

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03384

研究課題名(和文)ペンタグラフェン：創製と機能創発

研究課題名(英文)Penta-graphene: Development and Creation of Functions

研究代表者

川添 良幸 (Kawazoe, Yoshiyuki)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・名誉教授

研究者番号：30091672

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,700,000円

研究成果の概要(和文)：実験から得られるパラメータを一切使わず、物理の基礎理論だけで新材料設計を行う第一原理シミュレーション計算を適用し、我々が理論的に提案したペンタグラフェン構造を炭素系から他元素系へと拡張し、さらに負のポアソン比を生かした建築材料等のマクロ系への適用も行った。グラフェンの工業応用研究も並行して行い、ペンタグラフェン特有の性能を明らかにした。

触媒作用を実際に起こっている現象通りに計算機の中で再現するために時間依存シュレディンガー方程式の解法を本研究グループ独自の全電子混合基底第一原理計算法TOMBOに導入し、電子を励起したまま時間発展させたシミュレーション計算を実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来は2次元に囚われ、薄膜構造の検討がなされていなかった。本研究では、この盲点を重点的に調べ、正五角形のみでの(擬)平面タイリングを可能とした。その応用の一つが炭素の構造体ペンタグラフェンであり、発見から現在までに既に400件の引用がなされている。合成に成功すれば、新規物性が発現するため、有用なデバイス応用による高度情報化社会への寄与が可能となる。負のポアソン比は幾何学構造のみに依存して決まりマクロな系でも同様の特性を示すため、建築用材料等への適用も可能である。

研究成果の概要(英文)：We have used ab initio simulation, by which without any experimental parameters, atomic structures and physico-chemical properties in any materials could be estimated, and we applied it to penta-graphene structures with several atomic species. Since this geometric structure realizes negative Poisson's ratio in general, we applied to macroscopic architecture research. We have also studied properties of materials related to normal graphene, and clearly understood the specific properties in penta-graphene. To understand correctly the chemical reactions, including catalytic reaction, it is necessary to keep electronic states excited. We have implemented as the first trial this time dependent Schroedinger equation solver into our original ab initio simulation program TOMBO.

研究分野：計算材料学

キーワード：ペンタグラフェン 理論材料設計 五角形のみからなる擬平面図形 新規な物性の発現 デバイス応用
建築材料への応用 超大規模シミュレーション計算 独自開発第一原理計算法TOMBO

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

(1) 1985年にサッカーボール形状のフラーレン C_{60} が実験的に発見されて以来現在に至るまで、ナノ炭素材料の研究ではナノチューブ、グラフェンと次々に新規構造が見つかり、その特異な物性の探索が盛んになされてきた。これらは炭素が sp^2 結合した面から構成される 0 次元、1 次元、及び 2 次元物質である。また、 sp^3 結合による 3 次元結晶に関しても、同様にダイヤモンド以外の多くの構造体が見つかった。

(2) 最近、巨大な 12 員環を含む五員環のみからなる炭素の平面構造体が予言された [1]。我々は完全な 2 次元という条件を外して、五員環のみによって構成される炭素ナノ構造体の理論的探索を行い、図 1 に示す厚さ約 1.2 \AA の薄膜構造 (ペンタグラフェン) が、エネルギー的・動的・熱力学的に安定なことを示した [2]。ペンタグラフェンは通常のグラフェンに比べ、面方向における伸縮に対して極めて安定である。特殊な性質として、面内での一方向引っ張りに対してその直角方向も伸びる (負のポアソン比を示す)。また、ナノチューブを作製するとカイラリティに依らずに半導体となる。これらの特性は極めて特徴的であり、実験的に合成できれば広い応用が可能となる。原子付加等これまでにグラフェンに対してなされたのと同様の多くの物性計算も望まれた。

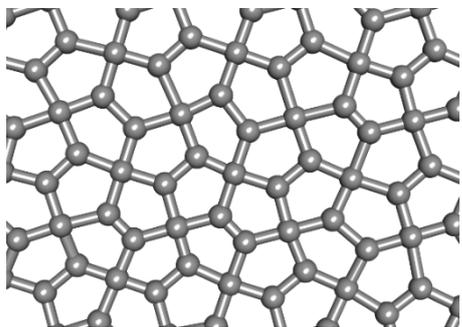


図 1. 我々が 2015 年に理論的に発見したペンタグラフェンの原子構造

2. 研究の目的

(1) ペンタグラフェンに関して、欠陥の影響、二層、三層等の積層構造、原子や分子の付加、熱伝導等を理論的に検討する。ペンタグラフェンに関しては国内外の多くのグループが研究し、我々の 2015 年の論文は既に 400 回引用され、この 5 年間、常に Web of Science で Highly cited paper である。オリジナルな研究グループとしてペンタグラフェンに関する理論研究継続に加え、実験グループとの共同によるペンタグラフェンの創製と解析を目的とする。

(2) 窒化ホウ素ペンタグラフェンを始めとする炭素以外の元素からなる安定なペンタグラフェン構造体を探索し、物性予測研究を行う。

(3) 炭素ナノ構造体中のポーラロンを理論的に検討し、その荷電状態の物性の詳細を明らかにする。

(4) マテリアルズインフォマティクスの技法を適用し、新規有用二次元ナノ構造体の探索を加速し、得られる原子構造と物性値をデータベース化し公開する。

3. 研究の方法

(1) 本研究グループのオリジナル第一原理シミュレーション計算プログラム TOMBO (Tohoku Mixed Basis Orbitals ab initio program package) が軽元素の計算において、第一原理計算一般の大問題である膨大な計算量を押さえることが可能なことを活用する。通常の密度汎関数理論に加え、TOMBO の全電子 GW 計算によって可能となるエネルギー準位 (バンド分散) の絶対値算定を行い、新規物性の詳細を明らかにする。

(2) マテリアルズインフォマティクスの手法に当たり、TOMBO の特徴であるエネルギーレベルの絶対値算定可能性を活用する。

(3) 研究分担者の尾上教授 (名古屋大学) は、 C_{60} の光・電線励起重合による新規 2 次元ナノカーボンを作製した後、TEM を用いた高エネルギー電子線誘起炭素脱離または STM を用いた高電圧印可誘起炭素脱離による炭素ネットワーク再構成によるペンタグラフェンの創製を試みる。

4. 研究成果

(1) 第一原理シミュレーションプログラム TOMBO のチューニング

本基盤研究の数値計算用に使う我々独自開発第一原理シミュレーションプログラム TOMBO のチューニングを継続して行い、多くの計算時間を要する大行列対角化部分に Block Davidson 法を導入し、大規模計算に関して大幅な処理効率改善を実現出来た。その成果を活用して、Li イオンをフラーレンに衝突させて内包させる過程に対する第一原理分子動力学計算を多数実施することが可能となり、様々な速度・角度での衝突過程をシミュレートして最適条件を確定し、研究成果を発表出来た。これはナノ炭素系に対する我々の 20 年来の研究成果の集大成の一つであり、実験家へ確証を持って Li@C_{60} の大量合成を可能とする実験条件を提案することが出来た。

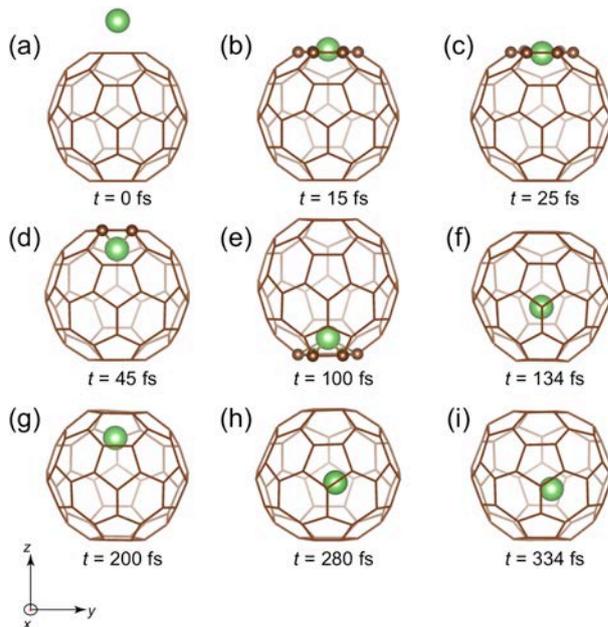


図 2. 初期運動エネルギー 10 eV で Li イオンが垂直に六員環中心に衝突した (a)-(c) 場合の時間発展。しばらく時間がかかって C₆₀ のケージを通り抜け (d)、反対側の六員環に当たって (e) 跳ね返され (f)、再度入射した六員環近くまで戻る (g) が、最終的にケージ近くに捕獲される (h)-(i)。

(2) ペンタグラフェン系の新規ナノ物質探索

本研究では、炭素単元素系として新規な同素体を理論的に広く探索した。我々は本研究以前に、既に K4 結晶、ペンタグラフェン、新規ナノダイヤモンド及びマッカイ様結晶の原子構造と物性予測に成功していた。ペンタグラフェンの幾何学構造は極めて新規なものである。炭素系のナノ構造体に関する研究は多いが、正五角形のみで構成されるものは正十二面体の C₂₀ のみであり、(擬)二次元構造は我々が始めて発見した。本研究期間に、ペンタグラフェンの特徴である負のポアソン比をマクロな材料へ適用し建築家と論文を発表出来た。また、炭素を他の元素に変更して数種類の安定構造を预言出来た。ペンタグラフェン中の熱伝導や欠陥を含んだ場合の物性変化に関する検討も詳細に行い学会発表した。この 3 年で、実験的創製の試みも多くなされ、特に東北大学金属材料研究所では、ダイヤモンドもグラファイトも出来ない高温・高压状態での創製を試み、破片程度ではあるが層状物質を得ている。名古屋大学尾上順教授は、フラーレンを 2 次元に整列させた初期条件から開始し、電子線及びレーザー光を照射して、再構築した構造体の形状を観察した。

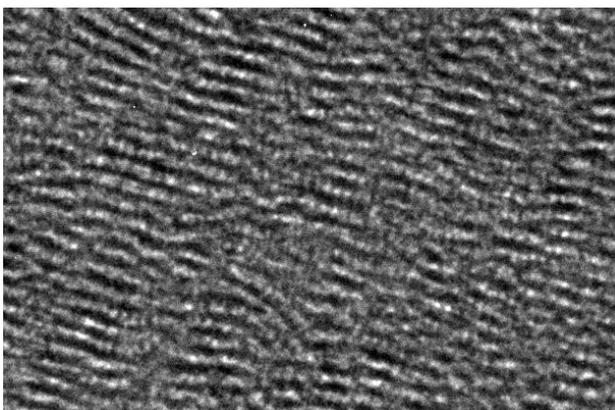


図 3. 東北大学金属材料研究所で実施したグラファイトもダイヤモンドも出来ない 1100°C での高压実験の結果。ダイヤモンドアンビルが破壊するまで圧力を上げた結果の生成物の電子顕微鏡写真。層状構造が見える。原子構造を確認するまでには至っていないがペンタグラフェンが生成した可能性がある。

(3) ペンタグラフェン中の欠陥の影響

各種欠陥を有するペンタグラフェンを対象とした構造安定性と各種物性計算を実施した。最初はペンタグラフェン中の1炭素原子を取り除いた構造(C1欠陥構造)を最適化し、その安定性が保たれることを確認、各種物性計算を実施して論文としてまとめた。その他、基礎的な欠陥構造のある場合に関して、原子構造の緩和と物性値算定をTOMBOによって行った。ペンタグラフェン中欠陥による電気伝導特性変化に関するシミュレーション計算を行い、欠陥位置での電子散乱が電気伝導度を大幅に減少させることを明らかにした。実験的な合成を成功させるためには、欠陥のある構造に関する知識も重要であり、今後、ここで得た知識を活用する。

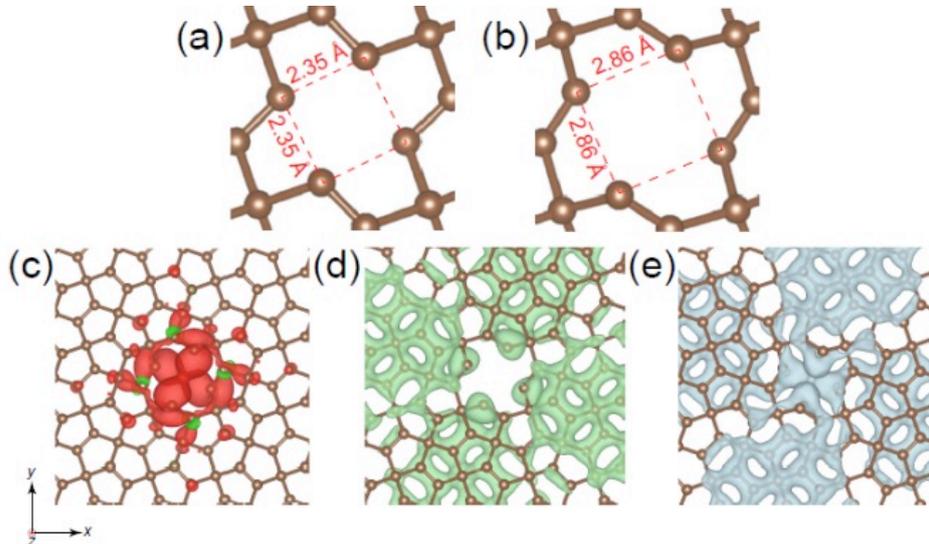


図4. ペンタグラフェン中のC1欠陥 (VC1)の (a) 初期原子構造、及び (b) 構造緩和後の構造。 (c) 中性状態でのC1欠陥のスピンドensity分布。赤はアップ、緑はダウンスピン状態の等電荷面 ($0.003 \text{ e}/\text{\AA}^3$)。 (d) 中性状態でのC1欠陥による電荷増大 (緑)、及び (e) 電荷減少 (薄青) 描画。等電荷面 ($0.016 \text{ e}/\text{\AA}^3$)

(4) ペンタ BCN の有する強圧電特性

通常の六員環からなるグラフェン及びその誘導体や原子置換体に対応して、ペンタグラフェン形状の新物質を探索した。その中で3元素のペンタ BCN 単層膜が内在的圧電特性を有していることを明らかにした。まず、第一原理シミュレーション計算により、ペンタ BCN 単層膜が動的、機械的、熱的に安定なことを確認した。これはペンタ BCN 単層膜が合成可能なことを示唆する。ペンタ BCN 単層膜は半導体で、そのバンドギャップ値は 2.81 eV である。中心対称性を持たない特異な原子構造と半導体の性質からペンタ BCN 単層膜は高自発分極 ($3.17 \times 10^{-10} \text{ C/m}$) 及び高内在的圧電特性 ($d_{21} = 0.878 \text{ pm/V}$ 、 $d_{22} = -0.678 \text{ pm/V}$) を有する新物質である。これらの値は *h*-BN シートや原子付加機能化ペンタグラフェンと比較すると極めて大きな値である。B、C、N は自然界に大量に存在し、軽量で、環境に優しい原料なため、ペンタ BCN が合成されれば、工業的に極めて有用な圧電材料となる。

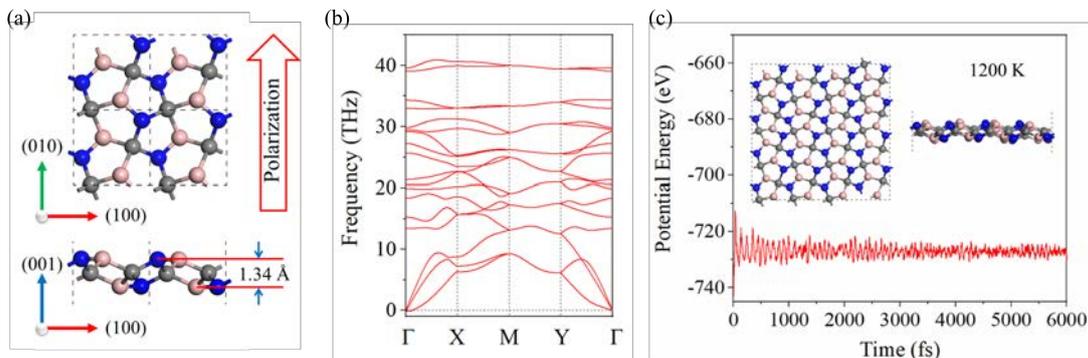


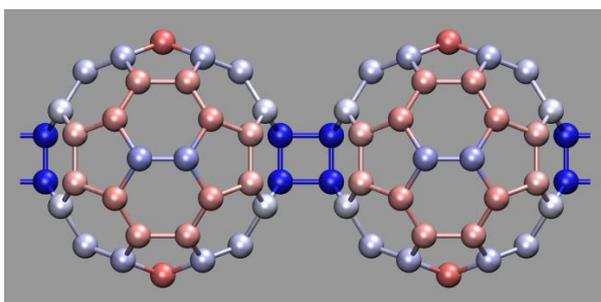
図5. (a) トップ及びサイドから見た構造最適化後のペンタ BCN 原子構造。

(b) ペンタ BCN 中のフォノン分散曲線。虚数は現れず、動的に安定な原子構造であることが分かる。

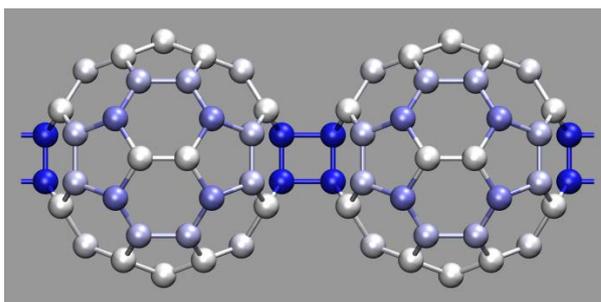
(c) 1200 K での分子動力学計算結果のポテンシャルエネルギーの揺れ。上部内挿図はシミュレーション最後の時刻での原子構造のトップ及びサイド図。灰色、桃色、青の球はそれぞれ C、B 及び N 原子を表す。

(5) 炭素ナノ構造体中のポーラロン

炭素のナノ構造体への電荷ドーピングの効果を一般化 Su-Schrieffer-Heeger (SSH) 模型により理論的に検討した。具体的な対象物としては、フラレン単体、フラレンの1次元 (図6) 及び2次元結合体、グラファイト、及びペンタグラフェンである。計算結果が示すことは、原子構造の対称性とは別にポーラロンとしての複雑な対称性を有する電荷移動が生起される。興味深いことに、中性の場合もヤーン・テラー効果により、電荷は一様には分布せず、各々に特徴的なパターンを示す。これらに電子をドーピングした場合に起こる電荷分布変化の詳細を検討した。電荷分布は炭素ナノ構造体の物性を支配するため、本成果は新たな機能性を予測するものである。



(上図)
結合部に電子が集中していることが分かる。赤は正、青は負の電荷を示す。



(下図)
電子をドーピングすると、フラレン表面の電荷分布が大幅に変化するが結合部に電子が集中していることには変わりはない。

図6. 1次元チェーン型フラレン構造体のポーラロン

(6) マテリアルズインフォマティクスの適用

本研究の重要なテーマであるマテリアルズ・インフォマティクス (MI) を活用した新規二次元有用材料探索を実施した。現在、標準的な材料設計シミュレーション用ソフトウェアは、密度汎関数理論 (DFT, Density Functional Theory) に基づくもので、基底状態の理論を使っている。その中で電子の交換相関相互作用汎関数は関数形が未定の部分のため、実験に合わせる道具にしてしまう「現象論」が横行している。特に、光反応で重要なバンドギャップ値を算定するためにはDFTより高度な電子の多体相関を取り込んだGW近似が必須であるが、多くの研究者が現象論としてUとか α と呼ばれるパラメータを適用して実験値に合わせている。これではバンドギャップ・エンジニアリングは不可能である。我々は独自開発のTOMBO(=TOhoku Mixed-Basis Orbitals Ab initio program package) のGW近似を適用したMIを試みた。全電子法なので、バンドギャップの様な相対的な物理量のみならず、各準位の絶対値算定が可能である。我々の研究成果の蓄積による大規模データベースは、実験値並 (時には以上) の信頼性を担保しており、今後、より充実させ公開する予定である。

引用文献

- [1] M. Maruyama and S. Okada, Appl. Phys. Express 6, 095101 (2013).
- [2] S. H. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. S. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, PNAS 112, 2372(2015).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計25件（うち査読付論文 25件 / うち国際共著 22件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Liu Jie, Li Xiaoyin, Wang Qian, Kawazoe Yoshiyuki, Jena Puru	4. 巻 6
2. 論文標題 A new 3D Dirac nodal-line semi-metallic graphene monolith for lithium ion battery anode materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 13816 ~ 13824
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8ta04428g	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 Chen Wenzhou, Kawazoe Yoshiyuki, Shi Xingqiang, Pan Hui	4. 巻 20
2. 論文標題 Two-dimensional pentagonal CrX (X = S, Se or Te) monolayers: antiferromagnetic semiconductors for spintronics and photocatalysts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 18348 ~ 18354
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp02470g	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 Shao Yangfan, Shao Mengmeng, Kawazoe Yoshiyuki, Shi Xingqiang, Pan Hui	4. 巻 6
2. 論文標題 Exploring new two-dimensional monolayers: pentagonal transition metal borides/carbides (penta-TMB/Cs)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 10226 ~ 10232
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8ta00635k	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 Das Tisita, Chakrabarty Soubhik, Kawazoe Y., Das G. P.	4. 巻 8
2. 論文標題 Tuning the electronic and magnetic properties of graphene/h-BN hetero nanoribbon: A first-principles investigation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 065111 ~ 065111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5030374	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, X ; Wu, QS; Cheng, Y ; Wen, B; Wang, Q ; Kawazoe, Y ; Jena, P	4. 巻 127
2. 論文標題 Monoclinic C-16: sp(2)-sp(3) hybridized nodal-line semimetal protected by PT-symmetry	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 CARBON	6. 最初と最後の頁 527-532
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/ j.carbon.2017.11.046	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 Ohno, K; Manjanath, A ; Kawazoe, Y ; Hatakeyama, R; Misaizu, F; Kwon, E; Fukumura, H ; Ogasawara, H ; Yamada, Y; Zhang, C ; Sumi, N ; Kamigaki, ; Kawachi, K ; Yokoo, K ; Ono, S; Kasama, Y	4. 巻 10
2. 論文標題 Extensive first-principles molecular dynamics study on Li encapsulation into C-60 and its experimental confirmation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 NANOSCALE	6. 最初と最後の頁 1825-1836
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/ c7nr07237f	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 Wang, JT; Nie, SM; Weng, HM ; Kawazoe, Y ; Chen, CF	4. 巻 120
2. 論文標題 Topological Nodal-Net Semimetal in a Graphene Network Structure	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 PHYSICAL REVIEW LETTERS	6. 最初と最後の頁 art. 026402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.120.026402	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 Kawazoe, Y; Belosludov, VR ; Zhdanov, RK; Belosludov, RV	4. 巻 265
2. 論文標題 Polarons in endohedral Li+@C-60(-) dimers and in 1D and 2D crystals	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 SOLID STATE COMMUNICATIONS	6. 最初と最後の頁 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/ j.ssc.2017.07.017	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 Cheng Yong, Feng Xing, Cao Xiaoting, Wen Bin, Wang Qian, Kawazoe Yoshiyuki, Jena Puru	4. 巻 13
2. 論文標題 Body-Centered Tetragonal C16: A Novel Topological Node-Line Semimetallic Carbon Composed of Tetrarings	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Small	6. 最初と最後の頁 1602894 ~ 1602894
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/smll.201602894	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 Nguyen-Truong Hieu T., Le Hung M., Kawazoe Yoshiyuki, Nguyen-Manh Duc	4. 巻 115
2. 論文標題 Ab initio direct dynamics of transition metal atom/dimers bombardments onto graphene: Evolution of magnetic alignment	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 791 ~ 802
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2016.11.078	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 Ahadian Samad, Naito Ushio, Surya Velappa Jayaraman, Darvishi Sorour, Estili Mehdi, Liang Xiaobin, Nakajima Ken, Shiku Hitoshi, Kawazoe Yoshiyuki, Matsue Tomokazu	4. 巻 123
2. 論文標題 Fabrication of poly(ethylene glycol) hydrogels containing vertically and horizontally aligned graphene using dielectrophoresis: An experimental and modeling study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 460 ~ 470
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2017.07.082	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 Silambarasan D., Surya V.J., Iyakutti K., Asokan K., Vasu V., Kawazoe Y.	4. 巻 418
2. 論文標題 Gamma ()-ray irradiated multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) for hydrogen storage	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 49 ~ 55
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2017.02.262	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 Wang Jian-Tao, Chen Changfeng, Mizuseki Hiroshi, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 20
2. 論文標題 New carbon allotropes in sp + sp ³ bonding networks consisting of C8 cubes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 7962 ~ 7967
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7cp08380g	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 Iyakutti Kombiah, Rajeswarapalanichamy Ratnavelu, Surya Velappa Jayaraman, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 31
2. 論文標題 Quantum scar and breakdown of universality in graphene: A theoretical insight	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 International Journal of Modern Physics B	6. 最初と最後の頁 1750257 ~ 1750257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S0217979217502575	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 Wang Fancy Qian, Liu Jie, Li Xiaoyin, Wang Qian, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 111
2. 論文標題 Weak interlayer dependence of lattice thermal conductivity on stacking thickness of penta-graphene	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 192102 ~ 192102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4996054	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 Bu Kun, Wang Jian-Tao, Li Zhen-Zhen, Mizuseki Hiroshi, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 383
2. 論文標題 A superhard orthorhombic carbon with all six-membered-ring in sp ³ bonding networks	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physics Letters A	6. 最初と最後の頁 2809 ~ 2812
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physleta.2019.05.051	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 Sethulakshmi N., Mishra Avanish, Ajayan P.M., Kawazoe Yoshiyuki, Roy Ajit K., Singh Abhishek K., Tiwary Chandra Sekhar	4. 巻 27
2. 論文標題 Magnetism in two-dimensional materials beyond graphene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Materials Today	6. 最初と最後の頁 107 ~ 122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mattod.2019.03.015	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 Chen Wenzhou, Yang Ming, Sun Yi-Yang, Kawazoe Yoshiyuki, Shi Xingqiang, Pan Hui	4. 巻 479
2. 論文標題 Design of pentagonal NbX monolayers for electronics and electrocatalysis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 595 ~ 600
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2019.02.110	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 Sun Jie, Guo Yaguang, Wang Qian, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 145
2. 論文標題 Thermal transport properties of penta-graphene with grain boundaries	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 445 ~ 451
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2019.01.015	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 Hagita Katsumi, Kawazoe Yoshiyuki, Ogino Masao	4. 巻 9
2. 論文標題 Applications of aesthetic pentagon-shaped stereo tiling employing pentagraphene carbon?star walls and embossment design	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 035001 ~ 035001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5085641	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 Hassan Arzoo, Guo Yaguang, Wang Qian, Kawazoe Yoshiyuki, Jena Puru	4. 巻 125
2. 論文標題 Interfacial properties of penta-graphene-metal contacts	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 065308 ~ 065308
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5085414	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 Yang Yong, Liu Fuchi, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 124
2. 論文標題 Adsorption of water on fluorinated graphene	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics and Chemistry of Solids	6. 最初と最後の頁 54 ~ 59
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpccs.2018.08.030	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 Zhou Wenyang, Shen Haoming, Wang Qian, Onoe Jun, Kawazoe Yoshiyuki, Jena Puru	4. 巻 152
2. 論文標題 N-doped peanut-shaped carbon nanotubes for efficient CO2 electrocatalytic reduction	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 241 ~ 246
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2019.05.078	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 Younis Umer, Muhammad Imran, Kawazoe Yoshiyuki, Sun Qiang	4. 巻 20
2. 論文標題 Tuning the Properties of Tetracene Based Nanoribbons by Fluorination and N Doping	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 2799 ~ 2805
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201900803	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 Muhammad Imran, Younis Umer, Xie Huanhuan, Kawazoe Yoshiyuki, Sun Qiang	4. 巻 3
2. 論文標題 Graphdiyne Based Monolayers as Promising Anchoring Materials for Lithium-Sulfur Batteries: A Theoretical Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 1900236 ~ 1900236
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.201900236	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

〔学会発表〕 計15件 (うち招待講演 11件 / うち国際学会 11件)

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 未知の物質を見つける スパコンで構造や特性を推定
3. 学会等名 中部大学学術支援室・特別講演会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database - How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications -
3. 学会等名 Japan-China Symposium, Nagoya University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database - How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications -
3. 学会等名 INOMAR, HCM City, VietNam (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database - How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications -
3. 学会等名 LSC, OPICON2018, Pacifico-Yokohama (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 マテリアルズ・インフォマティクスを有用な材料設計開発ツールとするために必要な信頼性のあるデータベース構築
3. 学会等名 ナノ学会、東京大学本郷キャンパス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database - How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications -
3. 学会等名 Nano-Korea, Satellite Workshop, KINTEC, Korea (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database - How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications
3. 学会等名 Workshop for Computational Materials Science, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, China (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database - How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications -
3. 学会等名 IUMRS-ICEA, Daejeon, Korea. (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiyuki KAWAZOE
2. 発表標題 Materials Informatics based on the Reliable Materials Database
3. 学会等名 ICONN, SRMIST Chennai, India (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 ペンタグラフェン - A new Carbon Allotropes Predicted by Geometrical Survey with ab-initio Simulations and Expected as Functional Materials - Penta-graphene -
3. 学会等名 ナノ学会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 ペンタグラフェン
3. 学会等名 放射光とレーザーの連携シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 What is ab initio computer simulation for materials design
3. 学会等名 ACCMS-9, TOMBO tutorial, Kuala Lumpur, Malaysia (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 What is real ab initio simulation for materials design? - with predictable power -
3. 学会等名 The first MRS Thailand International Conference, Chiang Mai, Thailand (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 Penta-graphene ? Recent Progress
3. 学会等名 ICAE2017, Jeju Island, Korea (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 川添 良幸
2. 発表標題 Materials Informatics based on Reliable Materials Database- How to Evaluate and Certify the Reliability of Materials Data for Materials Informatics in Industrial Applications -
3. 学会等名 JAIST-ISM-KISTワークショップ (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018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	ベロスルドフ ロディオ (Belosludov Rodion) (10396517)	東北大学・金属材料研究所・准教授 (11301)	
研究 分担者	尾上 順 (Onoe Jun) (50241245)	名古屋大学・工学研究科・教授 (13901)	