

令和 5 年 5 月 2 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2022

課題番号：17K05053

研究課題名（和文）グラフェンの欠陥エンジニアリングと新機能探索

研究課題名（英文）Defect engineering and exploration of new function for graphene

研究代表者

藤本 義隆（Fujimoto, Yoshitaka）

九州大学・工学研究院・特任准教授

研究者番号：70436244

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、グラフェン中に欠陥を導入することで新たな物性の発現やそれに基づく新機能電子デバイスを提案することを目的とした。ここでは、グラフェンと不純物分子との相互作用に関して明らかにし、それによる電子構造の変化や輸送特性との関係性を示した。また、これらの関係性を利用することで、環境汚染物質などを選択的に検知可能な高感度センサーデバイスへ応用できることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

原子膜物質の代表的な物質のグラフェンは、特異な物性を示すことから、高性能電子デバイスへの応用が期待されていた。本研究で得られた成果は、欠陥の存在がグラフェンの特性やデバイスの性能に大きく影響を及ぼすことを示唆しており、学術的にも社会的にも意義がある。

研究成果の概要（英文）：Introducing defects into graphene was studied to control the physical properties and to develop high-performance graphene-based electronic devices. In this study, the relationship among the interactions of graphene with molecules, electronic structures, and transport properties was clarified. Defective graphene was found to be useful for highly sensitive sensor device to selectively detect environmental pollutants in air.

研究分野：表面界面物性

キーワード：グラフェン 原子膜物質 ナノチューブ 第一原理輸送計算

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

グラフェン(グラファイトの一原子層)は、極めて高いキャリア移動度など特異な電子的特性を有することから、新たな物性発現の可能性のみならず、電界効果型トランジスタの伝導チャンネルやセンサーなど電子デバイス応用への可能性が期待されている。通常、異種原子をグラフェンにドーピングすることで、電子(n型伝導特性)や正孔(p型伝導特性)などの電気的キャリアを誘発するなどグラフェンの電子的特性を制御する。また、ドーピングされたグラフェン内の異種原子ドーパント近くでは、グラフェン表面上での反応性や吸着性を向上させることが報告されている。窒素は、異種元素ドーパントとして有力な候補として知られており、盛んに研究が行われてきた。例えば、窒素ドーピング型グラフェンは、n型トランジスタのチャンネルとして有望な基盤材料であることや、窒素ドーパント周りで水素が吸着することから、水素貯蔵材料としての応用の可能性について議論されてきた。一方、ホウ素はドーパントとして有用な元素であるが、これまで十分に研究がなされていない状況にあった。近年、窒素ドーピング型グラフェンよりもホウ素ドーピング型グラフェンの方が、より不純物分子などに対する吸着性や反応性が向上することが報告された。そのため、ホウ素ドーピング型グラフェンは、反応性が高く、エネルギー効率の高いデバイス材料として有望であることが期待されていた。

2. 研究の目的

本研究では、グラフェンへ異種原子をドーピングすることにより、グラフェンの新機能出現の可能性を探索すると共に、グラフェン型高機能電子デバイスの設計を行うことを目的とした。ここでは、不純物ドーパントとしてホウ素に着目し、構造安定性、電子構造、輸送特性や反応性などの基礎的な物性を明らかにし、それらを用いた電子デバイス応用を提案する。また、窒素ドーピングによるグラフェンの物性の類似点・相違点を明らかにする。

3. 研究の方法

(1) グラフェンを用いたセンサーデバイス応用を目指して、ホウ素ドーピング型グラフェンの環境汚染物質の吸着特性を調べた。環境汚染物質として代表的な窒素酸化物と炭素酸化物を用い、また大気中にある典型的な物質として酸素や窒素を用いた。ホウ素ドーピング系との比較のため、窒素ドーピング系についても調べた。さらに、ホウ素ドーピング型グラフェンの電子輸送特性を調べ、環境汚染物質などのガス吸着と輸送特性との関係を調べた。

(2) グラフェンは、一原子層であるため基板物質などに置いた場合、グラフェンの物性が基板の種類によって影響を受けることが報告されている。ここでは、二層系グラフェンに関してホウ素ドーピングの影響と環境汚染物質群の吸着特性を明らかにすることを目的として、研究を行った。二層系グラフェンには、3種類の積層パターンが報告されているが、これら3種類に関して調べた。

(3) グラフェンの反応性や吸着性を高めることを目的に、グラフェンを曲げた状況下での物性を調べることを行った。グラフェンの曲率の影響を考慮したモデルとして、ナノチューブを用いた。曲率の違いを明らかにするため、直径の異なる3種類のナノチューブを主に用いた。

4. 研究成果

(1) 環境汚染物質を含めた分子の吸着特性に関しては、窒素ドーピング系よりも、ホウ素ドーピング系の吸着エネルギーが大きい、また、吸着分子とグラフェン間の結合距離が短いといった傾向があることが分かった。これらの結果から、大気汚染気中で、一酸化窒素と二酸化窒素だけがホウ素ドーピング型グラフェンと強く吸着することが分かった(図1)。次に、グラフェンの輸送特性を調べた。ホウ素をドーピングすると、グラフェンの伝導度が大きく変化することが分かった。また、一酸化窒素が吸着した場合と二酸化窒素が吸着した場合とでは、グラフェンの伝導度が異なることが分かった(図2)。このことは、グラフェンの伝導度が、吸着する分子の種類に依存して固有の値を示すことを意味している。以上の結果、ホウ素ドーピング型グラフェンは、環境汚染物質である一酸化窒素と二酸化窒素を選択的に識別可能なセンサーデバイス材料として有用であることを示唆する結果を得た。本研究成果は、応用物理学会欧文誌に学術論文として出版され、スポットライト論文に選ばれた。

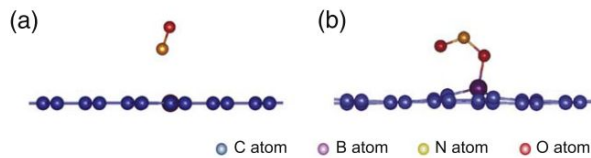


図1 ホウ素ドーピンググラフェン上の(a)一酸化窒素と(b)二酸化窒素の最適化構造。

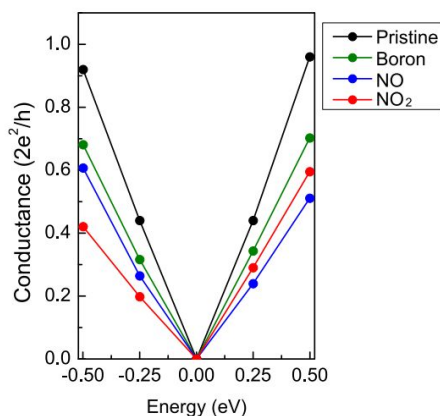


図2 グラフェンのコンダクタンススペクトル。

(2) 3種類の積層パターンの違いに関わらず、窒素酸化物などの環境汚染物質の吸着特性には、大きな違いは見られなかった(図3)。また、二層グラフェンの吸着特性は、単層グラフェンと類似した結果を示すことが分かった。このことは、環境汚染物質の吸着に関して、二層グラフェンの一層分は、緩衝層として機能していることを意味する。一方、二層グラフェンの輸送特性について調べた結果、それぞれの積層パターンに依存した特有の伝導特性がみられることが分かった(図4)。また、二層グラフェンの伝導度は、吸着する分子の種類に依存して固有の振舞いを示すことが分かった。これらの結果から、二層グラフェンにおいても、一酸化窒素と二酸化窒素を選択的に識別可能なデバイス材料として有用であることが分かった。

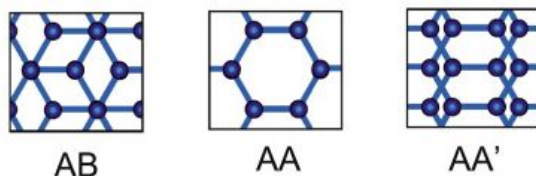


図3 二層グラフェンの3種類の積層図。

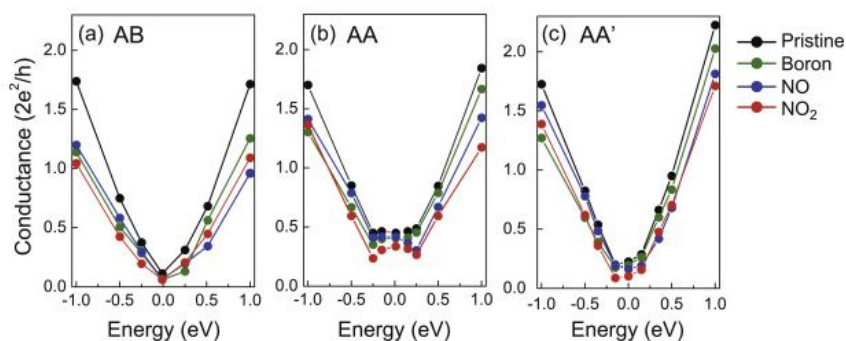


図4 二層グラフェンのコンダクタンススペクトル。

(3) ホウ素ドーピング系と窒素ドーピング系ナノチューブへの不純物ガス吸着の吸着エネルギーは、グラフェンの場合よりも全体的に向上した。窒素ドーピング系では、大気雰囲気中で一酸化窒素や二酸化窒素のみが強く結合する。ホウ素ドーピング系では、窒素酸化物と強く結合するとともに、一酸化炭素及び酸素とも強く結合することが分かった。また、ホウ素ドーピング系では、一酸化炭素や酸素が吸着すると、伝導度が大きく変化する。一方、窒素ドーピング系では窒素酸化物が吸着すると、価電子帯のみならず伝導帯の領域でも伝導度が大きく変化する。また、ナノチューブの直径が大きくなると、吸着エネルギーが大きくなる傾向があることが分かった。以上の結果から、ホウ素ドーピングや窒素ドーピングナノチューブを用いることで、環境汚染物質の窒素酸化物、人体に有害な一酸化炭素や大気中の酸素は、選択的に検知可能であるといった結果を得た。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13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 Rojas Kurt Irvin M., Cuong Nguyen Thanh, Nishino Hiroaki, Ishibiki Ryota, Ito Shin-ichi, Miyauchi Masahiro, Fujimoto Yoshitaka, Tominaka Satoshi, Okada Susumu, Hosono Hideo, Arboleda Nelson B., Kondo Takahiro, Morikawa Yoshitada, Hamada Ikutaro	4. 巻 2
2. 論文標題 Chemical stability of hydrogen boride nanosheets in water	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s43246-021-00184-5	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 Haga Taishi, Matsuura Yuuto, Fujimoto Yoshitaka, Saito Susumu	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 Fujimoto Yoshitaka, Saito Susumu	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 ~ 037512
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1149/1945-7111/ac5bab	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 Fujimoto Yoshitaka	4. 巻 -
2. 論文標題 Theoretical study on quantum transport of carbon nanotubes for detecting toxic molecules: The role of dopants	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Electrochemical Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.5599/jese.1243	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 Onodera Momoko, Isayama Miyako, Taniguchi Takashi, Watanabe Kenji, Masubuchi Satoru, Moriya Rai, Haga Taishi, Fujimoto Yoshitaka, Saito Susumu, Machida Tomoki	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 Fujimoto Yoshitaka, Saito Susumu	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 ~ 100028
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 Fujimoto Yoshitaka	4. 巻 35
2. 論文標題 Quantum transport, electronic properties and molecular adsorptions in graphene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Modern Physics Letters B	6. 最初と最後の頁 2130001 ~ 2130001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1142/S0217984921300015	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 100
2. 論文標題 Electronic structure and scanning tunneling microscopy images of heterostructures consisting of graphene and carbon-doped hexagonal boron nitride layers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 125403_1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.125403	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 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 -

1. 著者名 Yoshitaka Fujimoto and Susumu Saito	4. 巻 58
2. 論文標題 Gas adsorption effects on stabilities, electronic structures and scanning tunneling microscopy images of monolayer graphene 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 Haga Taishi, Fujimoto Yoshitaka, Saito Susumu	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 ~ S11B03
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 Fujimoto Yoshitaka	4. 巻 7
2. 論文標題 First-principles theoretical investigation of graphene layers for sensor applications	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Nanomaterials and Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1177/1847980417737645	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	4. 巻 2017
2. 論文標題 Formation and Physical Properties of h-BN Atomic Layers: A First-Principles Density-Functional Study	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Advances in Materials Science and Engineering	6. 最初と最後の頁 2676432_1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1155/2017/2676432	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47件(うち招待講演 8件/うち国際学会 26件)

1. 発表者名 Y. Fujimoto and S. Saito
2. 発表標題 Curvature effects of graphene and carbon nanotube on molecular adsorption and quantum transport
3. 学会等名 MRM Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Kawamura, R. Ishibiki, Y. Fujimoto, T. Goto, S. Ito, T. Fujita, T. Tokunaga, M. Miyauchi, S. Iimura, A. Yamamoto, D. Umeyama, S. Tominaka, S. Saito, H. Hosono, T. Kondo
2. 発表標題 Substitutional doping from boron to carbon in hydrogen boride sheets
3. 学会等名 MRM Meeting 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Kawamura, R. Ishibiki, Y. Fujimoto, T. Goto, S. Ito, T. Fujita, T. Tokunaga, M. Miyauchi, S. Iimura, A. Yamamoto, D. Umeyama, S. Tominaka, S. Saito, H. Hosono, T. 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 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 Electronic transport and molecular adsorptions of graphene and CNT layers for designing molecular sensors by first-principles study
3. 学会等名 AAAFM-UCLA International Conference on Advances in Functional Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

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

1. 発表者名 川村 陸, 藤本 義隆, 石引 涼太, 後藤 大河, 伊藤 伸一, 藤田 武志, 徳永 智春, 宮内 雅弘, 飯村 壮史, 山本 明保, 斎藤 晋, 細野 秀雄, 近藤 剛弘
2. 発表標題 ドーピング量を制御した炭素ドーピングホウ化水素シートの合成と評価
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 川村陸、藤本義隆、石引涼太、後藤大河、伊藤伸一、藤田武志、徳永智春、宮内雅浩、飯村莊史、山本明保、斎藤晋、細野秀雄、近藤剛弘
2. 発表標題 炭素をドーピングしたホウ化水素シートの合成と評価
3. 学会等名 2020年日本真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 川村 陸, 藤本 義隆, 石引 涼太, 後藤 大河, 伊藤 伸一, 藤田 武志, 徳永 智春, 宮内 雅弘, 飯村 壮史, 山本 明保, 斎藤 晋, 細野 秀雄, 近藤 剛弘
2. 発表標題 炭素をドーブしたホウ化水素シートの合成と評価
3. 学会等名 第14回物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 Theory of electron transport in graphene and sensing device applications
3. 学会等名 3rd Workshop of Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Y. Fujimoto and S. Saito
2. 発表標題 Molecular adsorption and electronic properties of doped graphene for sensor applications
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Haga, Y. Fujimoto, and S. Saito
2. 発表標題 Electronic properties of graphene/C-doped h-BN heterostructures
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Yamashita, T. Haga, Y. Fujimoto, and S. Saito
2. 発表標題 New Method for First-principles Electronic-structure study of Impurity Induced States and its Application to Diamond and Cubic BN
3. 学会等名 Material Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 First-principles theoretical design of graphene-based sensor applications
3. 学会等名 3rd International Conference on Mechanical Engineering and Applied Composite Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 Conductivity and Molecular adsorptions in graphene
3. 学会等名 2nd Workshop of Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application Workshop (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Fujimoto and S. Saito
2. 発表標題 Molecular adsorption and electronic properties of doped graphene
3. 学会等名 The 11th International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 Adsorption of molecules and electronic properties of graphene: A first-principles study
3. 学会等名 Tokyo Institute of Technology and Stony Brook University Joint Science and Technology Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Haga, Y. Fujimoto, and S. Saito
2. 発表標題 STM visualization of carbon impurities in graphene/h-BN heterostructures
3. 学会等名 Tokyo Institute of Technology and Stony Brook University Joint Science and Technology Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 Electronic structures and STM images of molecules and defects in graphene and rutile TiO ₂ (110) surface
3. 学会等名 Defect Functionalized Sustainable Energy Materials: From Design to Devices Application Workshop
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 グラフェン上の分子の吸着特性と電子物性
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 芳賀太史、松浦雄斗、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 First-principles electronic-structure study of stabilities and electronic properties of trilayer h-BN
3. 学会等名 第58回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 複数層h-BNの不純物の電子構造
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 h-BN膜におけるドナーとアクセプターのイオン化エネルギーの高精度計算推定
3. 学会等名 第33回ダイヤモンドシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山下 寛樹、芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 密度汎関数理論に基づく不純物状態の新たな高精度計算手法とダイヤモンドおよび立方晶窒化ホウ素に対する応用
3. 学会等名 第33回ダイヤモンドシンポジウム
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Fujimoto
2 . 発表標題 First-principles theoretical design of carbon materials for detecting environmentally polluting and toxic gases
3 . 学会等名 International Conference on Innovative Applied Energy (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 S. Saito, Y. Matsuura, and Y. Fujimoto
2 . 発表標題 Modulation doping in hexagonal BN atomic-layer semiconductor
3 . 学会等名 APS March Meeting 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Fujimoto, Y. Matsuura, T. Haga, and S. Saito
2 . 発表標題 First-Principles Electronic-Structure Study of Doped Graphene, Doped hexagonal Boron Nitride Layers, and their Heterostructures
3 . 学会等名 9th A3 Symposium on Emerging Materials: Nanomaterials for Electronics, Energy and Environment (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Haga, Y. Fujimoto, and S. Saito
2 . 発表標題 Effects of carbon impurity-induced states in h-BN substrate on the electronic properties of graphene
3 . 学会等名 9th A3 Symposium on Emerging Materials: Nanomaterials for Electronics, Energy and Environment (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Haga, Y. Fujimoto, and S. Saito
2. 発表標題 STM visualization of carbon impurities in h-BN substrate by graphene
3. 学会等名 14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 First-principles theory of graphene-based sensor devices for detecting toxic gas
3. 学会等名 The First International Symposium on Quantum Science & Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 斎藤晋、藤本義隆、山下 寛樹、芳賀太史
2. 発表標題 半導体中の不純物状態の新たな定量的予測方法
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 STM images of graphene/C-doped h-BN heterostructures from first-principles electronic-structure calculations
3. 学会等名 第56回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山下 寛樹、芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 第一原理電子構造研究による立方晶窒化ホウ素とダイヤモンドの不純物状態の予測
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山下 寛樹、芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 第一原理電子構造研究による立方晶窒化ホウ素とダイヤモンドの不純物状態の解明
3. 学会等名 第32回ダイヤモンドシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 不純物ドーピンググラフェンへの分子吸着と電子伝導
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 松浦雄斗、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 炭素がドーピングされた三層系h-BN の電子状態
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 芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 ドナーとアクセプターが共存する複数ドーブBN膜の電子物性
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 Y. Fujimoto
2. 発表標題 Strain induced effects of hexagonal boron nitride atomic layers: A first-principles density-functional investigation
3. 学会等名 19th Nano Congress for Next Generation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 First-principles Theoretical Investigation of Graphene for Sensor Applications
3. 学会等名 8th Annual Congress on Analytical and Bioanalytical Techniques (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Fujimoto, S. Saito
2. 発表標題 Gas adsorption effects on graphene doped with B and N atoms: a first-principles study
3. 学会等名 10th International Conference on Science and Technology of Advanced Ceramics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Fujimoto, S. Saito
2. 発表標題 Gas adsorption, stabilities and electronic properties of graphene monolayers and bilayers doped with B and N
3. 学会等名 APS March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Saito, T. Haga, Y. Fujimoto
2. 発表標題 Band Structure Engineering in C-doped Boron-Nitride Atomic-Layer Materials via Interlayer Interaction and Electron Correlation
3. 学会等名 APS March Meeting 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 Gas Adsorption Effects on Stabilities and Electronic Properties of Monolayer Graphene for Sensor Applications: A First-Principles Study
3. 学会等名 第53回フラーレン・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 藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 ドーピングされたグラフェンへの環境汚染ガス吸着
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 芳賀太史、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 Cドープされたh-BN膜とグラフェンからなる複合原子膜の電子物性
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松浦雄斗、藤本義隆、斎藤晋
2. 発表標題 三層系h-BN膜の安定積層構造と電子状態
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 斎藤晋、藤本義隆、芳賀太史
2. 発表標題 CドープされたBNナノチューブの電子構造と不純物状態
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Y. Fujimoto
2. 発表標題 First-principles Theoretical Design and Analysis of Graphene for Sensor Applications
3. 学会等名 European Advanced Energy Materials Congress (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計4件

1. 著者名 Yoshitaka Fujimoto	4. 発行年 2021年
2. 出版社 Springer Nature	5. 総ページ数 19
3. 書名 Handbook of Carbon Nanotubes	

1. 著者名 Yoshitaka Fujimoto	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 14
3. 書名 Sustainable Materials for Next Generation Energy Devices	

1. 著者名 Yoshitaka Fujimoto	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Wiley-Scrivener Publishers	5. 総ページ数 24
3. 書名 Nanotechnology for Sustainable Water Remediation	

1. 著者名 Yoshitaka Fujimoto	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 16
3. 書名 New Polymer Nanocomposite for Environmental Remediation	

〔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
---------	---------