

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 11 日現在

機関番号：34504

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01019

研究課題名（和文）二次元原子膜物理とフォトニクスの分野横断によるトポロジカル機能設計

研究課題名（英文）Theoretical Functional Design of 2D Topological Materials and Photonics Applications

研究代表者

若林 克法（Wakabayashi, Katsunori）

関西学院大学・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） 13,200,000円

研究成果の概要（和文）：近年、物質科学をトポロジー（位相幾何学）という数学概念で捉え直すことで、結晶中のブロッホ電子が有する波動関数の位相情報によって、エッジ・ヒンジ・コーナーなどの物質境界に出現する特異な局在状態が規定されることがわかってきている。本研究では、二次元原子膜の電子波動関数が有するトポロジーに着目し、物質の機能探索や設計を行なった。原子膜物質の非線形光学応答を活用した電荷・スピン流の光学的駆動、新しい二次元物質であるbiphenylene network (BPN)から着想を得たフォトニック結晶を設計した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題によって、二次元原子膜物理からフォトニック系にわたる、新たなトポロジカル状態の発見や制御の指針を明らかにした。TMDC膜と光との相互作用に着目し、照射による電子励起を活用したスピン状態の生成と制御機構を提案した。特に、可視光領域での励起が可能であるため、今後エネルギーハーベスティングデバイス応用が期待される。さらに、BPNフォトニック結晶を活用することで、散逸の少ない電磁場通信デバイスへの応用が期待される。これらの成果は、「トポロジカル機能設計」の基礎学理の構築に貢献するものである。

研究成果の概要（英文）：In recent years, by reinterpreting material science with the mathematical concept of topology (topology), it has been found that the phase information of the wave functions of Bloch electrons in crystals dictates peculiar localized states that appear at material boundaries such as edges, hinges, and corners. In this project, we focused on the topology of the electronic wave functions in two-dimensional atomic membranes and conducted functional exploration and design of materials. We designed photonic crystals inspired by the biphenylene network (BPN), a new two-dimensional material, utilizing the nonlinear optical response of atomic membrane materials to optically drive charge and spin currents.

研究分野：ナノサイエンス、物性物理学

キーワード：原子膜物質 非線形光学応答 トポロジカル物質 グラフェン 遷移金属ダイカルコゲナイド フォトニック結晶 二次元物質 エッジ状態

## 様式 C-19、F-19-1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

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。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がナノメートルスケールの領域まで及んでいる。電荷移動に伴う情報伝送には、常に、界面ラフネス・不純物・格子欠陥、フォノンなどによる散乱を受け、ジュール熱発生に伴うエネルギー散逸が起きる。このため、高度集積化された現代の情報機器では、常に大きな発熱が伴い、さらなる高密度集積化や薄膜軽量化の障害となっている。すなわち、エネルギー消費を究極的に低減し、電子や光による情報伝搬を、効率的に変換操作することが持続可能な社会の実現に求められている。

これらの問題解決に貢献するために、本研究課題では、(1) グラフェン・原子膜などの二次元物質における積層構造設計による新物性の理解と解明、(2) トポロジーの概念を用いた機能物性の設計とトポロジカルフォトンクスへの展開を行う。二次元原子膜の物理とフォトンクスの分野を接続する理論研究課題である。

上記の問いに答えるため、理論モデリング解析、電磁場解析シミュレーション、第一原理計算など異なる視点の理論・計算手法を複合的に取り入れることで、複眼的な研究を推進する。これによって、「トポロジカル機能設計」の基礎学理に新たな展開を惹起させる。

### 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(TMDC)などの系の厚さが一原子層である原子膜物質では、エッジや表面などによって、特異な電子物性が発現することを、研究代表者らは明らかにしてきた。近年、物質科学をトポロジー(位相幾何学)という数学概念で捉え直すことで、結晶中のブロッホ電子が有する波動関数の位相情報によって、エッジ・ヒンジ・コーナーなどの物質境界に出現する特異な局在状態が規定されることがわかってきている。エッジやコーナーなどの境界での波動関数の局在は、ナノスケール材料における局在磁性や完全伝導チャンネルの起源となる一方、フォトンクス結晶の言葉に焼き直せば、光の局在(閉じ込め)や高効率光伝搬に対応する。これらトポロジカルに保護された状態は、新しい電子・光デバイス設計への源泉となるものである。

本研究では、二次元原子膜の電子波動関数が有するトポロジーに着目し、物質の機能を設計する理論を整備する。さらに、原子膜物質で得られた知見を、より実装しやすい電磁場系に展開を図り、フォトンクス結晶の設計へと繋げる。原子膜物理とフォトンクスを分野横断する研究を推進し、新しい光・電子デバイスのベースとなる基礎物性の理論的解明へと貢献する。本研究課題によって、二次元原子膜物理からフォトンクス系にわたる、新たなトポロジカル状態の発見や制御の指針を提示する。さらに、「トポロジカル機能設計」の基礎学理の構築に貢献する。

### 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、共有結合性有機構造体(COF)の一種である二次元配位ナノシートにおける電子状態計算については、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、原子膜物質の光・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) 非線形光学的ホール効果による電子・スピン流生成機構の提案

炭素原子だけからなる一原子層膜であるグラフェンの発見以降、一から数原子分の厚みしか持たない二次元物質の研究が国内外で活発におこなわれている。グラフェンや新しい二次元物質である遷移金属ダイカルコゲナイド系物質(TMDC)は、熱力学的に安定だけでなく、透明で機械的に柔らかい素材であるため、光・電子機能を有するフレキシブルデバイスへの応用が期待されている。さらに、グラフェンとは異なり TMDC はスピン軌道相互作用を有しており、スピン流の駆動や伝搬が生じるため、スピントロニクス素子への応用が期待されている。

これまで理論提案では、二次元物質における非線形ホール効果によるスピン流生成には、外部からの一軸性歪みを与える必要があった。本研究では、光照射による非線形光学的ホール効果を利用することで、一軸性歪みを与えなくても、二次元物質 NbSe<sub>2</sub> に電流またはスピン流が生成できることを見出した。結果、可視光領域の光によって電流またはスピン流を駆動でき、電流およびスピン流を生成するエネルギーハーベスティング素子への応用が期待されることがわかった。

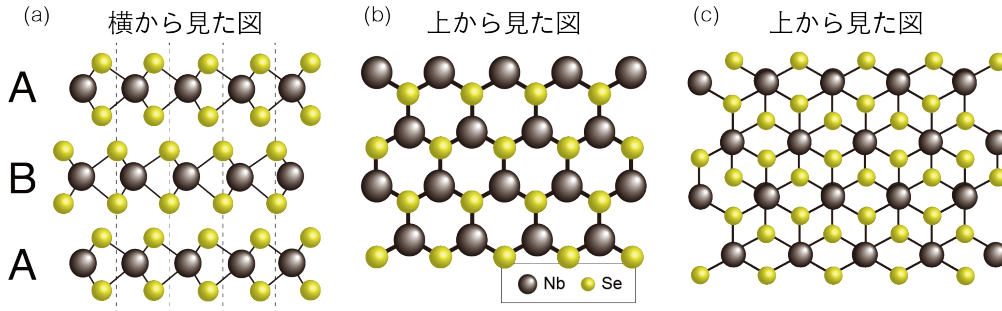


図 1: NbSe<sub>2</sub> の結晶構造の模式図。灰色が Nb 原子、黄色が Se 原子を表す。(a) ABA 積層での三層 NbSe<sub>2</sub> を横から見た結晶構造。(b) 単層 NbSe<sub>2</sub> の結晶構造を上から見た図。(c) 二層および三層 NbSe<sub>2</sub> の結晶構造を上から見た図。

具体的には、一から三層までの NbSe<sub>2</sub> の電子状態を解析した上で、非線形光学的ホール伝導度を数値計算によって解析した。NbSe<sub>2</sub> は、TMDC の一つであり、室温では金属的な性質を示し、低温で超伝導転移を示すことが知られている。

図 1(a)-(c) は、NbSe<sub>2</sub> の結晶構造である。NbSe<sub>2</sub> は、図 1(a) に示すように各層同士が半周期分互いにずれて積層した AB 積層構造をもつ。また、面内では、六角格子構造を成し、一般に、奇数層では、空間反転対称性が破れている。しかし、偶数層では、空間反転対称性を保持している。そのため、奇数層 NbSe<sub>2</sub> では、Nb 原子に由来するスピン軌道相互作用に加えて、結晶構造の対称性に由来するイジング型スピン軌道相互作用を有している。したがって、層数の偶奇によって、全く異なる非線形光学応答を示す。

図 2(a)-(f) は、数値解析によって得られた非線形光学的ホール伝導度の結果である。図 2(a)-(c) はそれぞれ、単層、二層、三層の場合を示す。図 2(a) (c) に示す通り、単層および三層では、1.5eV 程度（可視光のエネルギー程度）の y 偏向の光の入射によって、スピンホール伝導度がピークを持つことがわかる。つまり、y 偏向の光によって NbSe<sub>2</sub> 内にスピン流を生成することが可能であることを示している。しかし、二層 NbSe<sub>2</sub> では、図 2(b) に示すように、空間反転対称性が保たれるため、非線形光学的スピンホール伝導度はゼロになる。

同様に、図 2(d) (f) に示す通り、単層および三層では、1.5eV 程度（可視光のエネルギー程度）の x 偏向の光の入射によって、電子ホール伝導度がピークを持つことがわかる。つまり、x 偏向の光によって NbSe<sub>2</sub> 内に電流を生成することが可能である。同様に、二層 NbSe<sub>2</sub> では、図 2(e) に示すように、空間反転対称性が保たれるため、非線形光学的電子ホール伝導度はゼロになる。

これまで二次元物質では、非線形ホール効果によるスピン流生成には外部からの一軸性歪みを与える必要があった。本研究では、光照射による非線形光学的ホール効果を利用することで、一軸性歪みを与えなくても、二次元物質 NbSe<sub>2</sub> に電流またはスピン流が生成できることが示した。この成果から、可視光領域の光によって電流またはスピン流を駆動できるため、電流およびスピン流を生成するエネルギーハーベスティング素子への応用が期待されます。

図 3 は、本研究での結果を模式的に

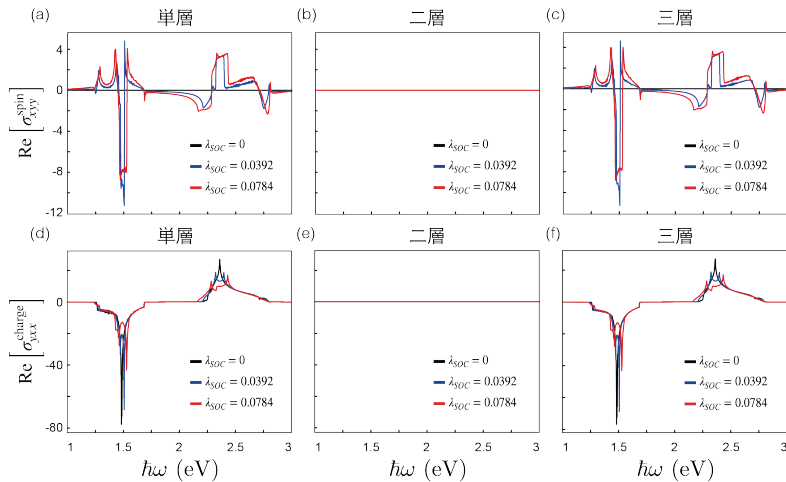


図 2: 少数層 NbSe<sub>2</sub> の非線形光学的スピンホール伝導度 (a) 単層、(b) 二層、(c) 三層の場合。同様に、少数層 NbSe<sub>2</sub> の非線形光学的電子ホール伝導度 (d) 単層、(e) 二層、(f) 三層の場合。

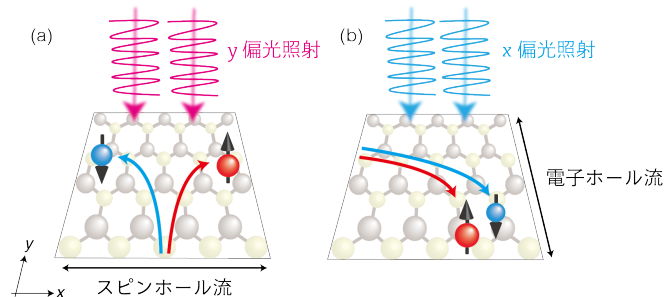


図 3: NbSe<sub>2</sub> における非線形光学的ホール効果の概念図。(a) y 偏向の光照射によるスピンホール流の生成。(b) x 偏向の光照射による電荷ホール流の生成。

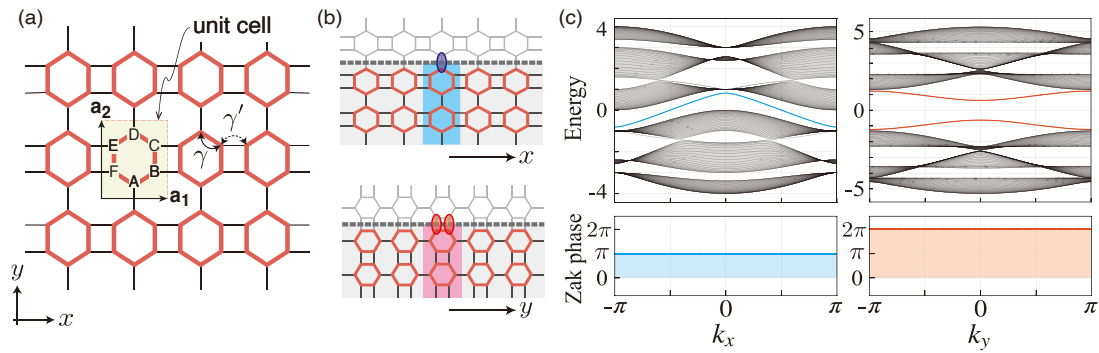


図4: (a) 二次元BPNの格子構造 (b) BPNのエッジ構造。上側がジグザグエッジ、下側がアームチェアエッジ。楕円はワニエ中心を示す。(c) BPN ナノリボンのエネルギーバンドとザック位相。左側がジグザグリボン、右側がアームチェアリボン。

表したものである。奇数層 NbSe<sub>2</sub> に、y 偏向の光を照射すると、その非線形光学効果によって、スピンホール流が生成される (図 3(a))。また、同様に、x 偏向の光を照射すると、その非線形光学効果によって、電子ホール流が生成される (図 3(a))。これらの結果から、NbSe<sub>2</sub> に光を照射することで、スピン流または電流を生成することが可能であることがわかった。

加えて、二層 NbSe<sub>2</sub> であっても、垂直電場を引加することで空間反転対称性を破り、スピン流または電流を光で誘起できることを明らかにした。また、MoS<sub>2</sub> などの半導体 TMDC では、非線形ホール効果の誘起には、外部からの一軸性歪みだけでなく、ホールドーピングが必要とされていた。しかし、本研究では、半導体 TMDC にホールドーピングをすることなく、さらに一軸性歪みを与えなくても、光を照射することによって半導体 TMDC に電流またはスピン流が生成できることを明らかにした。また、結晶の対称性を操作する 2 円偏光を照射したとき、NbSe<sub>2</sub> の鏡面对称性を破るため、非線形光学効果が偶数層 NbSe<sub>2</sub> でも誘起されることを明らかにした。さらに、奇数層 NbSe<sub>2</sub> では、トポロジカルシフト流が生成されることがわかった。この他にも、Twisted bilayer graphene に対する円偏光照射を利用した Valley 流の生成に関する数値解析なども行なった。

本研究成果によって、新しい二次元物質である TMDC において、非線形光学応答を利用したスピン流および電流の生成機構が明らかになった。特に、入射光のエネルギーは、可視光領域であるため、エネルギーハーベスティング素子などへの応用も期待される。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。

## (2) 二次元ビフェニレンネットワーク (BPN) のトポロジカル状態とフォトニック結晶への展開

最近合成が報告された二次元炭素材料であるビフェニレンネットワーク (BPN) に着目し、その電子状態とトポロジカル特性を解析し、さらにフォトニック結晶への応用展開の可能性を探求した。BPN は、グラフェンと同じく炭素原子のみからなる二次元物質であり、四員環、六員環、八員環を含むユニークな結晶構造を持つ。そのため、ハニカム構造のグラフェンとは結合のトポロジーが異なる。我々は、BPN の結晶構造に基づく強束縛模型を用いて、電子状態およびザック位相を数値解析した。図 4(a), (b) に示すように二種類のホッピングエネルギー  $\gamma$ ,  $\gamma'$  を考慮し、バルク構造および二種類のエッジ構造をもつナノリボン構造の BPN について解析した。このとき、ホッピング比 ( $\gamma'/|\gamma|$ ) に応じてトポロジカル相転移が起こる。また、図 4(c) はナノリボン構造のエネルギーバンド図および対応するザック位相である。図中の青 (赤) 線で示したトポロジカルエッジ状態が、有限値のザック

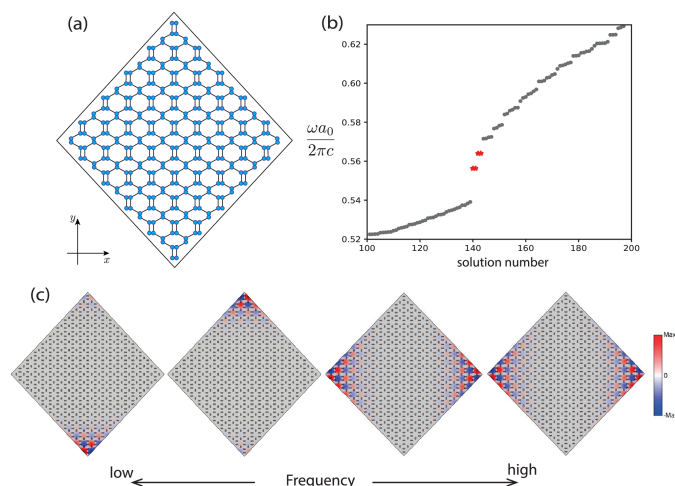


図5: (a) カイラルエッジによって形成されたコーナー構造の模式図。(b) 対応する周波数スペクトル。赤い星はトポロジカルコーナー状態であり、コーナー状態の周波数範囲は完全ギャップ領域内にある。(c) 低周波数から高周波数までの 4 つのコーナー状態の電場分布。これらの分布から、トポロジカルコーナー状態がバルクおよびエッジ状態から分離していることがわかる。

位相に起因していることが確認できる。さらに、エッジ状態をもつ端構造を組み合わせて、「エッジのエッジ」として出現するコーナー状態の出現条件を解明した。

さらに、上記の解析結果を基に、BPN ネットワーク構造に基づくフォトニック結晶構造 (BPN PhC) の解析を行い、トポロジカルエッジ状態、およびコーナー状態を電磁場状態で実現する方法を提案した。具体的には、有限要素法を用いてフォトニックバンド構造を調べ、Wilson ループを使用して BPN PhC のトポロジカル特性を特徴付けた。対応する方向での非自明な Zak 位相の結果として、特にジグザグエッジおよびカイラルエッジにおいて、BPN PhC のトポロジカルエッジ状態の出現を明らかにした。さらに、図 5 に示すように、カイラルエッジによって形成されたコーナーでの電磁波の局在化 (トポロジカルコーナー状態) が起きることを理論数値的に示した。

### (3) CoBHT の電子状態における歪み効果の理論的研究

共有結合性有機構造体 (COF) の一種である配位ナノシート (CONASHs) は、金属イオンと配位子によって構成されるボトムアップ型の二次元物質である。有機分子と金属原子からなる構造体である配位ナノシートは、様々な光・電子物性を設計・創出できる可能性があるため、光電子デバイスなどへの応用が期待されている。我々は密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって、近年合成されたビス(ジチオレン)コバルト(II) (CoBHT) の電子状態と、その歪み効果を数値的に解析した。現在、CoBHT には、高密度構造 (図 6(a)) と低密度構造 (図 6(d)) の二種類の結晶構造が提案されている。これら二つの結晶構造に対して、電子状態の比較を行うとともに、歪み効果の相違点を明らかにした。

図 6(a) は高密度構造の模式図である。図 6(b) は、そのエネルギーバンド構造である。Co 原子に由来する磁気モーメントをもち、スピン分極が生じる。また、フェルミ準位を複数のバンドが横切っており、金属的な電子状態をもつ。図 6(c) は、一軸性の歪みを加えたときのフェルミ準位での状態密度 (DOS) の変化である。赤線と青線はそれぞれ電子ドーピングとホールドーピングの場合を表し、黒線は電荷中性点の場合である。電荷中性点からわずかにホールドーピングした範囲では、DOS は増加するが、電子ドーピング系では DOS は減少する。

一方、低密度構造 (図 6(d)) の電子状態は、図 6(e) に示すように半導体となる。そのため、図 6(f) に示すように、低密度構造では、キャリアドーピングをしない限り、状態密度の歪み変化は生じないことがわかる。結晶構造の違いによって、歪み効果に大きな違いが現れることがわかった。このことから歪み導入によって、電子物性の制御が可能であることがわかった。

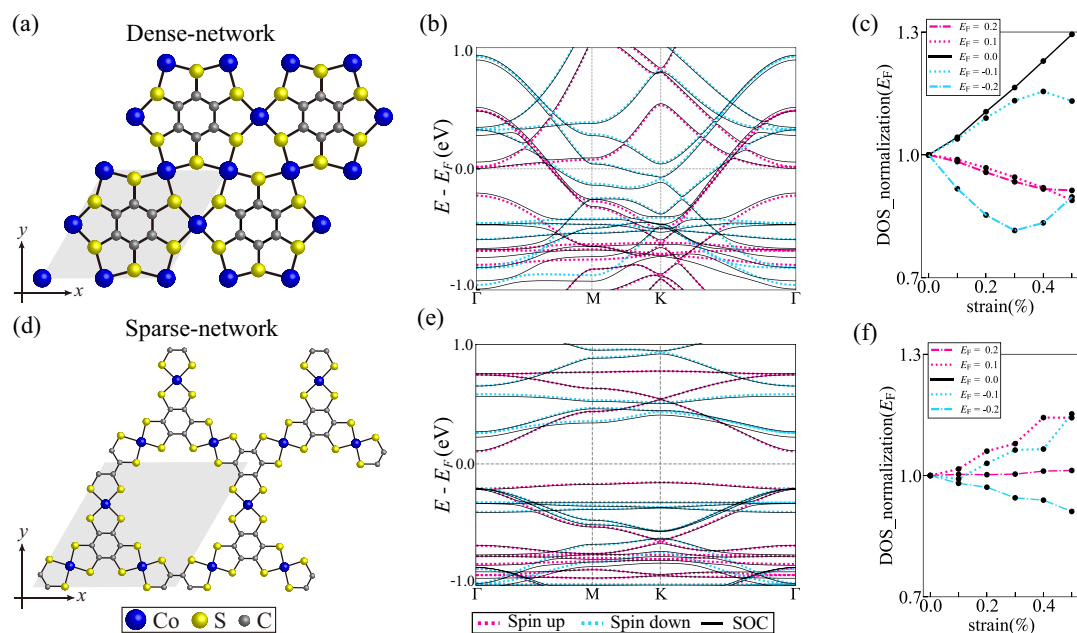


図 6: (a) 高密度 CoBHT の格子構造と (b) エネルギーバンド構造。 (c) 高密度構造に対する状態密度の歪み依存性。 (d) 低密度 CoBHT の格子構造と (e) エネルギーバンド構造。 (f) 低密度構造に対する状態密度の歪み依存性。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 6件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Takahashi Shun, Ashida Yuya, Phan Huyen Thanh, Yamashita Kenichi, Ueda Tetsuya, Wakabayashi Katsunori, Iwamoto Satoshi	4. 巻 109
2. 論文標題 Microwave hinge states in a simple cubic lattice photonic crystal insulator	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125304 (1)-(7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.125304	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 Takei Masato, Hirama Takuma, Suga Hiroshi, Wakabayashi Katsunori, Tsukagoshi Kazuhito	4. 巻 6
2. 論文標題 Effective Conduction Path of a C60 Chain in a Nanogap Electrode	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 ACS Applied Electronic Materials	6. 最初と最後の頁 1740 ~ 1745
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.3c01656	査読の有無 無
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 Koizumi Keiki, Phan Huyen Thanh, Nishigomi Kento, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 109
2. 論文標題 Topological edge and corner states in the biphenylene network	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035431 (1)-(10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.035431	査読の有無 無
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 Hamai Yuji, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 108
2. 論文標題 Approximating maximally localized Wannier functions with position scaling eigenfunctions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 245413 (1)-(24)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.108.245413	査読の有無 無
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 He Qinghua, Sun Jinhua, Deng Hai-Yao, Wakabayashi Katsunori, Liu Feng	4. 巻 11
2. 論文標題 Bound states at disclinations: an additive rule of real and reciprocal space topology	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Frontiers in Physics	6. 最初と最後の頁 1213158
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fphy.2023.1213158	査読の有無 無
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 Habara Ren, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 107
2. 論文標題 Symmetry manipulation of nonlinear optical effect for metallic transition-metal dichalcogenides	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115422 (1)-(18)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.115422	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 Prudkovskiy Vladimir S., Hu Yiran, Zhang Kaimin, Hu Yue, Ji Peixuan, Nunn Grant, Zhao Jian, Shi Chenqian, Tejada Antonio, Wander David, De Cecco Alessandro, Winkelmann Clemens B., Jiang Yuxuan, Zhao Tianhao, Wakabayashi Katsunori, Jiang Zhigang, Ma Lei, Berger Claire, de Heer Walt A.	4. 巻 13
2. 論文標題 An epitaxial graphene platform for zero-energy edge state nanoelectronics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 7814
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-022-34369-4	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 Nakagahara Keisuke, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 106
2. 論文標題 Enhanced valley polarization of graphene on h-BN under circularly polarized light irradiation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 075403 (1)-(7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.075403	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 Takeuchi Mihiro, Umeta Yukiya, Suga Hiroshi, Wakahara Takatsugu, Wang Ying-Chiao, Naitoh Yasuhisa, Wakabayashi Katsunori, Tsukagoshi Kazuhito	4. 巻 5
2. 論文標題 Fullerene Nanostructure-Coated Channels Activated by Electron Beam Lithography for Resistance Switching	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6. 最初と最後の頁 6430 ~ 6437
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnm.2c00523	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 -

1. 著者名 Habara Ren, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 103
2. 論文標題 Optically induced spin current in monolayer NbSe2	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L161410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.L161410	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 Liu Feng, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 3
2. 論文標題 Higher-order topology and fractional charge in monolayer graphene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 23121
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.023121	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 Phan Huyen Thanh, Liu Feng, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 29
2. 論文標題 Valley-dependent corner states in honeycomb photonic crystals without inversion symmetry	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Optics Express	6. 最初と最後の頁 18277 ~ 18277
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1364/OE.427222	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 Yonemori Itsuki, Dutta Sudipta, Nagashio Kosuke, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 11
2. 論文標題 Thickness-dependent Raman active modes of SnS thin films	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 095106 ~ 095106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0062857	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 Sato Keiju, Hayashi Naoki, Ito Takahiro, Masago Noriyuki, Takamura Makoto, Morimoto Mitsuru, Maekawa Takuji, Lee Doyoon, Qiao Kuan, Kim Jeehwan, Nakagahara Keisuke, Wakabayashi Katsunori, Hibino Hiroki, Norimatsu Wataru	4. 巻 2
2. 論文標題 Observation of a flat band and bandgap in millimeter-scale twisted bilayer graphene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-021-00221-3	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 Habara Ren, Wakabayashi Katsunori	4. 巻 4
2. 論文標題 Nonlinear optical Hall effect of few-layered NbSe <sub>2</sub>	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.4.013219	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 -

〔学会発表〕 計18件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Huyen T. Phan, S. Takahashi, S. Iwamoto, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Zak Phase and the Existence of Topological Edge States in Three-Dimensional Photonic Crystals
3. 学会等名 PECS-XIII Tokyo (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Nonlinear optical effect and DC photocurrent for few-layered metallic TMDC
3. 学会等名 The 13th Recent Progress in Graphene and Two-dimensional Materials Research Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Nonlinear optical Hall effect and DC photocurrent for few-layered NbSe2
3. 学会等名 The 63rd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 少数層NbSe2の非線形光学的ホール伝導度に関する理論研究
3. 学会等名 JSAP Autumn Meeting
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 金属TMDCの非線形光学効果と偏向依存性に関する理論的研究
3. 学会等名 JPS meeting
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Koizumi, H. T. Phan, and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological edge states in Biphenylene Network
3. 学会等名 The 63rd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Huyen T. Phan, S. Takahashi, S. Iwamoto, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Wave Propagation in 3D Woodpile Photonic Crystal
3. 学会等名 JSAP meeting
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Huyen T. Phan, F. Liu, S. Takahashi, S. Iwamoto, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Zak Phase of Three-Dimensional Photonic Crystals
3. 学会等名 JSAP meeting
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Nishigomi, A. Kumatani, K. Tsukagoshi, and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Strain Effects on Electronic States of CoBHT: Theoretical Studies
3. 学会等名 The 63rd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Nishigomi, A. Kumatani, K. Tsukagoshi, and K. Wakabayashi
2. 発表標題 CoBHT の電子状態における歪み効果の理論的研究
3. 学会等名 JSAP meeting
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 若林克法, 越野幹人, 岡田晋
2. 発表標題 二階建て二次元六角ネットワークHexNetの電子状態
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岡田晋, 若林克法, 越野幹人, 丸山実那, 高燕林
2. 発表標題 二階建て二次元六角ネットワークHexNetの物質設計
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Optically induced Spin Current in Monolayer NbSe <sub>2</sub>
3. 学会等名 24th International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Huyen T. Phan, K. Koizumi, F. Liu, K. Wakabayashi
2. 発表標題 Topological Edge States in Biphenylene Photonic Crystals
3. 学会等名 JSAP Spring Meeting 2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 Optical Spin Hall Effect in Few-Layered NbSe <sub>2</sub> : Spin Hall Angle and Temperature Effect
3. 学会等名 The 61st Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 単層NbSe <sub>2</sub> のスピニ依存光学的伝導度に関する理論研究
3. 学会等名 JPS 2021 Autumn Meeting
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Habara and K. Wakabayashi
2. 発表標題 NbSe <sub>2</sub> の非線形光学効果とその層数依存性に関する理論的研究
3. 学会等名 JPS 2022 Annual (77th) Meeting
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Keisuke Nakagahara, Katsunori Wakabayashi
2. 発表標題 Theoretical study of optical conductivity under circular polarized light irradiation in graphene on hBN
3. 学会等名 The 62nd Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium
4. 発表年 2022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

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			
中国	寧波大学	天津大学		
米国	ジョージア工科大学			