。また、これら2つの飛び移り積分の比によって、バルクの波動関数によるザック位相が、 $\pi$ または0の値をとり、トポロジカル相転移が起きることが知られている。特に、 $\gamma < \gamma'$ においてザック位相が有限となり、バルク-エッジ対応から、エッジ状態が現れる。

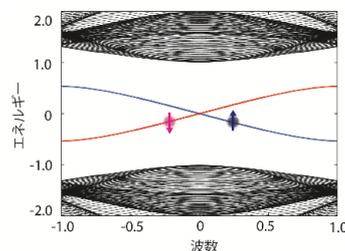


図2：リボン構造でのエネルギー分散関係。 $|\gamma| < |\gamma'|$ では、ギャップ内部にエッジ状態に起因するエネルギー分散(青線と赤線)が現れる。そこでは、電子はエッジに沿って、無散逸の電子伝導を実現する。

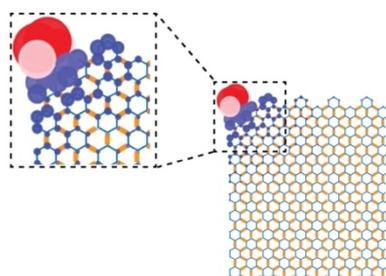


図3：擬スピンの空間分布。左上は、電子の空間分布。コーナーに電子が強く局在している様子がわかる。

我々は、SSHモデルを2次元正方格子に適用(2D SSHモデル)することで、2次元に拡張されたザック位相によって、2D SSHモデルのトポロジカル転移が特徴付けられることを指摘した。さらに、エッジ状態の出現を、数値計算によって確認した。しかし、電子の波動関数やエネルギー固有値の解析形は、得られていない状況であった。

そこで我々は、2D SSHモデルのリボン構造(1D SSHリボン)に着目することで、グラフェンナノリボンの波動関数の解析的導出で用いられたアプローチを使い、1D SSHリボンのエネルギー固有値と波動関数を解析的に求めることに成功した(D. Obana, F. Liu, K. Wakabayashi, PRB(2019))。これによってSSHリボンにおけるトポロジカル相転移点とリボン幅の関係を明らかにした。

### (3) 2D トリプチセン分子膜における光吸収特性

新しいトポジカル材料の探索設計についても、本研究課題で取り組んだ。トリプチセン分子膜は、図4(a)に示すようにトリプチセン分子から構成される二次元物質である。三員環と偶数員環からなる格子構造を持つため、その $\pi$ 電子構造は、図4(b)に示すような複数のカゴメバンドから構成される半導体である。また、この系では、円偏光電磁場照射によってKまたはK'バレーのいずれかの状態にいる電子を選択的に励起させることができると期待される。

そこで、トリプチセン分子膜が持つ特異なエネルギーバンド構造に着目し、Tight-binding modelを用いて、円偏光照射時の光吸収強度を計算した。図4(c)に示すように、トリプチセン分子膜に円偏光を照射した際の波数空間における吸収強度から、各運動量に対応するディラック電子を選択的に励起させることができることがわかった(M. Akita, et. al., PRB(2020))。これによってバレー偏極を利用した情報処理デバイスの設計が可能になると期待される。

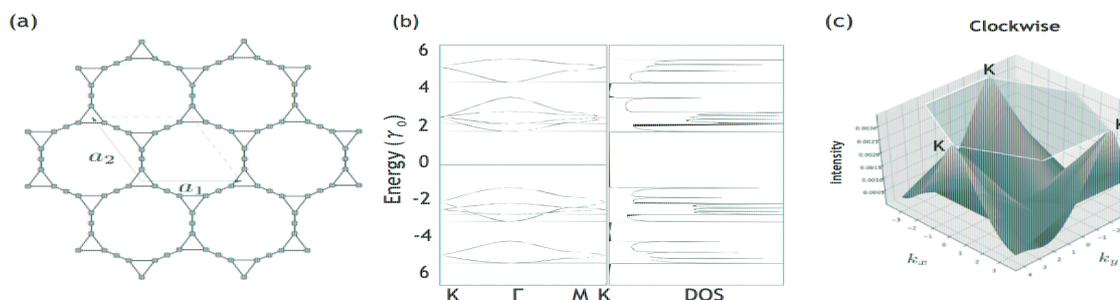


図 4: (a)トリプチセン分子膜の格子構造。(b)トリプチセン分子膜のエネルギーバンド構造。(c)円偏光照射時の価電子帯のディラック点から伝導帯のフラットバンドへのバンド間遷移における光吸収強度を1stBZ内に示した。右回りの円偏光に対してはK点近傍の状態で強い光吸収を示し(左図)、左回りの円偏光に対してはK'点近傍の状態の電子に対して強い光吸収を示す(右図)ことから、円偏光照射によって分極状態を生成できることがわかる。

### (4) 硫化スズ原子層における振動モード解析

面内の結晶構造が非対称な層状物質である硫化スズ(SnS)では、数ナノメートルの極薄構造でも面内の強誘電性を保持できる。SnSは、結晶成長の過程で、積層構造の異なる二つのバルク相が存在することや、層数に依存した強誘電性を持つことが報告されており、強誘電性を持つ極薄デバイスの作成には結晶内部構造や積層構造の解析が求められている。とりわけ、ラマン分光法は結晶内部の層数解析に有用な手段である。そこで我々は、バルク、単層および複数層のSnSについて、振動モードの結晶構造依存性を第一原理計算によって解析した。その結果、バルク構造ではラマン活性モードの出現位置と結合距離に、少数層構造ではラマン活性モードの出現位置と層の厚さに注目することでSnS結晶構造の同定を行うことができることを、第一原理計算を用いた解析によって明らかにした。

また、本研究成果に関連して、東京大学マテリアル工学専攻の実験グループと共同研究を実施し、単層SnSの作製に関する実験研究について、理論的サポートを行った(N. Higashitarumizu, Nature Comm. (2020))。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計22件（うち査読付論文 22件 / うち国際共著 18件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Fujii Yasumaru, Maruyama Mina, Wakabayashi Katsunori, Nakada Kyoko, Okada Susumu	4. 巻 87
2. 論文標題 Electronic Structure of Two-Dimensional Hydrocarbon Networks of sp <sup>2</sup> and sp <sup>3</sup> C Atoms	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034704 ~ 034704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.034704	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 Das Soumya Ranjan, Wakabayashi Katsunori, Yamamoto Mahito, Tsukagoshi Kazuhito, Dutta Sudipta	4. 巻 122
2. 論文標題 Layer-by-Layer Oxidation Induced Electronic Properties in Transition-Metal Dichalcogenides	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 17001 ~ 17007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b05857	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 Anh D. Phan, Nam B. Le, Nghiem T. H. Lien, and Katsunori Wakabayashi	4. 巻 122
2. 論文標題 Multilayered Plasmonic Nanostructures for Solar Energy Harvesting	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 19801 ~ 19806
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b05769	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 Tomoaki Kameda, Feng Liu, Sudipta Dutta, and Katsunori Wakabayashi	4. 巻 99
2. 論文標題 Topological edge states induced by the Zak phase in A3B monolayers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 75426
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.075426	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 Feng Liu, Hai-Yao Deng, and Katsunori Wakabayashi	4. 巻 122
2. 論文標題 Helical Topological Edge States in a Quadrupole Phase	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 86804
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.122.086804	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 Phan Anh D., Le Nam B., Nghiem T. H. Lien, Woods Lilia M., Ishii Satoshi, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 21
2. 論文標題 Confinement effects on the solar thermal heating process of TiN nanoparticle solutions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 19915 ~ 19920
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9cp03571k	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 Masashi Akita, Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, Susumu Okada, Katsunori Wakabayashi	4. 巻 101
2. 論文標題 Momentum selective optical absorption in triptycene molecular membrane	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 85418
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.085418	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 Anh D Phan, Cuong V Nguyen, Linh T Pham, Tran V Huynh, Vu Dinh D Lam, Anh-Tuan Le, Katsunori Wakabayashi	4. 巻 10
2. 論文標題 Deep Learning for the Inverse Design of Mid-Infrared Graphene Plasmons	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst10020125	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 Anh D. Phan, Tran Thi Thu Thuy, Nguyen Thi Kim An, Justyna Knapik-Kowalczuk, Marian Paluch, and Katsunori Wakabayashi	4. 巻 10
2. 論文標題 Molecular relaxations in supercooled liquid and glassy states of amorphous gambogic acid: Dielectric spectroscopy, calorimetry, and theoretical approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 25128
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5139101	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 Anh D. Phan, Do T. Nga, Do Chi Nghia, Vu Dinh Lam, Katsunori Wakabayashi	4. 巻 14
2. 論文標題 Effects of Mid Infrared Graphene Plasmons on Photothermal Heating	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Status Solidi. RRL	6. 最初と最後の頁 1900656
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssr.201900656	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 Daichi Obana, Feng Liu, and Katsunori Wakabayashi	4. 巻 100
2. 論文標題 Topological edge states in the Su-Schrieffer-Heeger model	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 75437
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.075437	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 Yasutomo Ota, Feng Liu, Ryota Katsumi, Katsuyuki Watanabe, Katsunori Wakabayashi, Yasuhiko Arakawa, and Satoshi Iwamoto	4. 巻 6
2. 論文標題 Photonic crystal nanocavity based on a topological corner state	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Optica	6. 最初と最後の頁 786-789
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OPTICA.6.000786	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 Anh D Phan, Justyna Knapik-Kowalczyk, Marian Paluch, Trinh X Hoang, Katsunori Wakabayashi	4. 巻 16
2. 論文標題 Theoretical model for the structural relaxation time in co-amorphous drugs	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Mol. pharmaceutics	6. 最初と最後の頁 2992-2998
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.molpharmaceut.9b00230	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 A. D. Phan, A. Zacccone, V.D. Lam, K. Wakabayashi	4. 巻 126
2. 論文標題 Theory of Pressure-Induced Rejuvenation and Strain Hardening in Metallic Glasses	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Lett.	6. 最初と最後の頁 25502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.126.025502	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 S.R. Das, K. Wakabayashi, K. Tsukagoshi, S. Dutta	4. 巻 10
2. 論文標題 Ab-initio investigation of preferential triangular self-formation of oxide heterostructures of monolayer WSe2	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Sci. Rep.	6. 最初と最後の頁 21737
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-78812-2	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 T.D. Cuong, A.D. Phan, K. Wakabayashi, P.T. Huy	4. 巻 538
2. 論文標題 Structural relaxation time and dynamic shear modulus of glassy graphene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Non-Crystalline Solids	6. 最初と最後の頁 120024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jnoncrysol.2020.120024	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 Naoki Higashitarumizu, Hayami Kawamoto, Chien-Ju Lee, Bo-Han Lin, Fu-Hsien Chu, Itsuki Yonemori, Tomonori Nishimura, Katsunori Wakabayashi, Wen-Hao Chang, Kosuke Nagashio	4. 巻 11
2. 論文標題 Purely in-plane ferroelectricity in monolayer SnS at room temperature	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Comm.	6. 最初と最後の頁 2428
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-16291-9	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 A.D. Phan, A. Jedrzejowska, M. Paluch, K. Wakabayashi	4. 巻 5
2. 論文標題 Theoretical and Experimental Study of Compression Effects on Structural Relaxation of Glass-Forming Liquids	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 11035-11042
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c00860	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 A.D. Phan, D.T. Nga, D.C. Nghia, V.D. Lam, K. Wakabayashi	4. 巻 14
2. 論文標題 Effects of Mid Infrared Graphene Plasmons on Photothermal Heating	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physica Status Solidi (RRL)	6. 最初と最後の頁 1900656
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssr.201900656	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 A.D. Phan, V.D. Lam, K. Wakabayashi	4. 巻 10
2. 論文標題 Cooperative nanoparticle self-assembly and photothermal heating in a flexible plasmonic metamaterial	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 41830-41836
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0RA07366K	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 A.D. Phan, K. Koperwas, M. Paluch, K. Wakabayashi	4. 巻 24
2. 論文標題 Coupling between structural relaxation and diffusion in glass-forming liquids under pressure variation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 24365-24371
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP02761H	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 D.T. Nga, A.D. Phan, V.D. Lam, L.M. Woods, K. Wakabayashi	4. 巻 10
2. 論文標題 Enhanced solar photothermal effect of PANi fabrics with plasmonic nanostructures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 28447-28453
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0RA04558F	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

〔学会発表〕 計26件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 15件)

1. 発表者名 Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological and Edge Effects on Electronic States of Graphene and Related Nanomaterials
3. 学会等名 1and2DM (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological and Edge Effects on Electronic States of Graphene and Related 2D materials
3. 学会等名 3rd Nippon-Taiwan Workshop on Innovation of Emergent Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological and Edge Effects on Electronic States of Graphene and Related 2D materials
3. 学会等名 FNTG (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 秋田将志, 藤井康丸, 丸山実那, 岡田晋, 若林克法
2. 発表標題 トリプチセン分子膜における光吸収の理論的計算
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 LIU Feng, 若林克法
2. 発表標題 Helical topological edge states in a quadrupole phase
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 尾花大地, LIU Feng, 若林克法
2. 発表標題 2DSSHモデルにおけるトポロジカルエッジ状態の解析計算
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 秋田将志, 藤井康丸, 丸山実那, 岡田晋, 若林克法
2. 発表標題 トリプチセン分子膜における架橋構造と偏光依存性
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Kameda, F. Liu and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Edge States Induced by Zak 's Phase in A3B Monolayers
3. 学会等名 MNC2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 F. Liu and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Dipoles and Quadrupoles
3. 学会等名 MNC2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daichi Obana, Feng Liu, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Analytic Properties of topological state in 2D SSH model
3. 学会等名 FNTG56
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomoaki Kameda, Feng Liu, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Edge States Induced by Zak ' s Phase in A3B Monolayers
3. 学会等名 FNTG56
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Feng Liu, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological dipoles and quadrupoles
3. 学会等名 1and2DM ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 F. Liu, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological edge and corner states in 2D SSH model
3. 学会等名 RPGR2019 ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 D. Obana, F.Liu, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Edge States of 2D SSH Model: Analytical View
3. 学会等名 PRGR2019 ( 国際学会 )
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Akita, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Theoretical Study on Circularly Polarized Light Absorption in Triptycene Molecular Membrane
3. 学会等名 RPGR2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Itsuki Yonemori, Sudipta Dutta, K. Nagashio, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Vibrational mode analysis of SnS thin films by density functional perturbation theory
3. 学会等名 RPGR2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Akita, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Optical Absorption of The Circularly-Polarized Light Irradiation in Triptycene Molecular Membrane
3. 学会等名 MRM2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Properties of Graphene and Photonic Extension
3. 学会等名 The International Symposium on Advanced Science and Technology (ISAST) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Topological States of 2D SSH Model and Photonics Extension
3. 学会等名 The 3rd ICYS & MANA Reunion Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Huyen T. Phan, F. Liu, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Valley States in Honeycomb Photonic Crystals
3. 学会等名 MANA International Symposium 2021 jointly with ICYS (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ren Habara, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Optical induced Spin Current of Monolayer NbSe <sub>2</sub>
3. 学会等名 MANA International Symposium 2021 jointly with ICYS (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Huyen T. Phan, F. Liu, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Corner States of Hexagonal Photonic Crystals with Broken Inversion Symmetry
3. 学会等名 JSAP Spring
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ren Habara, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Optical induced Spin Current of Monolayer NbSe <sub>2</sub>
3. 学会等名 The 60th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 I. Yonemori, Sudipta Dutta, K. Nagashio, K. Wakabayashi
2. 発表標題 第一原理計算を用いた SnS 薄膜の振動モード解析
3. 学会等名 JSAP Spring
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Itsuki Yonemori, Sudipta Dutta, K. Nagashio, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Theoretical Study on Raman Active Modes of SnS Thin Films
3. 学会等名 The 60th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ren Habara, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Optical induced Spin Current of Monolayer NbSe <sub>2</sub>
3. 学会等名 ATI ナノカーボン研究会
4. 発表年 2020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
研究協力者	岡田 晋  (Okada Susumu)  (70302388)	筑波大学・数理物質科学研究科・教授   (12102)	第一原理電子状態計算に関する議論・助言
研究協力者	草部 浩一  (Kusakabe Koichi)  (10262164)	大阪大学・基礎工学研究科・准教授   (14401)	第一原理電子状態計算および理論モデリングに関する議論・助言
研究協力者	日比野 浩樹  (Hibino Hiroki)  (60393740)	関西学院大学・理工学部・教授   (34504)	原子膜物質について物性実験の立場から助言
研究協力者	塚越 一仁  (Tsukagoshi Kazuhito)  (50322665)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究拠点・主任研究者   (82108)	原子膜物質について物性実験の立場から助言

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
インド	IISER Tirupati	Indian Statistical Institute		
ベトナム	Phenikaa University			
英国	Exeter University			
ポーランド	SMCEBI			