

令和 5 年 9 月 26 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2019～2022

課題番号：19H01823

研究課題名(和文)機能性半導体グラフェンの設計と創製

研究課題名(英文)Design and production of the semiconducting graphene

研究代表者

齋藤 晋(Saito, Susumu)

東京工業大学・理学院・教授

研究者番号：00262254

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,000,000円

研究成果の概要(和文)：特異な電子的特性と強靱な機械的特性を持つ原子層物質であるグラフェンは、2004年に実験的に合成されて以降、次世代のデバイス素子を始めとする広範な応用が期待され、研究が展開されている。申請者のグループは、グラフェンの実験合成に先立つ2002年に、元々は金属的な伝導特性をもつグラフェンが周期構造修飾により半導体化することを報告していたが、本研究では、デバイス応用を見据えて、周期構造修飾された半導体グラフェンの電子構造の精密かつ系統的な理論予測を実現した。さらに、実験研究により、イオンビームを用いた周期構造修飾の導入方法を確立した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高い電気伝導度を示すグラフェンを半導体化することができれば、たった一原子膜からなる究極の半導体ウエハーとして、そのデバイス応用が非常に有望になる。周期構造修飾による半導体化グラフェンは、導入する周期長および構造修飾のサイズをコントロールすることでその半導体特性を変化させ、調整することができると期待されるため、非常に重要な研究課題である。しかし、多様な構造・多様な周期での修飾が可能のため、まだその研究は緒に就いたばかりであった。本研究により、広範かつ系統的な理論予測がなされ、また、実験的にも現実的な構造修飾手法が同定されたことから、グラフェンのデバイス応用に向けた着実な研究成果となった。

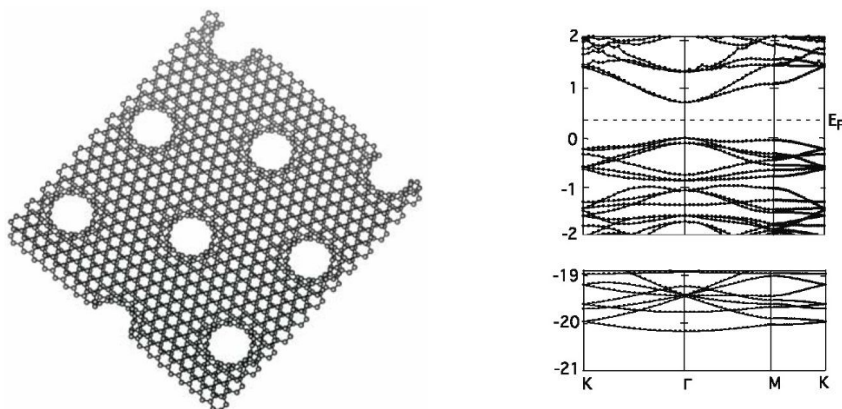
研究成果の概要(英文)：Graphene possesses an interesting electronic properties and a strong mechanical properties, and has been studied intensively as a material of various future applications ever since its experimental production in 2004. In 2002, we reported that the periodic structural modifications of graphene could change its electronic transport properties from metal to semiconductor. In the present work, we revealed the electronic properties of periodically modified graphene systematically using the first-principles electronic structure study. Also we have studied experimentally the practical methods to introduce periodic structural modifications to graphene, and have found that the ion-beam should be an promising method.

研究分野：物性理論

キーワード：グラフェン 電子構造計算 半導体 ナノサイエンス ナノテクノロジー

1. 研究開始当初の背景

グラフェンは、2004年の合成報告以来、たった一原子層からなるにもかかわらず強靱な機械的特性と高い電気伝導特性を示したことから、科学的にも、また応用上も注目され、その物性が研究されてきた。特に、グラフェンの金属的な電子構造を改変し、半導体とすることができれば、一原子層からなる究極の「半導体ウエハー」として、その電子デバイス応用に向けた研究が一気に加速することが期待される。実は、本研究の代表者は、グラフェンの実験合成報告に先立つ2002年に、周期構造修飾されたグラフェンが半導体的な電子構造を持つことを、理論的に予言していた[<https://doi.org/10.1143/JPSJ.71.2765>] (下図)。その後、幾つかのグループにより、周期構造修飾したグラフェンの半導体化、さらには半導体電子構造の解析がなされたが、導入する構造修飾の形状とサイズに依存した電子構造変化、導入する周期長への電子物性の依存性、さらには2次元格子そのものに多種多様なパターンがあり得るため、グラフェンの周期構造修飾の研究は緒に就いたばかりの状況であった。そして、そのような状況は、実験研究においても同様であった。即ち、周期構造修飾を効率的にグラフェンに導入するためのスタンダードな方法は確率されておらず、また、導入された構造修飾の周期長も、理論的に興味深いとされる長さよりも遥かに長い状況であった。必然的に、理論研究結果と実験研究結果の定量的な比較もまだ将来の課題と位置付けられていた。



2004年のグラフェンの作製報告に先立ち、本申請の研究代表者により報告された半導体電子構造を持つ周期構造修飾された (J. Phys. Soc. Jpn. 71, 2765 (2002))。

2. 研究の目的

2次元におけるいわゆるブラベー格子は、5種類存在する。それら各ブラベー格子のパターンで周期構造修飾を行った場合、どれが効率的な半導体化を実現させるための格子パターンであるかを見出すことがまず、理論研究における大きな研究目的であった。さらに、蜂の巣格子など、ブラベー格子に属さない格子のパターンで構造修飾を行った場合、そして、導入する構造修飾の形状とサイズに電子構造がどの様に依存するかも、非常に重要な研究課題となった。

他方、実験研究においては、理論研究において興味深い半導体電子構造が得られると予測される構造修飾のサイズおよび周期長で実際のグラフェンを加工するための手法を開発することが大目的であった。

3. 研究の方法

理論研究においては、定量的に高精度で電子構造を予測できる、密度汎関数法による電子構造計算法が主要な研究方法となった。周期的に導入する構造修飾については、三角形や六角形の「穴」を考慮し、穴の端部分に出現する2配位の炭素原子のいわゆるダングリングボンドは、水素原子で終端した。また、多様な形状・サイズ・周期長での構造修飾を考えることから、大きなユニットセルを持つ系の電子構造を予測する際には、研究室の数値計算サーバーに加えて学内の超並列マシン TSUBAME、さらには全国共同利用研のスーパーコンピュータも利用して研究を進めた。また、密度汎関数法に比較して計算時間が大幅に短縮できるタイトバインディング手法も併用することで、効率的に研究を展開した。

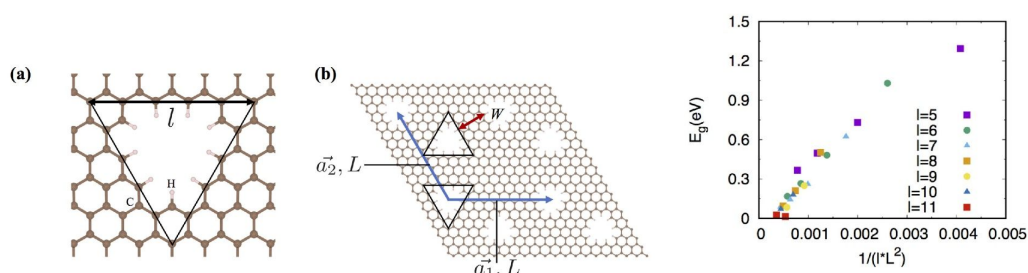
他方、実験研究においては、

- ・ STM/STS などの走査プローブ顕微鏡をナノ構造修飾に利用する方法
- ・ イオンビームを用いて構造修飾を導入する方法
- ・ グラフェンと基盤との間に周期的に原子・分子等をインターカレートとする方法

の三種に大別される研究展開を実施し、周期構造修飾されたグラフェンの作製を試みた。

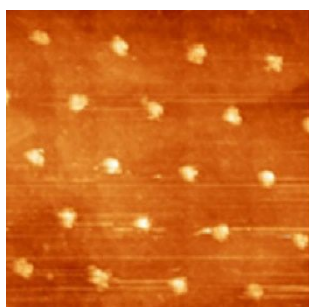
4. 研究成果

2次元格子系の全てのブラベー格子についての系統的な電子構造計算研究の結果、各ブラベー格子のパターンで構造修飾を施した場合の中で、正方格子のパターンでの構造修飾が半導体グラフェンの創成に最も不利である、という興味深い予測が得られた。これまでの実験研究では、大多数の場合で正方格子のパターンで構造修飾がなされてきたことから、重要な研究成果に位置付けられる。また、三角形の構造修飾を導入する場合、蜂の巣格子型に導入する場合と単に六方格子パターンで導入する場合で、導入する三角形のサイズ依存性が逆になること、即ち、蜂の巣格子型に導入する場合、導入する三角形のサイズが小さい方が半導体としてのバンドギャップがより大きく開く、という大変興味深い結果も得られた（下図）。



三角形の周期構造修飾の詳細 (a) および(b) とバンドギャップ値 (右図)。ギャップ値は l (三角形のサイズパラメータ) にほぼ反比例しており、小さい三角形で構造修飾した方が大きなバンドギャップを与える[Y. Taguchi, M. Toyoda, and S. Saito, Phys. Rev. B **107**, 235418 (2023) <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.235418>]。

他方、実験研究においては、種々、試された方法の中で、イオンビームを用いた場合、ほぼ設計通りの構造修飾を施すことが可能であることが判明した（下図）。これらの成果に従って、今後、理論グループと実験グループの共同研究による半導体グラフェンの合成研究が進展すると期待される。



イオンビームで周期構造修飾したグラフェンの STM 像。設計通り周期的に欠陥が導入されていることが分かる。この系での周期は約 100 nm である。

以上、本研究展開における系統的な理論研究により、周期構造修飾されたグラフェン系は、導入する周期構造の詳細に依存して多様にバンドギャップ値を変化させる魅力的な半導体物質群となること、さらに、多様な実験研究を展開した結果、イオンビームを用いることで設計に沿った周期構造修飾が可能なが示された。いずれも今後のグラフェンの半導体デバイス応用の基盤となる研究成果と位置付けられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 18件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Y. Fujimoto and S. Saito	4. 巻 169
2. 論文標題 Detection of Environmentally Toxic Molecules Using Carbon Nanotubes: A First-Principles Theoretical Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of The Electrochemical Society	6. 最初と最後の頁 037512-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jnoncrysol.2022.121670	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 C.M. J. Chan, M. Toyoda, and S. Saito	4. 巻 590
2. 論文標題 A new transferable tight-binding model for boron and its application to amorphous boron	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Non-Crystalline Solids	6. 最初と最後の頁 121670-1 ~ 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jnoncrysol.2022.121670	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 S. Ichinokura, M. Toyoda, M. Hashizume, K. Horii, S. Kusaka, S. Ideta, K. Tanaka, R. Shimizu, T. Hitosugi, S. Saito, and T. Hirahara	4. 巻 105
2. 論文標題 Van Hove singularity and Lifshitz transition in thickness-controlled Li-intercalated graphene	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235307-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.235307	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 K. Sugawara, H. Kusaka, T. Kawakami, K. Yanagizawa, A. Honma, S. Souma, K. Nakayama, M. Miyakawa, T. Taniguchi, M. Kitamura, K. Horiba, H. Kumigashira, T. Takahashi, S. Orimo, M. Toyoda, S. Saito, T. Kondo, and T. Sato	4. 巻 23
2. 論文標題 Direct Imaging of Band Structure for Powdered Rhombohedral Boron Monosulfide by Microfocused ARPES	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 1673-1679
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.2c04048	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 N. Watanabe, K. Miyazaki, M. Toyoda, K. Takeyasu, N. Tsujii, H. Kusaka, A. Yamamoto, S.Saito, M. Miyakawa, T. Taniguchi, T. Aizawa, T. Mori, M. Miyauchi, and T. Kondo	4. 巻 28
2. 論文標題 Rhombohedral Boron Monosulfide as a p-Type Semiconductor	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Molecules	6. 最初と最後の頁 1896-1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/molecules28041896	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 一ノ倉 聖, 豊田 雅之, 斎藤 晋, 平原 徹	4. 巻 65
2. 論文標題 Liが侵入したグラフェンにおける層数依存LiFshitz転移	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 表面と真空	6. 最初と最後の頁 502-507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1380/vss.65.502	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 Y. Taguchi, M. Toyoda, and S. Saito	4. 巻 in press
2. 論文標題 Electronic properties of graphene with triangular defects in a superhoneycomb arrangement: A first-principles study	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235418-1 ~ 13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.235418	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 Inoshita Takeshi, Saito Susumu, Hosono Hideo	4. 巻 1
2. 論文標題 Floating Interlayer and Surface Electrons in 2D Materials: Graphite, Electrides, and Electrenes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Small Science	6. 最初と最後の頁 2100020-1 ~ 22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/smssc.202100020	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 Kita Reo, Toyoda Masayuki, Saito Susumu	4. 巻 5
2. 論文標題 Relative stabilities of Si polytypes under biaxial stress: A first-principles study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 063402-1~9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.063402	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 T. Haga, Y. Matsuura, Y. Fujimoto, and S. Saito	4. 巻 5
2. 論文標題 Electronic states and modulation doping of hexagonal boron nitride trilayers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 094003-1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.5.094003	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 H. Kusaka, R. Ishibiki, M. Toyoda, T. Fujita, T. Tokunaga, A. Yamamoto, M. Miyakawa, K. Matsushita, K. Miyazaki, L. Li, S.L. Shinde, M.S.L. Lima, T. Sakurai, E. Nishibori, T. Masuda, K. Horiba, K. Watanabe, S. Saito, M. Miyauchi, T. Taniguchi, H. Hosono and T. Kondo	4. 巻 9
2. 論文標題 Crystalline boron monosulfide nanosheets with tunable bandgaps	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 24631-24640
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TA03307G	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 S. Oshima, M. Toyoda, and S. Saito	4. 巻 4
2. 論文標題 Geometrical and electronic properties of unstrained and strained transition metal dichalcogenide nanotubes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 026004-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.026004	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 Y. Fujimoto and S. Saito	4. 巻 744
2. 論文標題 Atomic structures and scanning tunneling microscopy of nitrogen-doped carbon nanotubes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IOP Conference Series: Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 12032
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1757-899X/744/1/012032	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 M. Onodera, M. Isayama, T. Taniguchi, K. Watanabe, S. Masubuchi, R. Moriya, T. Haga, Y. Fujimoto, S. Saito, T. Machida	4. 巻 167
2. 論文標題 Carbon annealed HPHT-hexagonal boron nitride: Exploring defect levels using 2D materials combined through van der Waals interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 785-791
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2020.05.032	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 Y. Fujimoto and S. Saito	4. 巻 1
2. 論文標題 Stacking and curvature-dependent behaviors of electronic transport and molecular adsorptions of graphene: A comparative study of bilayer graphene and carbon nanotube	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Surface Science Advances	6. 最初と最後の頁 100028-1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsadv.2020.100028	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 Y. Fujimoto and S. Saito	4. 巻 58
2. 論文標題 Effects of gas adsorption on the stabilities, electronic structures, and scanning tunneling microscopy of graphene monolayers doped with B or N	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 015005-1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/aaf227	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 T. Haga, Y. Fujimoto, and S. Saito	4. 巻 58
2. 論文標題 STM visualization of carbon impurities in sandwich structures consisting of hexagonal boron nitride and graphene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 S11B03-1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab0ff8	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 Y. Fujimoto and S. Saito	4. 巻 744
2. 論文標題 Atomic structures and scanning tunnelling microscopy of nitrogen-doped carbon nanotubes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 012032-1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1757-899X/744/1/012032	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33件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 19件)

1. 発表者名 B. Hasegawa, Y. Fujimoto, and S. Saito
2. 発表標題 Electronic structure and intertube interactions in ropes of carbon nanotubes
3. 学会等名 63rd Fullerenes, Nanotubes, and Graphene General Symposium (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳田啓, 一ノ倉聖, 豊田雅之, 田中清尚, 斎藤晋, 平原徹
2. 発表標題 Ca インターカレート2 層グラフェンに過剰なCaが誘起する自由電子バンド
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 C. -M. J. Chan, M. Toyoda, and S. Saito
2. 発表標題 ong-Range Transferable Total-Energy Tight-Binding Model for Boron and Carbon: Its Application to the Structural Analysis of Amorphous and Nanostructured Materials
3. 学会等名 12th A3 Symposium on Emerging Materials: Nanomaterials for Electronics, Energy, and Environment (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 徳田啓, 一ノ倉聖, 豊田雅之, 田中清尚, 斎藤晋, 平原徹
2. 発表標題 Caインターカレート2層グラフェンに 過剰なCaが誘起する自由電子バンド
3. 学会等名 UVSORシンポジウム2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 一ノ倉聖、豊田雅之、徳田啓、田中清尚、斎藤晋、平原徹
2. 発表標題 カルシウム侵入2層グラフェンにおけるp軌道とd軌道の混成
3. 学会等名 UVSORシンポジウム2022
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 C. -M. J. Chan, M. Toyoda, and S. Saito
2. 発表標題 Transferable Total-Energy Tight-Binding Model for Second-Row Elements: An Extension from Carbon to Boron and its Application to Amorphous and Nanostructured Materials
3. 学会等名 Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Taguchi, M. Toyoda, and S. Saito
2. 発表標題 Periodically Modified Graphene with triangular defects in a superhoneycomb arrangement: A new class of semiconductor graphene for band-gap engineering with new scaling law
3. 学会等名 Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 N. Watanabe, K. Miyazaki, M. Toyoda, K. Takeyasu, N. Tsujii, H. Kusaka, A. Yamamoto, S. Saito, M. Miyakawa, T. Taniguchi, T. Aizawa, T. Mori, M. Miyauchi, and T. Kondo
2. 発表標題 Investigation of carrier properties of rhombohedral boron sulfide
3. 学会等名 第15回 日本ホウ素・ホウ化物研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Susumu Saito
2. 発表標題 Forty years of research on nanostructured carbon materials
3. 学会等名 64th Fullerenes, Nanotubes, and Graphene General Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 R. Kita, M. Toyoda, and S. Saito
2. 発表標題 New carbon allotropes and their B-doped phases as candidate for Q-carbon materials with magnetic and superconducting properties
3. 学会等名 American Physical Society 2023 March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 豊田雅之, 斎藤晋
2. 発表標題 金属挿入二層グラフェンの電子状態
3. 学会等名 日本物理学会2023 年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 田口裕太, 豊田雅之, 平山元昭, 三宅隆, 斎藤晋
2. 発表標題 三角形の欠陥を蜂の巣格子状に導入したグラフェンのバンドギャップの振る舞い
3. 学会等名 日本物理学会2023 年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 徳田啓, 一ノ倉聖, 豊田雅之, 田中清尚, 斎藤晋, 平原徹
2. 発表標題 超伝導体C6CaC6 とSiC 基板の界面Ca が誘起する金属的バンドと転移温度の上昇
3. 学会等名 日本物理学会2023 年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 一ノ倉聖, 豊田雅之, 徳田啓, 中清尚, 斎藤晋, 平原徹
2. 発表標題 Ca がインターカレートした2 層グラフェンにおけるCa-3d 軌道の価電子帯への寄与
3. 学会等名 日本物理学会2023 年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 齋藤晋
2. 発表標題 終わりに(カーボンナノチューブ発見30周年記念シンポジウム)
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田口裕太, 齋藤晋
2. 発表標題 周期的欠陥のある半導体グラフェンを用いた積層系の設計と電子物性研究
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 一ノ倉聖, 豊田雅之, 橋爪瑞葵, 堀井健太郎, 出田真一郎, 田中清尚, 清水亮太, 一杉太郎, 齋藤晋, 平原徹
2. 発表標題 Liインターカレートした単層および多層グラフェンにおける質量のあるディラックコーン
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Riku Kawamura, Ryota Ishibiki, Yoshitaka Fujimoto, Taiga Goto, Shin-ichi Ito, Takeshi Fujita, Tomoharu Tokunaga, Masahiro Miyauchi, Soshi Iimura, Akiyasu Yamamoto, Daiki Umeyama, Satoshi Tominaka, Susumu Saito, Hideo Hosono, Takahiro Kondo
2. 発表標題 Substitutional doping from boron to carbon in hydrogen boride sheets
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science ~Toward Sustainable Development~ (国際学会)
4. 発表年 2021年

1 . 発表者名 H. Kusaka, R. Ishibiki, M. Toyoda, T. Fujita, T. Tokunaga, A. Yamamoto, M. Miyakawa, K. Matsushita, K. Miyazaki, L. Li, S. S. Laxman, T. Sakurai, E. Nishibori, T. Masuda, K. Horiba, K. Watanabe, S. Saito, M. Miyauchi, T. Taniguchi, H. Hosono, T. Kondo
2 . 発表標題 Crystalline boron monosulfide nanosheets with tunable bandgaps
3 . 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science ~Toward Sustainable Development~ (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 S. Ichinokura, M. Toyoda, M. Hashizume, K. Horii, S. Kusaka, S. Ideta, K. Tanaka, R. Shimizu, T. Hitosugi, S. Saito, and T. Hirahara
2 . 発表標題 Van Hove Singularity in Thickness Controlled Li-Intercalated Graphene
3 . 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science ~Toward Sustainable Development~ (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 Yuta Taguchi, Masayuki Toyoda, and Susumu Saito
2 . 発表標題 Band Engineering and Quantum Well Formation in Semiconducting Defective Graphene Multilayers: A First-Principles Study
3 . 学会等名 The 2021 Materials Research Society Fall Meeting (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 Riku Kawamura, Ryota Ishibiki, Yoshitaka Fujimoto, Taiga Goto, Shin-ichi Ito, Takeshi Fujita, Tomoharu Tokunaga, Masahiro Miyauchi, Soshi Imura, Akiyasu Yamamoto, Daiki Umeyama, Satoshi Tominaka, Susumu Saito, Hideo Hosono, Takahiro Kondo
2 . 発表標題 Substitutional doping from boron to carbon in hydrogen boride sheets
3 . 学会等名 MRM2021 Materials Research Meeting (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1. 発表者名	H. Kusaka, R. Ishibiki, M. Toyoda, T. Fujita, T. Tokunaga, A. Yamamoto, M. Miyakawa, K. Matsushita, K. Miyazaki, L. Li, S. L. Shinde, T. Sakurai, E. Nishibori, T. Masuda, K. Horiba, K. Watanabe, S. Saito, M. Miyauchi, T. Taniguchi, H. Hosono, T. Kondo
2. 発表標題	Crystalline boron monosulfide nanosheets with tunable bandgaps
3. 学会等名	MRM2021 Materials Research Meeting (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	Yoshitaka Fujimoto, Susumu Saito
2. 発表標題	Curvature effects of graphene and carbon nanotube on molecular adsorption and quantum transport
3. 学会等名	MRM2021 Materials Research Meeting (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	Taishi Haga, Yuan Shuaishuai, Kirk H. Bevan, and Susumu Saito
2. 発表標題	First-principles study of impurity-induced states in h-BN monolayer using hybrid functional
3. 学会等名	MRM2021 Materials Research Meeting (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	Reo Kita, Masayuki Toyoda, Masahiro Sakurai, and Susumu Saito
2. 発表標題	Polytypes of sp ³ elements
3. 学会等名	11th A3 Symposium on Emerging Materials (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名 H. Kusaka, R. Ishibiki, M. Toyoda, T. Fujita, T. Tokunaga, A. Yamamoto, M. Miyakawa, K. Matsushita, K. Miyazaki, L. Li1, S. S. Laxman, T. Sakurai, E.Nishibori, T. Masuda, K. Horiba, K.Watanabe, S.Saito, M. Miyauchi, T. Taniguchi, H. Hosono, T. Kondo
2. 発表標題 可変バンドギャップを持つ硫化ホウ素ナノシートの生成と評価
3. 学会等名 第14回 日本ホウ素・ホウ化物研究会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 R. Kita, M.Toyoda, and S. Saito
2. 発表標題 Relative stabilities of Si polytypes under the biaxial stress A first principles study
3. 学会等名 American Physical Society 2022 March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Y. Taguchi, M. Toyoda, and S. Saito
2. 発表標題 Scaling law of band gap values in graphene with triangular defects in a superhoneycomb arrangement: A first-principles study
3. 学会等名 American Physical Society 2022 March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 伊藤智哉、斎藤晋
2. 発表標題 二次元の各種ブラベー格子の周期で構造修飾されたグラフェンの電子構造
3. 学会等名 2020年応物春秋学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Haga, Y. Matsuura, Y. Fujimoto, and S. Saito
2. 発表標題 Modulation doping of hexagonal boron nitride trilayers
3. 学会等名 American Physical Society 2021 March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Taguchi and S. Saito
2. 発表標題 Electronic properties of periodically modified graphene : A first-principles study
3. 学会等名 American Physical Society 2021 March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 伊藤智哉、斎藤晋
2. 発表標題 二次元の各種ブラベー格子の周期で構造修飾されたグラフェンの電子構造
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2019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	豊田 雅之 (Toyoda Masayuki) (30536587)	東京工業大学・理学院・助教 (12608)	

6. 研究組織（つづき）

	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	平山 博之 (Hirayama Hiroyuki) (60271582)	東京工業大学・理学院・教授 (12608)	
研究分担者	橋詰 富博 (Hashizume Tomihiro) (70198662)	東京工業大学・理学院・特任教授 (12608)	

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			
英国	University College London			
カナダ	McGill University			