

戦略的創造研究推進事業 CREST  
研究領域「次世代エレクトロニクスデバイスの創出  
に資する革新材料・プロセス研究」  
研究課題「計算科学によるグラファイト系材料  
の基礎物性解明とそのデバイス応用における設  
計指針の開発」

## 研究終了報告書

研究期間 平成21年10月～平成27年 3月

研究代表者：岡田 晋  
(筑波大学・数理物質系、教授)

## § 1 研究実施の概要

### (1) 実施概要

グラフェン・グラファイト等の低次元炭素誘導体は、そのサイズ、形状、次元性に起因した特異な電子物性を有することから、国際半導体ロードマップにおいて、Emerging Research Materialとして注目を集めている。特に、グラファイトは、フェルミレベル近傍の線形バンドが生み出す高い電子移動度から次世代の高速かつ低駆動電圧デバイスを実現する材料候補として注目されている。さらには、強固な炭素間共有結合に起因する高い熱伝導性から、熱デバイスとしての応用も期待されている。しかしながら、これまでに報告されている、グラフェンを用いた電界効果トランジスタデバイスの特性は実験ごとに分散が大きく、デバイス中におけるグラファイト複合構造の物性制御が全くなされていないことを示唆している。すなわち現状においてグラファイトは半導体材料としてデバイス集積化プロセスに到底資するものとなり得ないことを示唆している。このような現状を鑑み、当該研究では、量子論に立脚した計算科学のアプローチを以て、広義グラフェン・グラファイト複合構造体の基礎物性の解明をおこない、グラフェン等の原子層物質が関わる低次元界面科学に基づく、グラフェン、CNT、フラーレン、ナノダイヤモンドといった炭素系ナノ物質を用いたデバイス設計指針を提示することが研究のねらいである。すなわち、本プロジェクトでは、「**グラファイト系材料が関わる広義複合構造体の物性探索**」と「**グラファイト系材料の物性解明**」の2つの基幹となるテーマを実施し、その成果を基にグラファイト系物質の基礎物性の解明と原子膜状物質の関わるナノサイエンスの構築を行い、その知見を基盤として「**グラファイト系材料を用いた新規デバイス構造の設計指針の提示**」を行うものである。

グラファイト系材料が関わる広義複合構造体の物性探索に対しては、グラフェン/絶縁体界面、グラフェン/金属界面に対する理論的な電子物性解析から、グラフェンの電子構造が基板の種類によらず脆弱であることを明らかにした。また、金属や絶縁体に加えて、電子デバイス中のグラファイト系材料において、機能制御に必須となる電界も広義の異種物質として考慮し、電界とグラファイト系材料の複合構造体の物性解明も行い、電界がグラフェンの基礎物性に及ぼす影響が多大であることを明らかにした。これらの全ての結果は、グラファイト系材料を用いたデバイスの機能/物性制御には、広義異種物質との複合構造を考慮に入れたデバイス設計が必須であることを示したものである。

グラファイト系材料の物性に関しては、グラフェンにおいて本質的に存在するグレイン境界に着目し、境界領域におけるグラフェンの基礎物性の解明を行った。ここでは、境界に本質的に存在するトポロジカル欠陥に着目し、トポロジカル欠陥近傍においてグラフェンの電子構造が著しく変調を受け、トポロジカル欠陥、すなわち境界に対する向きに応じて異なる伝導特性が期待できることを示し、グレイン境界が伝導特性に影響を及ぼすことを明らかにした。また、グラフェンのリボンに着目し、その端形状に対する電子物性の依存性も明らかにし、端の僅かな形状の違いで電子構造が大きく変調を受けることを示した。形状制御の方策として、物理的な端、サイズ制御に加えて、非炭素系物質の表面改変を基にしたグラフェンと等価な電子系の物質設計とその物性解明をおこない、その表面微細加工により、グラフェンの電子構造、半導体、磁性といった、任意の物性/機能を埋め込むことが可能であることを示した。

グラファイト系材料を用いたデバイス構造の提示に関しては、カーボンナノチューブ、グラフェンナリボンといった1次元構造に着目し、それらが高い光電変換効率を有する光電変換デバイスとしての応用が可能であることを示し、その変換効率が最大で170%にも及ぶことを示した。同時に光電流生成効率も160%に及ぶことを明らかにし、その結果を基に透明かつフレキシブルな高効率光電変換デバイス構造の設計指針の開発を行った。また、グラフェンとダイヤモンドの複合構造に着目し、両者の間の高い熱コンダクタンスを応用した、高熱放出機能を有する高導電性材料としての応用可能性を示した。

## (2) 顕著な成果

### <優れた基礎研究としての成果>

#### 1. 絶縁体基板によるグラフェン電子構造の変調

##### 概要:

本研究ではグラフェンの担持基板として広く用いられているSiO<sub>2</sub>に着目し、その上に吸着されたグラフェンのエネルギー論と電子構造を第一原理的に解明したものである。その結果、基板-グラフェンの相互作用は炭素原子あたり 10meV 程度であるにも関わらず、グラフェンの線形分散バンドは基板の作る静電ポテンシャルの空間変調に非常に脆弱であり、最大で 50meV のバンドギャップを形成することを明らかにした。この結果は物理吸着的な相互作用においても、グラフェンの特徴的な電子物性は容易に変調を受けることを世界に先駆けて示した物であり、多くの追従研究を誘起した。

#### 2. 電場下におけるグラファイト系物質の電子物性解明

##### 概要:

本プロジェクトでは、種々のグラファイト系材料の電場下での物性を明らかにしたものである。特に、2層グラフェンでの金属-半導体-金属転移、グラフェンリボン、CNT における結合交代を反映した非一様電界遮蔽現象、さらには、グラファイト系物質に特有な端局在状態に起因するネットワーク端近傍における過剰な遮蔽現象の可能性を提示した。これらの成果はグラファイト系物質の電子物性が外部電界に強く依存し、それらのデバイス応用においては、外部電界による物性変調を考慮に入れたデバイス構造を考慮する必要があることを提示したものである。

#### 3. 菱面体グラファイト表面における磁気秩序発現

##### 概要:

天然のグラファイトにおいて10%程度包含される菱面体グラファイトの表面暴露により、その表面にフェリ磁性的な磁気秩序が発現することを世界に先駆けて提示した。これは、ジグザググラフェンリボン端に発現する磁気秩序発現機構と同様な機構によるものであることを明らかにし、グラファイト系材料のネットワークが誘起する特異な端局在状態が、次元を拡張しても同様に適用可能であることを示した。さらに、端を有さない完全に飽和した sp<sup>2</sup> 炭素ネットワークでの磁性発現の可能性を世界で初めて提示した。

### <科学技術イノベーションに大きく寄与する成果>

#### 1. ナノ炭素物質における高効率光電変換機構の解明と、それを用いた光電変換素子の設計指針の開発

##### 概要:

CNT やグラフェンリボンが持つ次元性に起因する強いクーロン相互作用が有意な励起子間相互作用を誘起し、一光子で多数個の励起子を生み出す起源となることを示した。さらに、その機構とグラファイト系材料が本質的に有する種々の特性を組み合わせることにより、高効率光電変換素子を用いたデバイス構造の設計指針の開発を行った。この結果はフレキシブルかつ透明な高効率光電変換デバイス作成の道筋を示した物であり、今後広い分野での応用が期待される。

#### 2. 簡便かつ安価なノーマリーオフグラフェンの作成方法と半導体グラフェンの極性制御方法の開発

##### 概要:

グラファイト系材料の半導体デバイス応用において必須となるノーマリーオフグラファイト系

材料の簡便かつ安価な生成方法の提示を理論的に行った。ここでは、2層グラフェンが電界印加により半導体化することに着目し、2層グラフェンの上下をイオン性分子でサンドイッチすることで溶液プロセスにより簡便に半導体可能であることを示した。さらに、イオン性分子種の組み合わせを制御することにより、半導体グラフェンの極性も制御することが可能であることを示した。

### § 3 研究実施体制

#### (1) 研究チームの体制について

##### ①「筑波大」グループ

###### 研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	岡田 晋	筑波大学・数理物質系	教授	H21.10～
	中村 潤児	同上	教授	H21.10～
	近藤 剛弘	同上	講師	H21.10～H24.8
*	小鍋 哲	同上	CREST研究員	H22.4～
*	高木 祥光	同上	CREST研究員	H23.4～H24.3
	吉崎智浩	筑波大学・数理物質科学 研究科	修士課程学生	H21.10～H23.3
	山本 貴博	東京理科大学・工学部一 部	講師	H22.4～
	神谷 克政	神奈川工科大学・基礎教 養センター	准教授	H22.4～
*	富田 陽子	筑波大学・数理物質系	CREST 研究員	H24.4～H26.3
*	猪谷 太輔	同上	同上	H25.4～H26.3
	丸山 実那	筑波大学・数理物質科学 研究科	博士課程学生	H24.4～
	山中 綾香	同上	同上	H24.4～
	木暮 聖太	同上	修士課程学生	H25.4～
	石山 佑	同上	同上	H26.4～
	成田 康平	同上	同上	H26.4～

###### 研究項目

- ・グラフェン／金属界面の基礎物性の理論的解明
- ・原子・分子吸着グラフェンの基礎物性の理論的解明
- ・ナノ炭素物質の励起状態の物性解明
- ・グラファイト複合構造体の基礎物性解明とデバイス設計指針の開発

グラファイトデバイスの現状である「サイエンスとテクノロジーの乖離」を量子論に立脚した計算科学のアプローチから乖離の解消を目指し、産総研グループ、青山学院大グループとの密接な融合的共同により、欠陥、吸着原子/分子、異種物質界面、外場を包含する、グラファイト広義複合構造体の基礎物性を解明し、その結果を基にグラファイト系デバイス設計指針の提示が当グループの研究目的である。さらに、そこで得られた知見を基に、グラファイト系材料を用いた新奇デバイス構造の探索と設計指針の提示を行う。

##### ②「産業技術総合研究所」グループ

###### 研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	大谷 実	産業技術総合研究所・ナ ノシステム研究部門	上級主任研究員	H21.10～
	中西 毅	同上	主任研究員	H21.10～
*	Nguyen Thanh Cuong	同上	第一号契約職員	H22.4～

#### 研究項目

- ・グラフェン／絶縁体複合構造の物性解明
- ・電界下におけるグラフェン、ナノ炭素物質、ならびにこれら高次複合構造体の基礎物性解明

グラファイトデバイスの現状である「サイエンスとテクノロジーの乖離」を量子論に立脚した計算科学のアプローチから乖離の解消を目指し、筑波大グループ、青山学院大グループとの密接な融合的共同により、欠陥、吸着原子/分子、異種物質界面、外場を包含する、グラファイト広義複合構造体の基礎物性を解明する。また、その結果をもって、筑波大グループにおいて実施されるグラファイト系デバイス設計指針のサポートをおこなう。

#### ③「青山学院大学」グループ

##### 研究参加者

	氏名	所属	役職	参加時期
○	中田 恭子	青山学院大学・理工学部	准教授	H21.10～
	優 乙石	同上	助教	H21.10～H25.3
	高田 幸宏	同上	同上	H26.4～

#### 研究項目

- ・トポロジー制御による半導体グラフェンの探索
- ・グラフェン関連物質の長周期変調構造の探索

複合構造体の電子物性設計の基礎となるグラフェン自身のナノ構造に着目し、その $\pi$ 電子トポロジーと電子物性との関係を系統的に解析する。複合構造体を形成したときにデバイス応用に足る電子物性を実現することを目標に、有限のバンドギャップと高い移動度とを両立するナノ構造を、モデル計算の範囲で探索する。筑波大グループや産総研グループで解析する複合構造の具体的な構築材料を提供する。またその副産物として、グラフェンナノ構造の $\pi$ 電子トポロジーと電子物性との関係を俯瞰する総合的な「図鑑」を作成する。

#### (2)国内外の研究者や産業界等との連携によるネットワーク形成の状況について

本プロジェクトでは、国内のグラファイト系物質研究に携わる研究員を中心としたチームとなっている。その為、プロジェクトで得られた知見の実証、更には詳細に理論検討すべき物性現象については、国内外の実験的研究グループとの密接なコラボレーションが必要となる。我々は、グラファイト系材料の高効率光電変換材料応用について、京都大学のエネルギー理工学研究所の松田一成教授とのコラボレーションにより、得られた高効率励起子生成の成果に関する実験的な検証を実施した。また、グラフェンの物性および機能制御手法の一つである、グラフェン表面への分子吸着について、九州大学先導物質科学研究所の吾郷浩樹准教授との共同研究を実施し、歪みによる反応性の向上を明らかにした。さらに、NIMS の塚越一仁研究員との共同研究から、2層グラフェンの半導体化についての実証実験を行い、鉛直電場による2層グラフェンの半導体化が実現出来ることを確認した。

### § 3 研究実施内容及び成果

#### 3. 1 グラファイト系材料複合構造体の物性探索 (産総研、筑波大)

グラファイト系材料のデバイス応用においては、電極金属、担持基板、環境物質等々の異種物質との複合構造が本質となる。また、その動作、機能制御において、外部電界も広義異種物質として重要な役割を担うことが知られている。その際、グラフェン、ナノチューブ等のグラファイト系材料はその次元性、サイズから複合構造中において、ナノスケールの界面を形成し、界面における種々の物性変調が期待される。本プロジェクトでは、金属基板、絶縁体基板、外部電界が種々のグラファイト系材料の電子物性に及ぼす影響を量子論に立脚した計算科学の手法を用いた解明し、グラファイト系デバイス構築に於いて留意すべき構造的課題点、さらには複合構造による物性／機能制御方策の提示を行った。

#### (1) 金属基板がグラファイト系材料に及ぼす影響 (筑波大)

《実施方法・実施内容・成果に加え、成果の位置づけや類似研究との比較をまとめてください。》

グラファイト系物質のエレクトロニクスデバイス応用においては、既存のデバイス機構、構造体への埋め込みが一つの方法である。そのような既存の機構に乗っ取った応用に於いては、キャリアの移動経路やキャリア注入を行う電極として金属が存在し、グラファイト系物質はデバイス構造中において、金属との複合構造を形成している。すなわち、金属のグラファイト系材料の基礎物性に及ぼす影響をミクロスコピックレベルで解明する必要がある。ここでは、金属基板上に吸着された薄膜グラフェン、金属ピラー間に架橋されたグラフェンに着目し、金属によるグラフェン電子構造の変調を明らかにした。

金、銀、プラチナ、パラジウム表面上に吸着されたグラフェンでは、金属原子種に依存せずに金属直上のグラフェンでは、その特徴的な線形状態密度が消失することを示した(図1)。これは、何れの金属においても金属の表面状態が表面鉛直方向に分布しており、それらがグラフェンの $\pi$ 電子状態と強く混成するために起こる現象である。次にグラフェン薄膜を金属表面上に

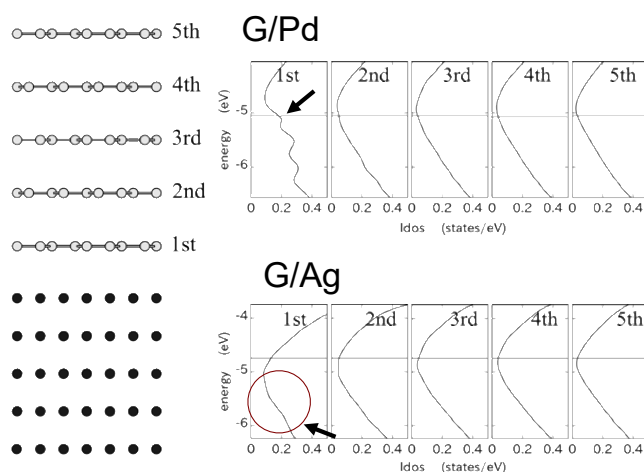


図 1: 金属基板上に吸着されたグラファイト薄膜と各層における局所状態密度。上が Pd、下が Ag 基板。

吸着させたモデル構造の下、金属の表面状態の鉛直方向への影響の距離依存性が、高々グラフェン2層で収束することを明らかにした。すなわち、金属上においては、2層程度のグラフェンをバッファ層として吸着させて、その上にさらにグラフェンを吸着すれば良いことを示した。

金属のグラフェン横方向に及ぼす影響として、金属ピラー間に架橋されたグラフェンの電子構造を明らかにした。フェルミレベル近傍のグラフェン上炭素原子における局所状態密度を金属ピラーからの距離に着目し、特にディラックポイントのバンドベンディングから金属

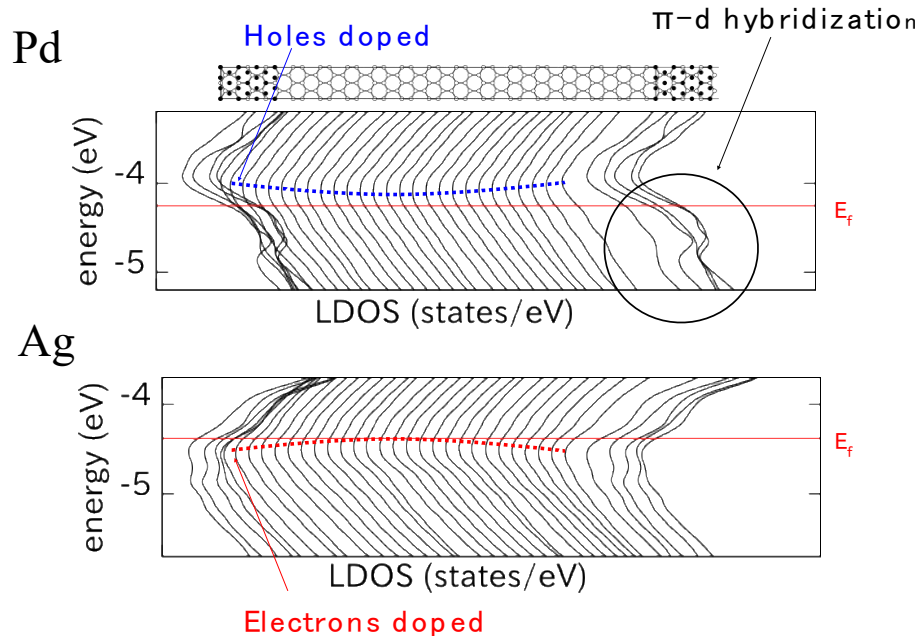


図2：2つの金属ピラー間に架橋されたグラフェンの各原子位置での局所状態密度。

の影響の横方向の距離依存性を明らかにした(図2)。バンドベンディングは金属の仕事関数に依存した振る舞いを示すことがあきらかになり、その横方向の影響の広がり10nm オーダー以上の広がりを持つ。このことから、グラフェンを用いた電極間架橋型のデバイス構造では、二つの電極間距離に応じてグラフェンのディラック点のシフトを考慮に入れたデバイス設計が必須となることを示した。

## (2)絶縁体基板によるグラフェン電子構造の変調(産総研、筑波大)

今日の半導体工学において広く用いられている、酸化シリコン基板上に吸着された、グラフェンの基礎物性の解明を行った。本研究では、酸化シリコン基板の構造モデルとして、 $\alpha$ クォーツの(0001)面を考え、その上にグラフェンシート、2層グラフェンが吸着された、構造のエネルギー論と電子状態の探索を行った。その結果、グラフェン吸着によるエネルギー利得は炭素原子一原子あたり凡そ数十 meV と、典型的な物理吸着系であることが明らかになった。一方、電子状態は相互作用が非常に弱い吸着系であるにもかかわらず、顕著な変調を受けることが明らかになった。すなわち、基板上においては、本来金属であるグラフェンは、基板の作り出す静電的なポテンシャル変調の影響を受けて、数十 meV のバンドギャップを有する半導体となる。すなわち、基板を構成する原子の作り出すクーロン引力がグラフェン上の炭素原子において一様でないことにより炭素原子のオンサイトエネルギーがサイトごとに異なることによる半導体化である(図3)。



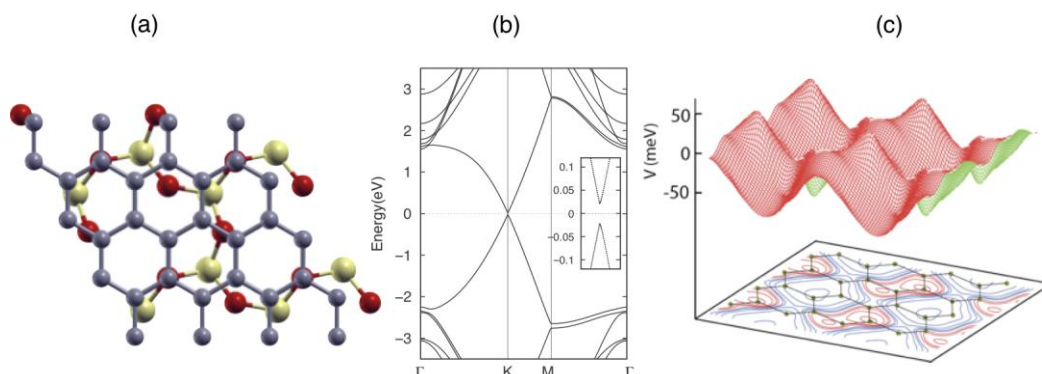


図3： $\alpha$ クォーツ(0001)面上に吸着されたグラフェンの(a)構造、(b)電子構造、(c)各原子位置での静電ポテンシャルの鳥瞰図。

酸化シリコンに加えて、high-k 物質の一つである酸化ハフニウムとグラフェンとの相互作用を明らかにした。立方晶を有する酸化ハフニウムの(111)面を用い、その上におけるグラフェンの基礎物性の解明を行った。計算の結果、グラフェンと酸化ハフニウムとの相互作用は、グラフェン-グラフェン、グラフェン-酸化シリコンのそれと比較して一桁大きく、他方、通常の共有結合系の相互作用に比べては1桁小さい事が明らかになった。すなわち、両者との相互作用は弱い相互作用と共有結合的相互作用の中間的なものである事が明らかになった。また、波動関数の解析から、この中間的な相互作用の起源は、グラフェンの $\pi$ 状態とハフニウムのd軌道のキャラクターを有する表面酸素原子のp軌道との間の強い軌道混成によるものであることが明らかになった(図4)。他方、この有意な基板との相互作用にも関わらず、グラフェンのバンド構造はそれほど大きく変調を受けず、酸化シリコン上のグラフェンと同程度のバンド構造の変調、すなわち、10meV程度の半導体化にとどまる事が明らかになった。しかし、有意な基板との軌道混成が存在する事から、グラフェン上の伝導電子は基板により大きく散乱を受け、当該基板上においては高い移動度を示さない事を予言した。

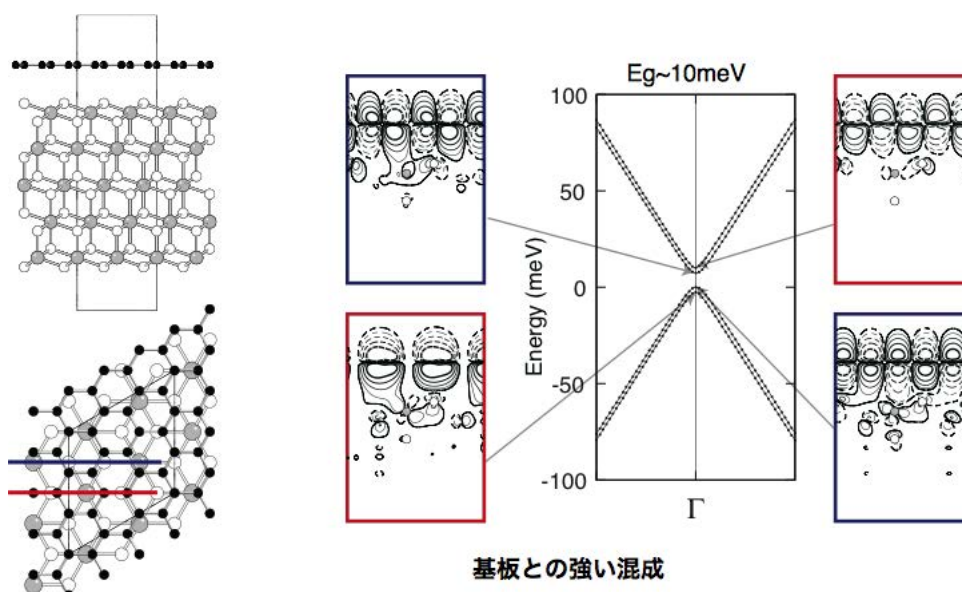


図4：HfO<sub>2</sub>表面に吸着されたグラフェンの構造とディラック点近傍のバンド構造と各状態の波動関数の等高線分布図。

これらの結果は、これまで全く顧みられていなかった、絶縁体基板、特にグラフェンを弱く束縛するような基板においても、グラフェンの電子構造に影響を及ぼすことを示したものであり、どのような状況下でもグラフェンの機能応用においては複合構造による物性変調を考慮する必要があることを世界に先駆けて示したものである。

### (3) 電界下におけるグラファイト系材料の電子物性(筑波大, 産総研)

電子デバイス中に組み込まれた種々のグラファイト系材料は、その機能制御において外部電界に晒されることが本質である。これまでに、ゲート電界に対応する、グラファイト系材料の原子ネットワークに対して鉛直方向に印加された電界下における物性の解明は多くなされてきている。ここでは、グラファイト系材料をチャンネル材として用いた際に、ゲート電界と

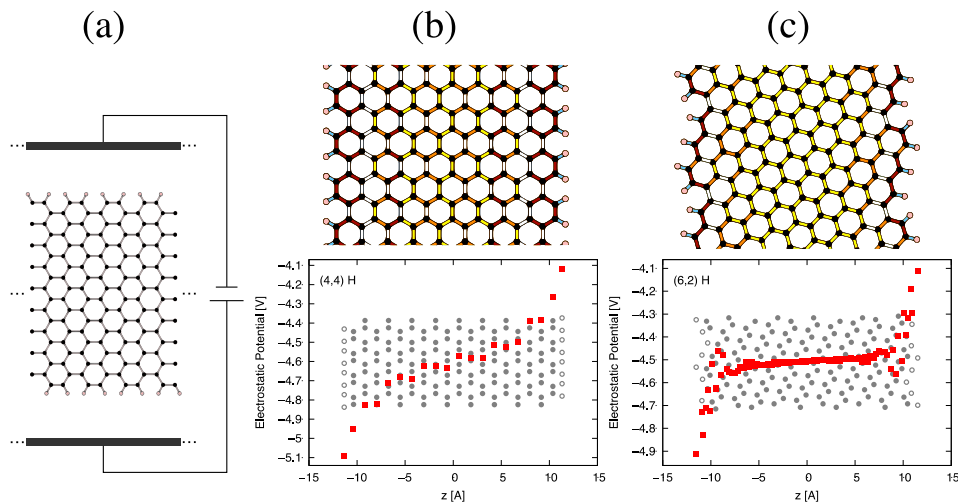


図5：(a) 平行電界下におけるグラフェンリボンの構造モデル。(b) アームチェア端、(c) 一般の端形状を有するリボンの構造と原子サイトでの静電ポテンシャル。赤い結合は短い結合、白い結合は長い結合をあらわす。

同様に重要になるソース-ドレイン電界に着目し、グラファイト系材料の横電界への応答を調べた。考えた構造モデルは、有限長のCNT、任意の端形状を有するグラフェンリボンを対向電極でサンドイッチしたものを考え、これらグラファイト系材料に電界を印加し、静電ポテンシャル(電子の感じるオンサイトエネルギー)の空間変調を明らかにした。その結果、グラファイト系材料の端がごく一部でもジグザグ型の端形状を有すると、その端近傍において過剰電界遮蔽に伴うポテンシャルの振動が発現することを明らかにした(図5)。すなわち、近接の原子サイト間において印加電界に対し逆電界が存在している。このため、非アームチェアの端形状を持つグラファイト系材料においては、電極からキャリアがオーミックに注入されたとしても、端近傍のポテンシャル振動により多重散乱を受け、良伝導特性を示さない可能性があることを示し、鉛直電界に加えて平行電界も十分に考慮に入れたデバイス設計を行う必要があることを示した。

次に、MOSFET 構造に組み込まれたグラフェン・グラフ

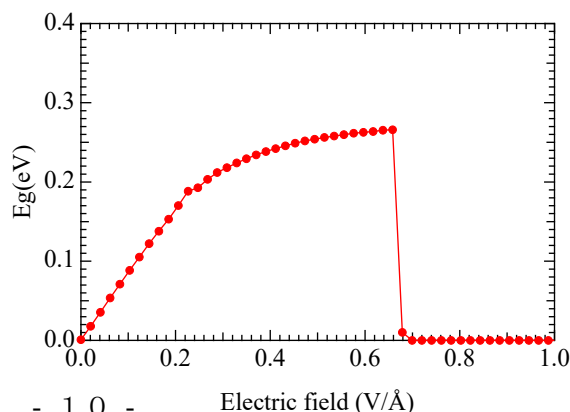


図6：2層グラフェンのバンドギャップの電界依存性。0.7V/Åでのギャップ消失は自由電子状態の低エネルギーシフトによるもの。

アイト薄膜の電子構造の鉛直電界依存性を明らかにした。ここでは、半導体化グラフェンの一つの方策として知られている、2層グラフェンに着目した。薄膜への鉛直電界印加により、2層グラフェンにバンドギャップが形成され半導体化することを示した(図6)。また、形成されるバンドギャップが0.3eVで飽和することを示した。また、更なる電界印加により、グラファイト系材料において特徴的な層間状態である自由電子状態へ電子が速やかに注入され、再金属化することが明らかになった。これは、電界印加により、フェルミレベルにおける伝導キャリアが線形バンドを有する高速なディラック電子から、自由電子へと変化させることが可能であることを示した。同時に、通常のAB積層構造に加えて、種々の層間配置を考慮して、電界の層間積層構造依存性を調べた。その結果、AB積層構造を有する2層グラフェン以外の積層構造を有する2層グラフェンの電子構造は、電界に対してロバストであることを示し、電界によるバンドギャップの形成はみられなかった。このことは、電界による2層グラフェンの半導体化にはAB積層グラフェンが必須であることを意味するものである。

種々の欠陥は、グラファイト系材料の合成時やデバイス制作時において本質的に導入され、一つの広義異種物質としてグラファイト系材料と複合構造体を形成しグラファイト系の基礎物性を大きく変調させることが知られている。例えば、原子空孔を有するカーボンナノチューブ、グラフェンは導入された点欠陥の配置に応じて半導体、金属と劇的な特性変調を示す。また、伝導特性においても、キャリアの完全透過から完全反射へと変化する。ここでは、単原子空孔を有するカーボンナノチューブへのゲート電極によるキャリア注入過程のゲート電圧依存性、欠陥位置依存性の理論的解釈を行った。我々の理論計算では、電子、正孔注入において、ゲート電圧の欠陥位置の電極に対する位置依存性が存在することを明らかになった(図7)。すなわちキャリア注入に対する障壁電圧のばらつきが存在することを示した。このばらつきは、電子、正孔注入に対して概ね0.2V程度である。このばらつきが、欠陥近傍において誘起される内部電界によるものである。また、この内部電界誘起により、欠陥近傍において電界の集中が起こることも明らかにした。これらの成果は、欠陥と電界という広義異種物質からなる高次複合構造が重要となることを意味するものである。また、グラファイト系材料のデバイス構造の物性予言、機能予測において非常に重要な要素である。

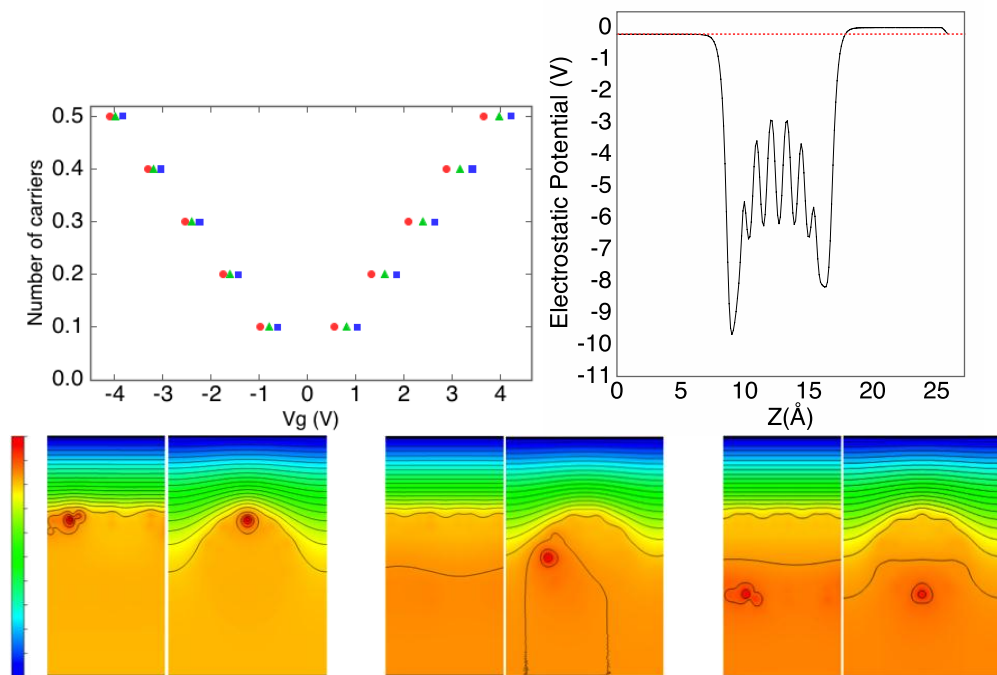


図7：(上左図) 欠陥を有するCNTの電荷蓄積におけるゲート電圧依存性。正側が電子注入、負側がホール注入に対応する。(上右図) 欠陥意より誘起されるCNT内部電界。(下図) 電荷注入時のCNT近傍の電界分布の欠陥位置依存性。

#### (4) グラフェンの層間相互作用による電子状態変調(産総研, 筑波大)

グラファイトの電子状態は構成単位であるグラフェン間の相互作用により、わずかに変調されていることが知られている。すなわち、グラファイトは面間の相互作用により通常の放物線的なバンド分散を有する。ここでは、自然界に10%程度存在する菱面体晶グラファイト(ABC積層構造グラファイト)の薄膜が基底状態として、その最外層グラフェン面においてフェリ磁性状態が実現されことを明らかにした(図8)。この磁性状態の起源はグラフェンナノリボンにおいて生じる特異な端局在状態であるエッジ状態と等価な状態が菱面体晶グラファイトの表面に於いて生じることによるものである。この結果は、これまでsp<sup>2</sup>炭素ネットワークへの端、欠陥の導入がグラファイトにおける磁性発現の必須条件と考えられていたが、完全なsp<sup>2</sup>ネットワークを有するグラファイトにおいても磁性状態が発現することを初めて理論的に予言した。さらに、その磁性状態を面鉛直方向の電場により制御し、新たな磁性状態への相転移が起こりえることを理論的に予言した。すなわち、電界下において菱面体相グラファイト薄膜はその負電極に面した表面において、強磁性的な磁気秩序を有する(図9)。これは、グラファイト薄膜の磁性材料応用の可能性を提案したものである。

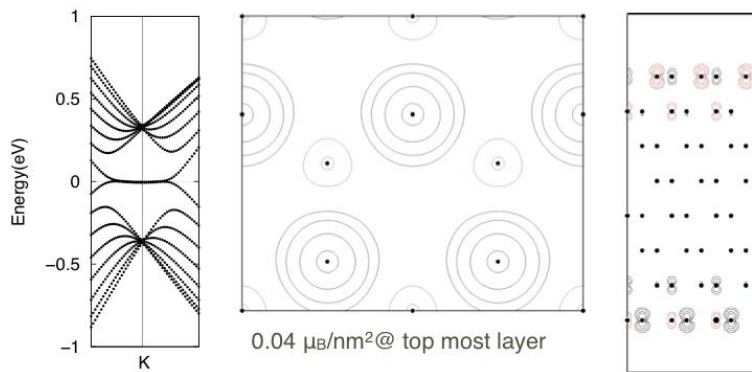


図8:ABC積層した8層グラフェンのバンド構造とスピン密度分布

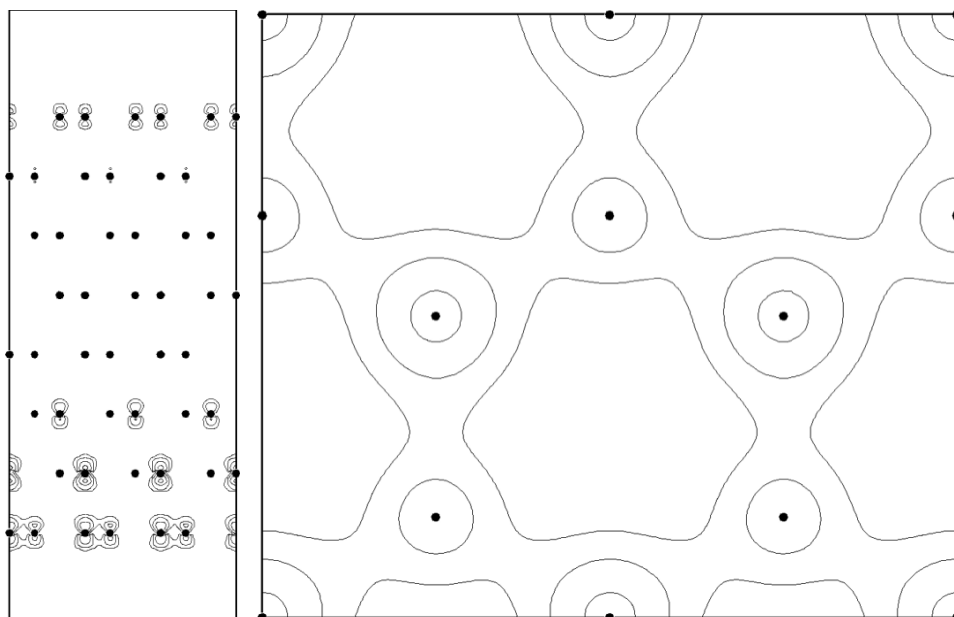


図9:電界印加時(2.6V/nm)の菱面体グラファイト薄膜のスピン密度分布。



一方、グラフェンから誘起される新たな構造として折り畳まれたグラフェンは自身との複合構造体として、新たなカテゴリーのグラフェン複合構造体とみなされる。この構造は、数層グラフェンの端において、各層の端間に新たな結合を形成することにより容易に実現される構造であり、グラフェンナノ構造を用いたデバイスにおいても必然的な構造である。我々は図10に示す折り畳まれたグラフェンに対する強結合近似計算から、この構造の有する電子物性が、もはや孤立グラフェンと大きく異なる新奇 $\pi$ 電子系となることを明らかにした。すなわち、自身の $\pi$ 電子との相互作用により、その面間の相対配向に応じて金属-半導体の転移を示し、また金属的な場合、そのフェルミレベル近傍の電子系は通常金属と同様の性質を有することが明らかになった。

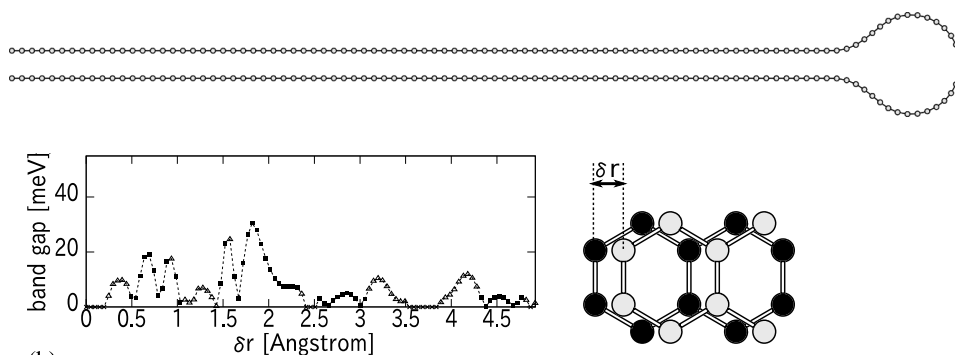


図10：折り畳まれたグラフェンの原子構造とリボンのバンドギャップの2層部の相対配置依存性。折り畳み部は直径が1.3nmのCNTに相当する。

### 3.2 グラファイト系材料の物性解明(青学大、筑波大)

グラフェン、グラファイトは共に非常に低いフェルミレベル状態密度を有するゼロギャップの半導体であり、半導体材料としての応用においては、有限のギャップを形成する必要がある。また、グラファイト系材料はその原子ネットワークに起因する特異な電子物性により、そのネットワーク形状デザインにより、出発物質と全く異なる特性、磁性等を有することが知られている。そこで、我々は、ネットワークポロジードesignによる、新奇物性を有するグラファイト系物質の物質探索と、半導体化したグラファイト構造の予言、構造による物性制御法の方策の提示を行った。本プロジェクトでは、任意の形状を有するグラフェン巨大片の物性予言、トポロジカルな欠陥導入による新奇物性を有する $\pi$ ネットワークポロジードesign、エッジラフネスを有するグラフェンナノリボンの伝導特性の解明を明らかにした。

#### (1)トポロジー制御によるグラファイト電子構造制御(青学大)

トポロジー制御により実現する半導体化グラフェンの候補として、①化学合成例の多い fully benzenoid 分子、ならびに②金属表面に形成されるグラフェン超格子への長周期的な水素付加の2つに焦点を当てた。

①としてはヘキサベンゾコロン類縁分子が知られ、系のサイズに依存したバンドギャップを示すが、我々は、対称性の低い分子やポリマーの構造と電子状態を網羅的に調べるプログラムを整備し、種々の系に対して適用した。さらに、そこに不完全な環化

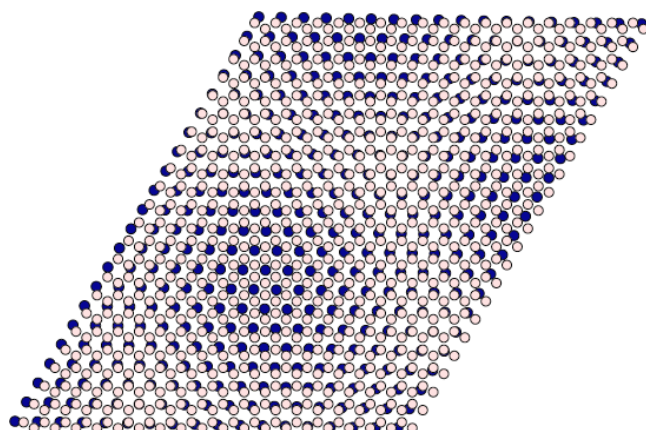


図11：三角格子上のグラフェン超格子の例

などの欠陥が入った構造を発生させ、欠陥を含む fully benzenoid 分子/ポリマーの電子状態を調べた。②では、基板として三角格子を仮定し、様々な格子長の基板とグラフェンが作る超格子を探索するプログラムを開発した。金属原子との相互作用によって局所的に  $sp^3$  構造が実現した部分への水素付加により、 $\pi$  電子ネットワークのトポロジーが制御される。これにより、Ir(111)上のグラフェン超格子のような、局所的かつ長周期的な水素付加によってギャップを開く複合構造の候補を探索した(図11)。その結果、基板原子種に応じて  $\pi$  電子系の変調が実現され電子構造の変調が確認された。しかしながら原子レベルでの詳細電子構造制御は現実的に不可能であることを明らかにした。

## (2) グラフェンへの5員環と7員環からなる折れ線型欠陥の導入(青学大)

CVD グラフェンに見られる粒界のモデルとして、5員環と7員環が交互に並んだ線状欠陥をベースとして、それが折れ線型になったトポジカルな欠陥を含むグラフェンネットワークを提案した(図12)。具体的には、欠陥による  $\pi$  電子状態の変調と、端による  $\pi$  電子状態の変調とを区別する目的で、2本の折れ線型欠陥を導入したチューブ構造を網羅的に発生させ、その  $\pi$  電子状態を調べた。その結果、フェルミ準位近傍の電子状態は、折れ線型欠陥のトポジカルな構造によって理解できることが明らかになった。また、さらに重要な知見として、折れ線のピッチが

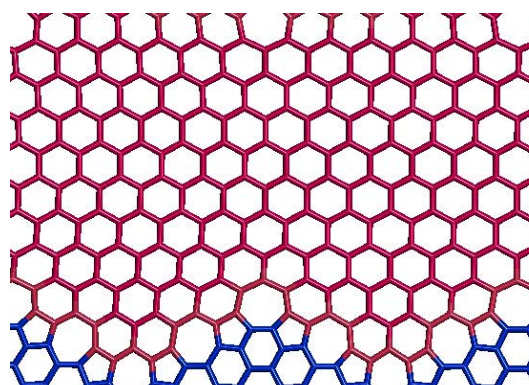


図12：グラフェン折れ線欠陥構造の例

極端に短い場合以外は、粒界近傍に局在状態が必ず現れ、これが状態密度の鋭いピークとなってフェルミ準位近傍に現れることが明らかになった。このことは、実際の CVD グラフェンに観察される粒界近傍に、ほぼ確実に局在状態が生じることを示唆しており、デバイスとしてのグラフェンにおいては粒界の制御が必須であることを強く示唆するものである。

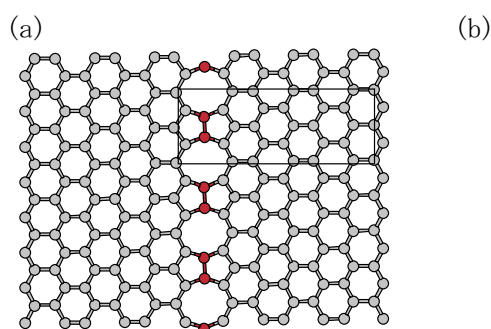


図13：線状のトポジカル欠陥を有するグラフェンの(a)構造と(b)欠陥近傍に局在する  $\pi$  電子雲

我々はこのようなグレインバウンダリーの最も理想化された構造モデルとして、グラフェンに直線状にトポジカル欠陥が挿入された系の電子構造計算を行い、そのようなトポジカル欠陥が炭素間の共有結合を分断することなく、ある特定の  $\pi$  電子状態を有効的に分断することを明らかにした。特に、ディラック点近傍の電子構造に着目した所、 $\pi$  と  $\pi^*$  の線形バンドのうち、 $\pi^*$  状態が、図13に示すトポジカルな欠陥、すなわち5員環サイトを挟んで局在し、さらにフェルミレベル直上に平坦なバンドを形成し高い状態密度を与えること

を明らかにした。同時に、この状態の局在性は電子の持つ波数に強く依存し、 $\Gamma$ 点においては完全局在、それ以外の波数では広がった振る舞いを有することが明らかになった。この特徴は、ジグザグの端を有するグラフェンに発現するエッジ状態と等価なものであり、端を形成することなく、ジグザグ端を有するグラフェンリボンと等価な電子系の構築が可能であることを示した。このことから、この平坦バンドに電子を注入することにより、このようなトポロジカル欠陥を有するグラフェンは磁気的秩序を有することが期待され、実際、電子状態計算から僅かな電荷注入により強磁性的な磁気秩序が発現することが示された。すなわち、トポロジカルな欠陥は、ある特定の  $\pi$  電子に対して有効的な端として振る舞い、欠陥近傍に特異な局在状態を誘起し、グラフェンの持つ高い伝導性を破壊する一方で、磁性発現の鍵となることを予言した。

John J. Appl. Phys. 53, 035103 (2014)

(3) グラフェンナリボンの巨大熱起電力 (筑波大) **5**  
 廃熱エネルギーを高効率に再資源化する熱電材料として低次元ナノ材料に注目が集まっている。しかしそれらの多くが希少で毒性の強い重金属を含む化合物半導体であるため、環境汚染や人体への影響などの問題を抱えており、これらに代わるユビキタス元素からなる環境調和型熱電材料の創製が求められている。本研究では、炭素のみからなるユビキタス元素ナノ材料としてグラフェンナリボン (GNR) に注目し、リボン幅や端の形状などが及ぼす熱起電力への影響を系統的に調べた。ジグザグ型エッジ GNR (ZGNR) とアームチェア型エッジ GNR (AGNR) の熱起電力は、そのエッジ構造の違いに起因して、本質的に異なる化学ポテンシャル依存性を示すことが明らかとなった。特に顕著な違いとしては、フェルミ面近傍での熱起電力の符号が ZGNR と AGNR とで反対であることである。また、ZGNR と比べて、同程度の幅をもつ半導体 AGNR の熱起電力の方が桁違いに大きく、数 mV/K のオーダーであることが明らかとなった。

(4) トポロジカルな欠陥を有するグラフェンの物性解明 (青学大、筑波大)  
 グラフェンは本質的に、その6員環ネットワークに非6員環、すなわちトポロジカルな欠陥を含むことが知られている。これらのトポロジカルな欠陥はフェルミレベル近傍の電子物性を大きく変調させることを我々はこれまでに示してきた。ここで、我々は、sp<sup>2</sup> 炭素原子が多様な多角形炭化水素分子を形成することに着目し、トポロジカル欠陥を主体とする sp<sup>2</sup> 炭素シートの物質設計を行った。本プロジェクトでは、4員環 (シクロブタジエン) と8員環からなるネットワーク、5員環と12員環から構築される2次元シートの安定構造と電子物性を明らかにした。

4員環+8員環ネットワークは、図14に示すように、シクロブタジエンを重合化させた2次元炭素同素体であり、90° の C-C 結合角を有する構造となっている。そのため、エネルギー的にはグラフェンよりも炭素原子1個あたり 0.6eV 程度不安定であり、全エネルギー的には比較的合成の難しい化合物である。一方で、強固な C-C 結合により、一度合成すれば、比較的高い温度かに於いても安定であることが我々の第一原理 MD 計算から明らかになった。

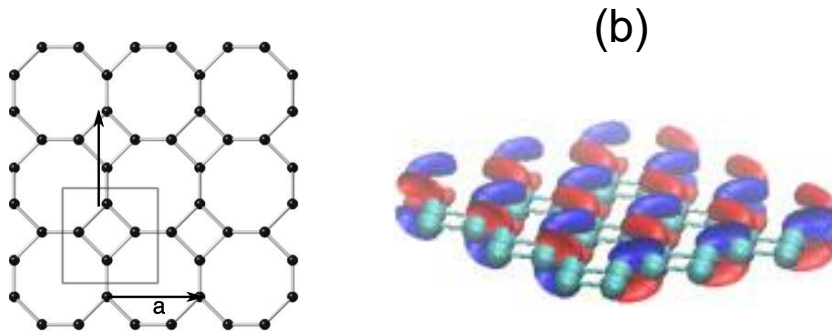


図 1 4 : 4-8 員環 sp<sup>2</sup> 炭素ネットワークの構造とフェルミレベルの電子分布

Fig. 3.5 (Color online) Electronic structure of the two-polymerized C<sub>4</sub> with 1 × 1 lateral unit cells. Energy is measured relative to the Fermi level. The squared wave function of (b) the conduction band is shown. (c) the NFE state is shown.

計算上は 3000K の温度で数十ピコ秒のシミュレーション時間では構造の破壊を見ることはなかった。また、この系は、フェルミレベルをコサインバンドの変曲点が横切っており、それに起因する線形分散を有する状態がシート全体に広がっており、興味深い伝導特性が期待される系であることを示した。

5員環ネットワークにおいては、3つの5員環が一つの頂点を共有したアセペンタレン分子構造に着目し、この分子を蜂の巣格子状に並べることにより、5員環を主とする種々の2次元  $sp^2$  炭素同素体の構築が可能であることを明らかにした。また、それらのエネルギー安定性はフラーレン分子のそれとほぼ同程度であることから、比較的簡単に実現可能であることを予言し、熱的にも極めて高い安定性を有する系であることを示した。次に、これらの構造の電子構造の解明をおこなったところ、5員環のみから構築させるネットワーク物質に於いては、ネットワーク中に6員環を全く含まないにもかかわらず、フェルミレベル近傍において1対の線形分散バンドが発現することを示した。さらにフェルミレベルに平坦バンドが発現し、強磁性的な磁気秩序が発現することも示した(図15)。すなわち、ディラック電子系と強磁性的磁気秩序が共存する興味深い電子構造を有する系であり、この構造を用いた磁性と伝導特性を併せ持つ新奇なデバイスの材料となることを示した。

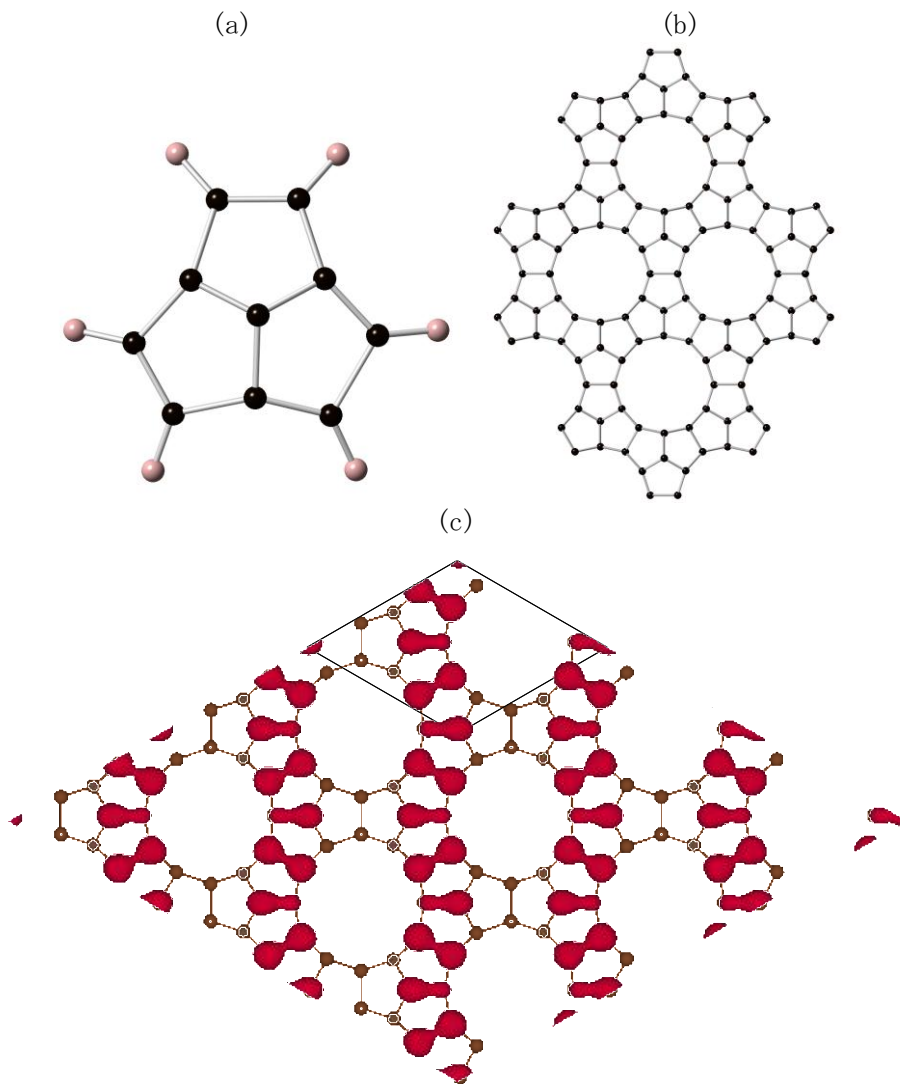


図 15 : (a)アセペンタレン分子。5員環  $sp^2$  ネットワークの(b)最適化構造と(c)分極スピン密度分布。



### (5) 長方形グラフェンの基礎物性の解明(青学大)

前年度に引き続き、トップダウン的手法で切り出したグラフェンのモデルとして、網羅的に発生させた長方形グラフェンの電子状態を調べた。まず基本的な知見として、グラフェンを正方形に切り出す場合には、高々 $10 \times 10$  nm 程度の大きさにおいて、切り出し角(正方形の一边がグラフェンの並進方向に対してなす角) $\theta$ によらずエネルギーギャップがゼロになることを確認した。すなわち、基板その他の影響なしに純粋な $\pi$ 電子状態を考えると、これより大きな正方形の断片にギャップを持たせることはできない。断片の面積を変えずに短辺の長さ(S)に対する長辺の長さ(L)の比(L/S)を大きくすると、切り出し角  $0^\circ < \theta < 60^\circ$  に対して可能な構造が増える。グラフェンの armchair 方向を  $0^\circ$  とすると、L/S の値が特に大きい(L/S $\sim 100$ )場合は、長辺が armchair 方向に近くなるように切り出した構造において、数十～数百 meV のエネルギーギャップを生じる。しかし、L/S の値が中程度(L/S $\sim 10$ )の場合は、同程度の $\theta$ であってもギャップが小さくなる。また、有限のギャップを持つと考えられる $\theta$ であっても実際にはギャップを持たない構造が多く、その原因は、 $\theta$ の僅かな差異によって断片に含まれる炭素数が奇数になることであるとわかった。以上より、純粋な $\pi$ 電子状態としてナノスケールの長方形グラフェンにエネルギーギャップを持たせるためには、L/S と $\theta$ を精密に制御する必要があることが示された(図16)。

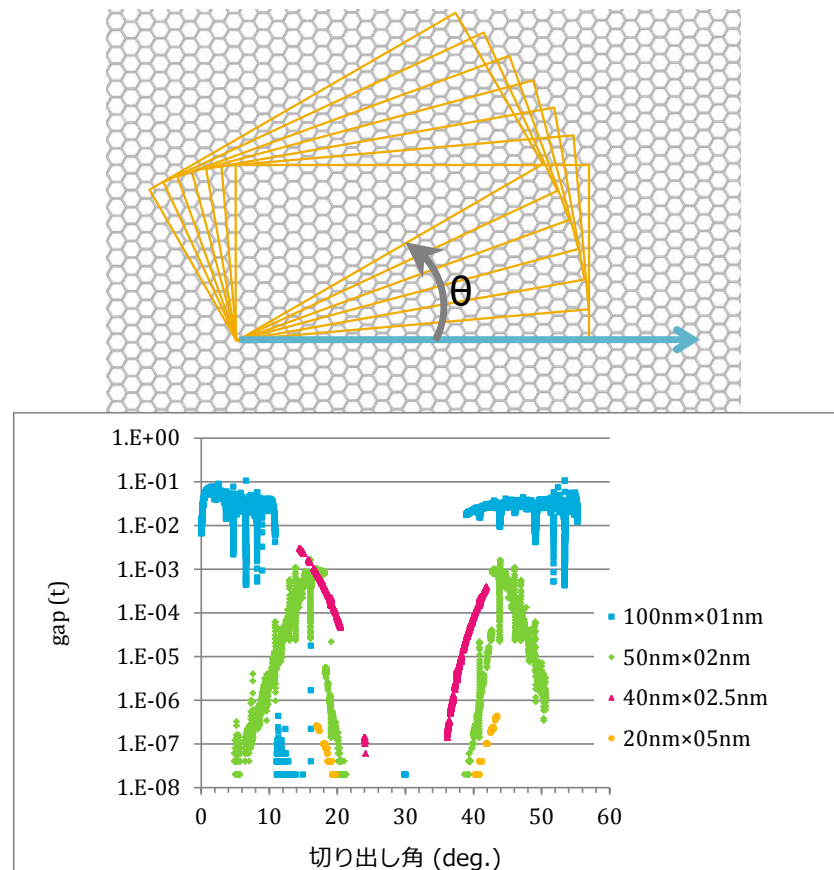


図 16 : グラフェン断片の切出しの例と、切出された断片のバンドギャップの形状依存性。

### (6) グラフェンリボンに於ける伝導特性の端形状依存性(筑波大)

グラフェンにバンドギャップを形成する手段としてナノリボン化がある。現状では、原子レベルでグラフェンナノリボン(GNR)のエッジ構造を制御することは困難であり、エッジの構造乱れ(エッジラフネス)が電気伝導特性に及ぼす影響を明らかにすることが不可欠である。本

研究では、エッジラフネスのある GNR のコンダクタンスとそのばらつき(コンダクタンスゆらぎ)の数値計算を行い、GNR の電気伝導特性が、GNR の長さ(ゲート長)とリボン幅に応じて、バルスティック伝導領域・拡散伝導領域・局在領域に分類されることを示した(図17)。また、FET チャンネルに利用可能な GNR の長さ(ゲート長)とリボン幅を明らかにした。例えば、リボン幅 2nm の GNR を用いて、チャンネル長 10nm の FET を設計するためには、エッジの欠損率をおおよそ 10%未満に抑える必要があることを示した。グラフェンリボンの伝導に関しては、これまで清浄な端形状を有する者に対してのみその知見が与えられてきている。それに対して、我々はより現実的な構造の下でのシミュレーションを実施し、グラフェンリボンをデバイス応用時に目指すべき端欠損率を具体的に示した。

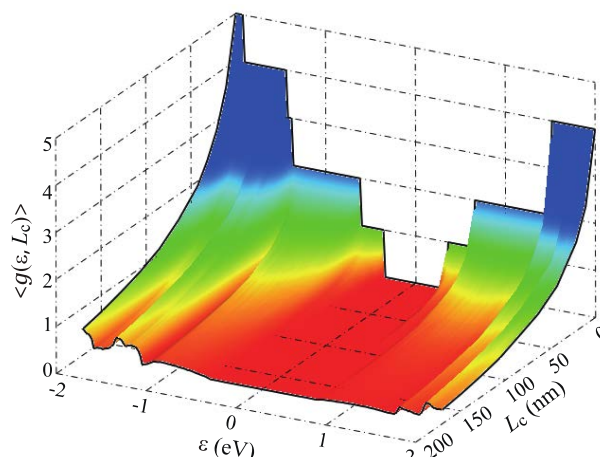


図 17 : コンダクタンス  $g$  の GNR 長さ依存性 ( $\epsilon$ : エネルギー、 $L_c$ : エッジ欠損領域の長さ)

### (7)2層グラフェンのバンドギャップエンジニアリング(産総研)

グラフェンは高いキャリア移動度が期待されることから、半導体デバイスへの応用が期待されている。しかしながら、電子構造的にはギャップを有しておらずオフ状態を実現することができない。従って、半導体デバイス応用においてはギャップ形成が必須となる。その方策の一つとして、2層グラフェンへの電界印加がある。これは、2層のグラフェンに鉛直電界を印加して有限のギャップを作成するというものである。しかしながらこの方法ではオフ状態を維持するのに電力

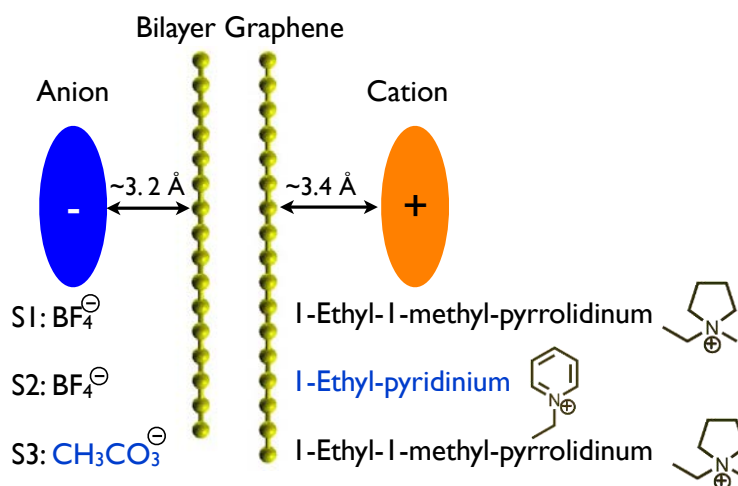


図 18 : 半導体化 2 層グラフェンの構造。

を必要とする点、電極とのコンタクトによる物性変調があり多くの問題を有している。我々は、この問題を解する方法として、イオン性分子を2層グラフェンの表面に塗布することにより、簡便に半導体化グラフェンが実現されることを示した(図18)。すなわち、グラフェンの上面

にアニオン型のイオン性分子、下面にカチオン型のイオン性分子を塗布することにより、グラフェンの上下面に有効的にポテンシャル勾配を導入し、約 0.5eV のバンドギャップを有する半導体化グラフェンを実現する。また、アニオン分子とカチオン分子の組み合わせの制御により、真性半導体、n 型半導体、p 型半導体グラフェンの実現が可能であり、グラフェンのみで pn 接合を構築することが可能であることを示した (図 19)。

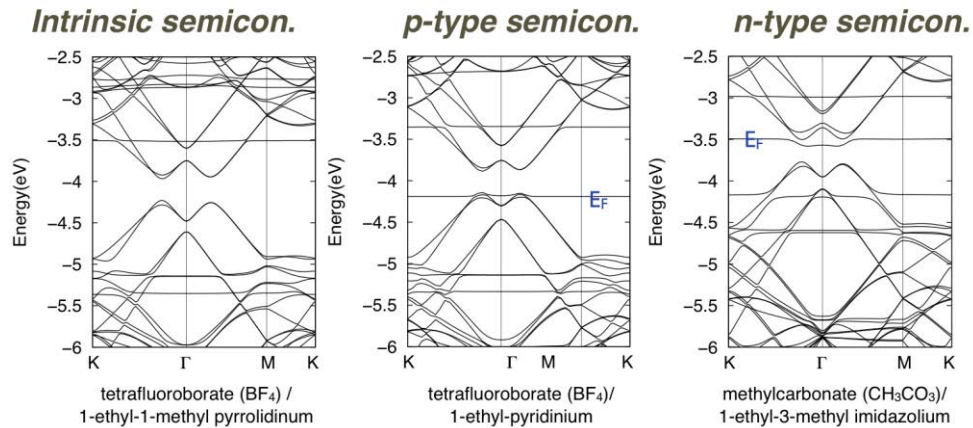


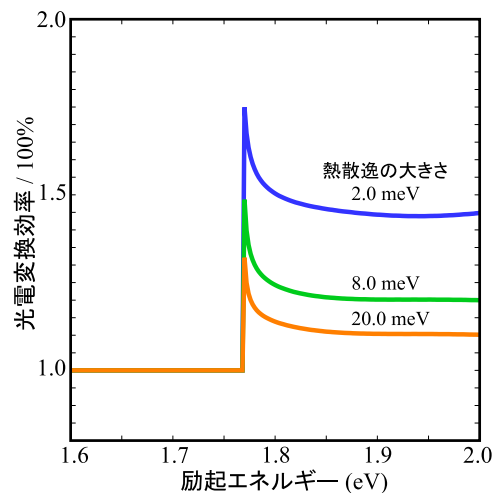
図 19 : イオン性分子種による半導体化グラフェンの電子構造。左から真性半導体、p 型、n 型の半導体電子構造となっている。各図の下は組み合わせたアニオン、カチオンイオン。

### 3.3 グラファイト系材料を用いたデバイスの設計指針提示 (筑波大)

グラファイト系物質はその次元性、形状、サイズの観点から広い分野における材料応用の可能性が指摘されている。しかし、そのデバイスへの組み込み、応用においては、上記に述べたような、種々の異種物質との複合構造形成において本質となる異種物質との界面における基礎物性の解明とそれを考慮に入れたデバイスの設計が必須となる。すなわち、界面がグラファイト系材料の特徴的な各種物性を破壊する方向で作用する。このことから、グラファイト系材料のデバイス応用としては、1) 複合構造形成による物性変調に対してロバストな特性を用いたデバイス応用、2) 複合構造形成による物性変調を積極的に用いたデバイス応用の2つの戦略のもと実施する必要がある。本プロジェクトにおいては、この2点を有機的に結合させた新奇応用の可能性について、デバイス設計の指針の提示を行った。

#### (1) カーボンナノチューブやグラフェンナノリボンにおける多重励起子生成の解明とその機構を用いた高効率光電変換素子構造の設計指針の提示 (筑波大)

カーボンナノチューブ (CNT) やグラフェンナノリボン (GNR) では、その低次元性故にクーロン相互作用の効果が強くなり、光励起状態は室温でも安定な励起子となる。さらに、励起子同士においてもクーロン相互作用が強く働くため、励起子間の相関が重要になる。本プロジェクトでは、ベーテサルピータ方程式を強束縛近似で解き、得られた励起子状態を用いて多重励起子生成の微視的機構の解明を試みた。ここで、多重励起子生成とは、励起子間クーロン相互作用により、単一の光子から複数個の励起子が生成されることである。計算の結果、(1) 励起子間の強いクーロン相互作用と (2) 励起子分散関係の 1 次元 van Hove 特異性により、多重励起子生成が生じることを明らかにし



- 19 - 図 20 : カーボンナノチューブの光電変換効率

た。さらに、現実的なパラメータのもと多重励起子生成による光電変換効率を見積もると、180%にも達することがわかった(図20)。この結果は、CNTやGNRなどの低次元ナノ炭素物質が光電変換デバイス材料として優れた特性を有する事を示している。次に、実際に発電で重要になるキャリア(光電流)の生成効率に関して、量子論に立脚したミクロスコピックな理論計算の手法を用いて明らかにした。ここでは、ナノスケール物質であるカーボンナノチューブにおいて、様々な緩和プロセスを考慮した光電流生成シミュレーションを行うことにより、キャリア生成効率を調べた。その結果、緩和プロセスが存在していても、キャリア生成効率が160%を超えることがわかった(図21)。さらに、我々はグラフェンナノリボンに対して同様の計算を行い、CNTとほぼ同じ光電変換効率、光電流生成効率が実現されることを明らかにした。これらの結果を統合すると、しかるべきデバイス構造を構築することにより、グラフェンナノリボン、CNT集合体は高効率光電変換デバイスの素子として応用が可能であることを示唆している。

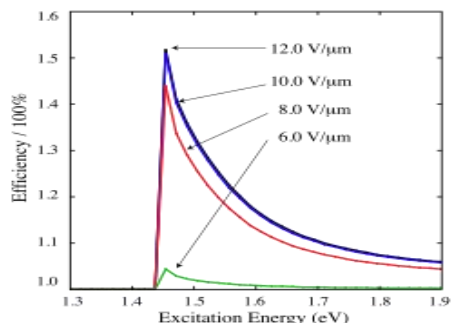


図21：カーボンナノチューブにおける光電流生成効率。

更にCNTとグラフェンリボンの上述の特性、すなわち高効率光電変換、高効率光電流生成を光電変換材料への応用を目指したデバイス構造の検討を行った。ここでは、可視光の全波長領域を効率的に吸収する光電変換素子の設計指針の開発を行った(図22)。考えたデバイス構造は、光電変換部位として冊状にアラインした種々の幅を有するグラフェンリボンを考えた。次に電子-正孔乖離点としてリボン結合領域に形成された種々の欠陥を用いる。これはグラフェン欠陥近傍において比較的強い電界(0.1 V/nm)が形成されることを本プロジェクトで明らかにしており、その電界を光電流生成に用いる。最後に冊両端にアニオン、カチオン分子を塗布することにより、両端にp型、n型グラフェン領域を構築し、光電流の取り出しを行う。このデバイス構造はグラフェンのみで構築されているため、素子内での異種物質の存在はなく、その影響を被ることなくグラファイト系材料の特性を生かすことが可能である。また、グラフェンの高い透過性から、グラフェン冊構造の積層構造構築によるタンデム化によるさらなる高効率化が可能である。また、フレキシブルかつ透明な光電変換素子としての応用可能性を示し、広い分野において応用が可能なデバイス構造設計の指針を提示した。

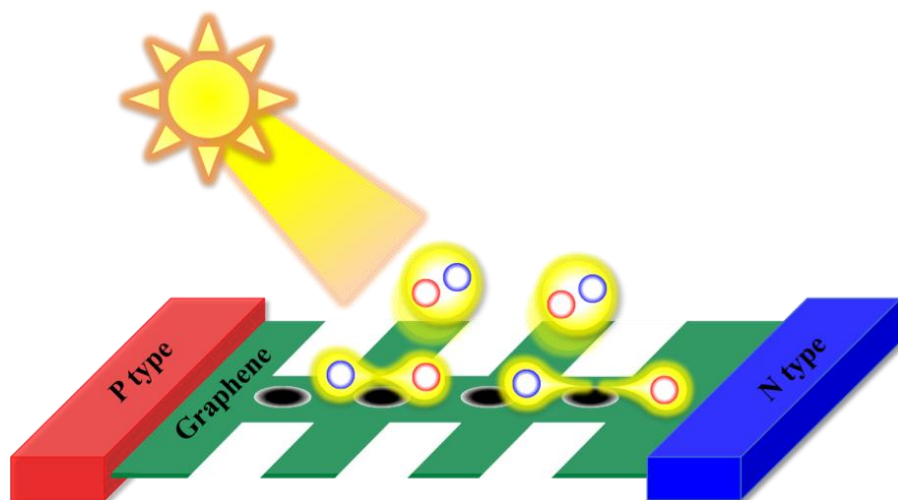


図22：グラフェン高効率光電変換デバイス構造。緑の領域がグラフェン冊領域で種々の幅のグラフェンリボンからなり励起子生成部位、黒丸は欠陥部位であり励起子乖離部位となる。



(2) グラフェン-ダイヤモンド複合構造体を用いた高い熱拡散能を有する伝導チャンネル(筑波大)

半導体デバイスにおいては、半導体素子間を結合する高い電流密度、電子伝導特性、熱特性を有する材料の開発が望まれている。特に配線で生成される熱の効果的な放出を念頭においた配線材料の開発が期待されている。ここでは、導体素子間を結合する配線材料に対して、銅配線を代替する高い電子移動と電流密度を実現する材料の候補として、グラフェンナリボンの適用を提示した。その際、高電流密度とデバイスの高集積化に伴う配線材料における発熱問題を回避する構造として、グラフェンナリボンの両端がダイヤモンド表面に結合された、sp<sup>2</sup> と sp<sup>3</sup> のハイブリッド炭素系を考えた(図23)。このような構造を構築することにより、グラフェン領域において、グラフェンが本来有する優れた電子輸送特性を保ち、同時にグラフェンにおいて発生する熱を効率的にダイヤモンド領域に逃がすことができることを見いだした。これは、グラフェン

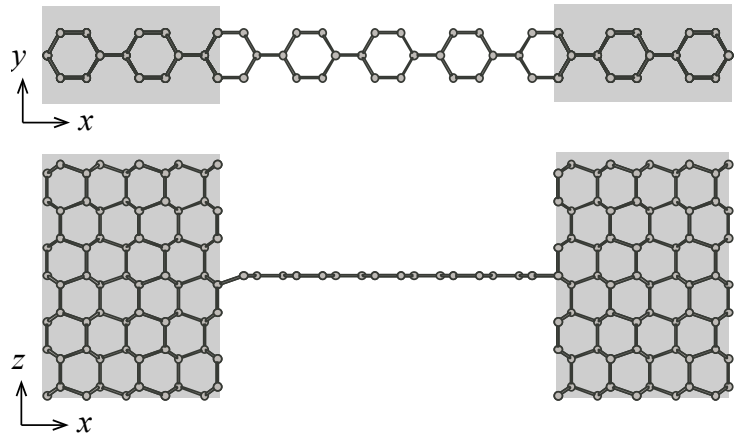


図23 グラフェン-ダイヤモンド複合構造。網掛け領域がダイヤモンドに対応する。

とダイヤモンドが共に同種原子であり、その違いが結合形態、すなわち配位数の違いのみであることに起因する物である。実際、界面における熱コンダクタンスは室温で 7GW/m<sup>2</sup>K となり、炭素-シリコン界面の値を凌駕するものである(図24)。このことから、ダイヤモンドはグラフェン配線に対し高効率なヒートシンクの役割を果たし、炭素複合構造による新たな機能性配線材料としての可能性を明らかにし、銅配線を代替する可能性のある配線材料と構造の提案を行った。

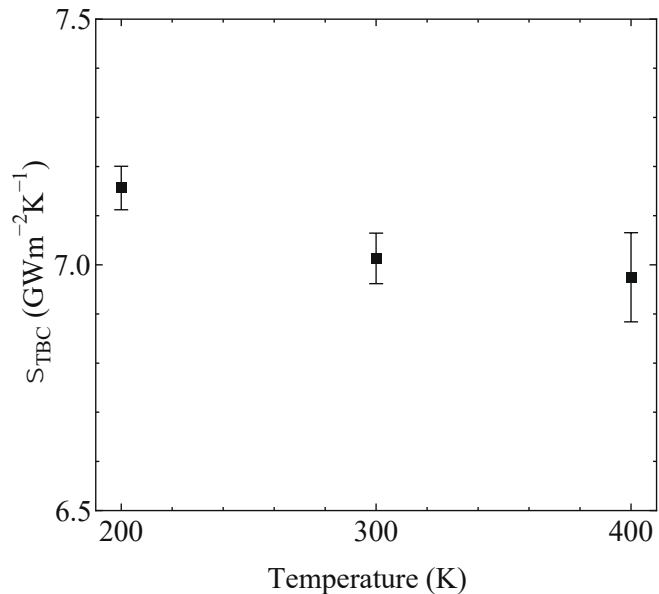


図24 : グラフェン-ダイヤモンド界面における界

とダイヤモンドが共に同種原子であり、その違いが結合形態、すなわち配位数の違いのみであることに起因する物である。実際、界面における熱コンダクタンスは室温で 7GW/m<sup>2</sup>K となり、炭素-シリコン界面の値を凌駕するものである(図24)。このことから、ダイヤモンドはグラフェン配線に対し高効率なヒートシンクの役割を果たし、炭素複合構造による新たな機能性配線材料としての可能性を明らかにし、銅配線を代替する可能性のある配線材料と構造の提案を行った。

## § 4 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内(和文)誌 0件、国際(欧文)誌 111件)

1. Takahiro Kondo, Yosuke Iwasaki, Yujiro Honma, Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, Junji Nakamura, "Formation of non-bonding  $\pi$  electronic states of graphite due to Pt-C hybridization" *Physical Review B* 80, 233408 (2009) DOI: 10.1103/PhysRevB.80.233408.
2. Katsunori Wakabayashi, Ryutaro Tomita, Yuhei Natsume, Susumu Okada, "Edge states and flat bands of graphene nanoribbons with edge modification", *Journal of Physical Society of Japan*, 79, 034706 (2010). DOI: 10.1143/JPSJ.79.034706
3. Minoru Otani, Mikito Koshino, Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, "Intrinsic Magnetic Moment on (0001) Surfaces of Rhombohedral Graphite" *Physical Review B* 81, 161403(R) (2010) DOI: 10.1103/PhysRevB.81.161403.
4. Takeshi Nakanishi, Tsuneya Ando, "Conductance images between two STM probes in graphene", *Physica E*, Vol. 42 No. 4 726-728 (2010) DOI:10.1016/j.physe.2009.10.041.
5. Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, "Electronic Structure Modulation of Folded Graphene", *Journal of Physical Society of Japan*, 79, 033702 (2010) DOI: 10.1143/JPSJ.79.033702.
6. Susumu Okada, "Semiconducting Electronic Structure of Graphene Adsorbed on Insulating Substrate: Fragility of the Graphene Linear Dispersion Band" *Japanese Journal of Applied Physics*, 49, 020204 (2010) DOI:10.1143/JJAP49.020204.
7. Kazuhiro Yanagi, Yasumitsu Miyata, Zheng Liu, Kazu Suenaga, Susumu Okada, Hiromichi Kataura, "Influence of metallic or semiconducting nanotube walls on encapsulated  $\pi$ -conjugated molecules", *Journal of Physical Chemistry C* 114, pp. 2524-2530 (2010) DOI:10.1021/jp910568k.
8. Susumu Okada, Minoru Otani, "Stability and electronic structure of potassium-intercalated hexagonal boron nitride from density functional calculations", *Physical Review B* Vol. 81, art. no. 233401 (2010).[DOI: 10.1103/PhysRevB.81.233401]
9. Minoru Otani, Yoshiteru Takagi, Mikito Koshino, Susumu Okada, "Phase Control on Magnetic State of Graphite Thin Films by Electric Field", *Applied Physics Letters*, Vol. 96, art. no. 242504 (2010).[ DOI: 10.1063/1.3455069]
10. Susumu Okada, "Energetics of ultimate silicon nanowire confined in nanospace", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 49, art. no. 065001 (2010).[ DOI: 10.1143/JJAP.49.065001]
11. Minoru Otani, Susumu Okada, "Field-Induced Free Electron Carriers on Graphite", *Journal of Physical Society of Japan*, Vol. 79, art. no. 073701 (2010).[ DOI: 10.1143/JPSJ.79.073701]
12. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, Sumio Iijima, "Intermolecular Interaction between Single-Wall Carbon Nanotubes and Encapsulated C60 Probed by Resonance Raman Spectroscopy", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 12, pp. 8118 -- 8122 (2010).[ DOI: 10.1039/C000102C, Paper]
13. Tasuku Chiba, Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Na-Doped C60 Polymers", *Journal of Physical Society of Japan*. Vol. 79, art. no. 084702 (2010). [DOI: 10.1143/JPSJ.79.084702]
14. Yoshifumi Izu, Junichiro Shiomi, Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, Shigeo Maruyama, "Growth mechanism of single-walled carbon nanotube from catalytic reaction inside carbon nanotube template", *ACS NANO*, Vol. 4, 4769 -- 4775 (2010).[ DOI: 10.1021/nn100461r]
15. Shingo Okubo, Toshiya Okazaki, Kaori Hirose, Kazu Suenaga, Susumu Okada, Shunji Bandow, Sumio Iijima, "Electronic Structures of Single-Wall Carbon Nanotubes Encapsulating Ellipsoidal C70", *Journal of American Chemical Society*, Vol. 132, pp. 15252-15258 (2010).[DOI: 10.1021/ja105654g]

16. Hisao Miyazaki, Kazuhito Tsukagoshi, Akinobu Kanda, Minoru Otani, Susumu Okada, "Influence of Disorder on Conductance in Bilayer Graphene under Perpendicular Electric Field", *Nano Letters*, Vol. 10, pp. 3888–3892 (2010).[DOI: 10.1021/nl1015365]
17. Satoru Konabe, Nobuhito Onoda, Kazuyuki Watanabe, "Auger Ionization in Armchair-Edged Graphene Nanoribbons", *Physical Review B* Vol. 82, 073402 (2010)[ DOI: 10.1103/PhysRevB.82.073402]
18. K. Nagatsu, S. Chiashi, S. Konabe, Y. Homma, "Brightening of Triplet Dark Exciton by Atomic Hydrogen Adsorption in Single-Walled Carbon Nanotubes Observed by Photoluminescence Spectroscopy", *Physical Review Letters* Vol. 105, 157403 (2010)[ DOI:10.1103/PhysRevLett.105.157403]
19. Derek Ashley Thomas, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, "Effect of Boundary Reflectivity on Thermal Transport Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes Examined by Molecular Dynamics Simulations", *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* Vol. 8, 313 (2010) [DOI: 10.1380/ejsnt.2010.313]
20. Asako Terasawa, Keiji Tobimatsu, Tomofumi Tada, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, "Effects of Resonant Scattering by Probe Contacts on Nanoscale Four-Probe Resistance Measurements", *New Journal of Physics*, Vol. 12, 083017 (2010) [DOI: 10.1088/1367-2630/12/8/083017]
21. Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe, "A Numerical Approach to Transient Currents in a Quantum Dot Connected to a Single Electrode", *ECS Trans.* 33, 85 (2010). [<http://dx.doi.org/10.1149/1.3493686>]
22. Takahiro Yamamoto, Kenji Sasaoka, Satoshi Watanabe, "Universal Transition between Inductive and Capacitive Admittance of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes", *Physical Review B* Vol. 82, art. no. 205404 (2010) [DOI: 10.1103/PhysRevB.82.205404]
23. Susumu Okada, Takazumi Kawai, Kyoko Nakada, "Electronic Structure of Graphene with Topologica Line Defect", *Journal of the Physical Society of Japan* Vol. 80, No.1, p.013709 (2011) [DOI: 10.1143/JPSJ.80.013709]
24. T. Nakanishi, M. Koshino and T. Ando, "Transmission through a boundary between monolayer and bilayer graphen", *Physical Review B*, Vol. 82, 125428 (2010)[DOI:10.1103/PhysRevB.82.125428]
25. M. Koshino, T. Nakanishi and T. Ando, "Interface Landau levels in graphene monolayer-bilayer junction", *Physical Review B* Vol. 82 205436 (2010) [DOI: 10.1103/PhysRevB.82.205436]
26. K. Sakai, K. Takai, K. Fukui, T. Nakanishi and T. Enoki, "Honeycomb superperiodic pattern and its fine structure near the armchair edge of graphene observed by low-temperature scanning tunneling microscopy ", *Physical Review B* Vol. 81, 235417 (2010) [DOI: 10.1103/PhysRevB.81.235417]
27. K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi and T. Enoki, "Electronic states and analytic solutions of graphene nanoribbons", *Sci. Tech. Adv. Mat.*, Vol. 11, 054504 (2010) [DOI: 10.1088/1468-6996/11/5/054504]
28. Minoru Otani, Susumu Okada, "Gate-Controlled Carrier Injection into Hexagonal Boron Nitride", *Physical Review B* Vol. 83, 073405 (2011) [DOI: 10.1103/PhysRevB.83.073405].
29. Nobuhito Onoda, Satoru Konabe, Takahiro Yamamoto, Kazuyuki Watanabe, "Auger ionization in carbon nanotubes and graphene nanoribbons under laser irradiation", *physica status solidi (c)*, Vol.8, 570–572 (2011). [ DOI:10.1002/pssc.201000453]
30. Satoru Konabe, Kazuyuki Watanabe, "Mechanism for the optical activation of dark spin-triplet excitons in hydrogenated single-walled carbon nanotubes", *Physical Review B* Vol. 83, 045407 (2011) [DOI: 10.1103/PhysRevB.83.045407].
31. Susumu Okada, Minoru Otani, "Electron-state Control of Hexagonal Boron Nitride:

- Carrier Injection into Inter-layer Band”, *physica status solidi (c)* Vol. 8, No. 2, 500 - 502 (2011) [DOI:10.1002/pssc.201000469]
32. Yoshiteru Takagi, Susumu Okada, “Electronic-state Modulation on Single-Walled Carbon Nanotube Adsorbed on Metal Surfaces”, *physica status solidi (c)*. Vol. 8, No. 2, 564- 566 (2011) [ DOI:10.1002/pssc.201000470].
  33. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, Susumu Okada, “Semiconducting Electronic Property of Graphene Adsorbed on (0001) Surfaces of SiO<sub>2</sub>”, *Physical Review Letters*, Vol. 106, 106801 (2011) [DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.106801]
  34. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, Yoko Iizumi, Toshiya Okazaki, Georgios Rotas, Nikos Tagmatarchis, Yongfeng Li, Toshiro Kaneko, Rikizo Hatakeyama, and Susumu Okada, “Origin of the n-type Transport Behavior of Azafullerene Encapsulated Single-walled Carbon Nanotubes”, *Applied Physical Letters*, vol. 99, No. 5, art. no. 053105, 2011 (DOI:10.1063/1.3619828)
  35. Satoru Konabe and Susumu Okada, “Method for probing the magnetic state of nanomaterials encapsulated in carbon nanotubes”, *Applied Physics Letters*, Vol. 98, art. no. 073109 (2011). [DOI:10.1063/1.3556274]
  36. Katsumasa Kamiya, Naoto Umezawa, and Susumu Okada, “Energetics and electronic structure of graphene adsorbed on HfO<sub>2</sub>(111): Density functional calculations”, *Physical Review B* Vol. 83, art. no. 153413 (2011).[ DOI: 10.1103/PhysRevB.83.153413]
  37. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, “Energetics and electronic structure of encapsulated single-stranded DNA in carbon nanotubes” *Physical Review B* Vol. 83, art. no. 155444 (2011).[ DOI: 10.1103/PhysRevB.83.155444]
  38. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, “Energetics and electronic structure of semiconducting single-walled carbon nanotube adsorbed on metal surfaces”, *Physical Review B*, Vol. 84, art. no. 035406 (2011). [DOI: 10.1103/PhysRevB.84.035406]
  39. Satoru Konabe and Susumu Okada, “Effects of Localized Spins on Excitons in Single-Walled Carbon Nanotubes with Imperfections”, *New Journal of Physics*. Vol. 13, art. no. 083028 (2011).[ DOI:10.1088/1367-2630/13/8/083028]
  40. Susumu Okada, “Two-dimensionally polymerized coronene: A metallic sheet of sp<sup>2</sup> C atoms”, *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 80, art. no. 123704 (2011).[ DOI: 10.1143/JPSJ.80.123704]
  41. Tomofumi Tada, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe, “Molecular Orbital Concept on Spin-Flip Transport in Molecular Junctions” *Theor. Chem. Acc.* Vol. 130, pp. 775-788 (2011). [DOI: 10.1007/s00214-011-1028-3]
  42. Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, Satoshi Watanabe, and Kenji Shiraishi, “AC Response of Quantum Point Contacts with Split-Gate Configuration”, *Phys. Rev. B* Vol. 84, art. no. 125403 (2011). [DOI: 10.1103/PhysRevB.84.125403]
  43. Daisuke Hirai, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe, “Theoretical Analysis of AC Transport in Carbon Nanotubes with a Single Atomic Vacancy: Sharp Contrast between DC and AC Responses in Vacancy Position Dependence”. *Appl. Phys. Exp.* Vol. 4, art. no. 075103 (2011). [DOI: 10.1143/APEX.4.075103]
  44. Wei Liu, Kenji Sasaoka, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Watanabe, “Quantum Transient Currents in Molecular Systems Weakly coupled with Electrodes”, *J. Appl. Phys.* Vol. 109, art. no. 123705 (2011). [DOI: 10.1063/1.3596812]
  45. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, “Energetics and Electronic Structure of Diamond Nanoparticles”, *Japanese Journal of Applied Physics*. Vol. 51, art. no. 015001 (2012).[DOI: 10.1143/JJAP.51.015001]
  46. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Magnetic-state tuning of the rhombohedral graphite film by interlayer spacing and thickness”, *Surface Science*, Vol. 606,



- pp. 253–257 (2012) [DOI:10.1016/j.susc.2011.10.001]
47. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Geometries and Electronic Structures of Graphene Adsorbed on SiO<sub>2</sub> (0001) Surfaces: The Possibility of the Electronic Structure Tuning by the Insulating Substrate”, IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES. pp.11.6.1–11.6.4, 5–7 Dec. 2011 [doi: 10.1109/IEDM.2011.6131535]
  48. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Tunable Magnetic Properties of Rhombohedral Graphite Thin Films”, Japanese Journal of Applied Physics. Vol. 51, 02BN04 (2012)[DOI: 10.1143/JJAP.51.02BN04]
  49. Susumu Okada and Takazumi Kawai, “Electronic structure of corrugated graphene sheet” Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 51, 02BN05 (2012) [DOI: 10.1143/JJAP.51.02BN05].
  50. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, “Design of  $\pi$ -network of graphene by atomic Pt adsorbates” Journal of Physics and Chemistry of Solids, Volume 73, Pages 777 – 780 (2012). [DOI: 10.1016/j.jpics.2012.01.023]
  51. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Electron-state engineering of bilayer graphene by ionic molecules”, Applied Physics Letters Vol. 101, 233106 (2012). (DOI: 10.1063/1.4769098)
  52. Soon-Kil Joung, Toshiya Okazaki, Susumu Okada, and Sumio Iijima, “Weak Response of Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes to C<sub>60</sub> Encapsulation Studied by Resonance Raman Spectroscopy”, Journal of Physical Chemistry C Vol. 116, pp. 23844–23850 (2012). (DOI: 10.1021/jp309379r)
  53. Satoru Konabe, Kazunari Matsuda, and Susumu Okada, “Suppression of Exciton–Electron Scattering in Doped Single-Walled Carbon Nanotubes”, Physical Review Letters, Vol. 109, 187403 (2012). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.187403)
  54. Mina Maruyama and Susumu Okada, “Elemental semiconductors of fused small fullerenes: Electronic and geometric structures of C<sub>28</sub> polymers”, Journal of the Physical Society of Japan Vol. 81, 114719 (2012). (DOI: 10.1143/JPSJ.81.114719)
  55. Satoru Konabe and Susumu Okada, “Robustness and Fragility of Linear Dispersion Band of Bilayer Graphene under an Electric Field”, Journal of the Physical Society of Japan Vol. 81, 113702 (2012).(DOI:10.1143/JPSJ.81.113702)
  56. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, “Modulation of Electron–states of Graphite Thin Films by the Nearly Free Electron States of Metal Surfaces”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 51, 100203 (2012).(DOI:10.1143/JJAP.51.100203)
  57. Donghui Guo, Takahiro Kondo, Takahiro Machida, Keigo Iwatake, Susumu Okada, and Junji Nakamura, “Landau levels under zero magnetic field on potassium intercalated graphite”, Nature Communications, Vol. 3, 1068 (2012).(DOI: 10.1038/ncomms2072)
  58. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, “Electronic Properties of Carbon Nanotubes under an Electric Field”, Applied Physics Express, Vol, 5, 095101 (2012).(DOI: 10.1143/APEX.5.095101)
  59. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, “Electronic Structure Modulation of Graphene by Metal Electrodes”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 51, 085102 (2012).(DOI: 10.1143/JJAP.51.085102)
  60. Takuma Shiga, Satoru Konabe, Junichiro Shiomi, Takahiro Yamamoto, Shigeo Maruyama, and Susumu Okada, “Graphene–Diamond Hybrid Structure as Spin-Polarized Conducting Wire with Thermally-Efficient Heat Sinks”, Applied Physics Letters, Vol. 100, 233101 (2012). (DOI:10.1063/1.4725485)
  61. Satoru Konabe and Susumu Okada, “Multiple Exciton Generation by A Single Photon in Single-Walled Carbon Nanotubes”, Physical Review Letters, Vol. 108, 227401 (2012).

- (DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.227401)
62. Yoshiteru Takagi and Susumu Okada, "Design of pi network of graphene by atomic Pt adsorbates", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 73, pp. 777 -- 780 (2012). (DOI: 10.1016/j.jpcs.2012.01.023)
  63. C. Hu, R. Ogura, N. Onoda, S. Konabe, and K. Watanabe, "Quasiparticle band gaps of boron nitride nanoribbons", *Physical Review B*, vol. 85, 245420, (2012). (DOI:10.1103/PhysRevB.85.245420)
  64. Mina Maruyama and Susumu Okada, "Two-dimensional Metallic Molecular Sheet of Fused C26 Fullerene", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 82, 043708 (2013). (DOI:10.7566/JPSJ.82.043708)
  65. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, "Anomalous Electric-Field Screening at Edge Atomic Sites of Finite-length Zigzag Carbon Nanotubes", *Applied Physics Express* Vol. 6, 045101 (2013). (DOI: 10.7567/APEX.6.045101)
  66. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Alkanes and Polyethylene Adsorbed on Graphene" *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 52, 04CN07 (2013). (DOI:10.7567/JJAP.52.04CN07)
  67. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Increase of Photocurrent in Single-Walled Carbon Nanotube by Exciton Interactions", *Applied Physics Letters* Vol. 102, 113110 (2013). (DOI:10.1063/1.4798274)
  68. Rieko Moriya, Kazuhiro Yanagi, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Charge Manipulation in Molecules Encapsulated Inside Single-Wall Carbon Nanotubes", *Physical Review Letters* Vol. 110, 086801 (2013). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.086801)
  69. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Absence of Edge State near the 120 deg Corner of Zigzag Graphene Nanoribbons", *Physical Review B* Vol. 87, 045424 (2013). (DOI: 10.1103/PhysRevB.87.045424)
  70. Derek Ashley Thomas, Takahiro Yamamoto, Tomofumi Tada, and Satoshi Watanabe, "Non-Equilibrium Thermal Transport Simulation of Conical Carbon Nanofibers" *Transactions of the Materials Research Society of Japan* Vol. 38, 183 (2013).
  71. Yasuhiro Takada and Takahiro Yamamoto, "Wave Packet Dynamics Simulation on Electronic Transport in Carbon Nanotubes with Randomly Distributed Impurities" *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 52, 06GD07 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.06GD07)
  72. Teppei Kato, Shinji Usui, and Takahiro Yamamoto, "Nanostructural Effects on Thermoelectric Power of Graphene Nanoribbons" *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 52, 06GD05 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.06GD05)
  73. Yoshikazu Homma, Shohei Chiashi, Takahiro Yamamoto, Kaname Kono, Daiki Matsumoto, Junpei Shitaba, and Shintaroh Sato, "Photoluminescence Measurements and Molecular Dynamics Simulations of Water Adsorption on the Hydrophobic Surface of a Carbon Nanotube in Water Vapor" *Physical Review Letter* Vol. 110, 157402 (2013). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.157402)
  74. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Enhanced Photocurrent in Single-Walled Carbon Nanotubes by Exciton Interactions" *Applied Physics Letters* Vol. 102, 113110 (2013). (DOI: 10.1063/1.4798274)
  75. Haruna Nitta, Yutaka Matsuo, Eiichi Nakamura, and Susumu Okada, "Magnetic Properties of Deca-Methyl Fullerenes: Radical Spin Interaction on Chemically Functionalized Fullerenes" *Applied Physics Express* Vol. 6, 045102 (2013). (DOI: 10.7567/apex.6.045102)
  76. Satoru Konabe, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "High-Efficient Photoelectric Conversion in Graphene-Diamond Hybrid Structures: First-principles and

- Model Calculations” *Applied Physics Express* Vol. 6, 045104 (2013). (DOI: 10.7567/APEX.6.045104)
77. Junki Sone and Susumu Okada, “Massless Electrons on Hexagonal Dangling Bond Network on Hydrogen Deposited Diamond (111) and Si(111) Surfaces” *Journal of the Physical Society of Japan* Vol. 82, 064706 (2013). (DOI: 10.7566/jpsj.82.064706)
  78. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, “Energetics and Electronic Structures of Alkanes Adsorbed on Carbon Nanotubes” *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 52, 06GD10 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.04CN07)
  79. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, “Electronic Properties of Capped Carbon Nanotubes under an Electric Field: Inhomogeneous Electric-Field Screening Induced by Bond Alternation” *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 52, 06GD04 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.06GD04)
  80. Shota Kigure and Susumu Okada, “Energetics and Electronic Structures of C60 Included in [n]Cyclacene Molecules” *Journal of the Physical Society of Japan* Vol. 82, 094717 (2013). (DOI: 10.7566/JPSJ.82.094717)
  81. Mina Maruyama and Susumu Okada, “A Two-dimensional sp<sup>2</sup> Carbon Network of Fused Pentagons: All Carbon Ferromagnetic Sheet” *Applied Physics Express* Vol. 6, 095101 (2013). (DOI: 10.7567/APEX.6.095101)
  82. Mark A. Bissett, Satoru Konabe, Susumu Okada, Masaharu Tsuji and Hiroki Ago, “Tuning the Chemical Reactivity of Graphene by Mechanical Strain” *ACS Nano* Vol. 7, pp. 10335 -- 10343 (2013). (DOI: 10.1021/nn404746h)
  83. Mina Maruyama and Susumu Okada, “Design of New Carbon Allotropes of Fused Small Fullerenes” *Physica Status Solidi (c)* Vol. 10, pp. 1620–1623 (2013). (DOI: 10.1002/pssc.201300237)
  84. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, “Electrostatic Potential of Hydrogenated Finite-length Carbon Nanotubes under an Electric Field” *Physica Status Solidi (c)* Vol. 10, pp. 1624 -- 1627 (2013). (DOI: 10.1002/pssc.201300234)
  85. Tae-uk Park, Yoko Tomita, and Takashi Nakayama, “First-principles study of Pt-film stability on doped graphene sheets” *Surface Science* Vol. 621, pp. 7-15 (2014). (DOI: 10.1016/j.susc.2013.10.011)
  86. Mina Maruyama, Kyoko Nakada, and Susumu Okada, “Energetics and electronic structures of polymerized cyclobutadiene” *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 53, 035103 (2014). (DOI: 10.7567/JJAP.53.035103)
  87. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Electrostatic modulation of electron-states in MoS<sub>2</sub>: First-principles Calculations” *Journal of Physics: Condensed Matter* Vol. 26, 135001 (2014). (DOI: 10.1088/0953-8984/26/13/135001)
  88. Kengo Takashima and Takahiro Yamamoto, “Conductance fluctuation of edge-disordered graphene nanoribbon: Crossover from diffusive transport to Anderson localization” *Applied Physics Letter*, Vol. 104, 093105 (2014). (DOI: 10.1063/1.4867473)
  89. Yusuke Nakai, Kazuya Honda, Kazuhiro Yanagi, Hiromichi Kataura, Teppei Kato, Takahiro Yamamoto, and Yutaka Maniwa, “Giant Seebeck Coefficient in Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotube Film” *Applied Physics Express* Vol. 7, 025103 (2014). (DOI: 10.7567/APEX.7.025103)
  90. Shohei Chiashi, Tateki Hanashima, Ryota Mitobe, Kotaro Nagatsu, Takahiro Yamamoto and Yoshikazu Homma, “Water Encapsulation Control in Individual Single-Walled Carbon Nanotubes by Laser Irradiation” *The Journal of Physical Chemistry Letter* Vol. 5, 408 (2014) (DOI: 10.1021/jz402540v)
  91. Brandon C Wood, Tadashi Ogitsu, Minoru Otani, Juergen Biener, “First Principles-Inspired Design Strategies for Graphene-Based Supercapacitor Electrodes”

- Journal of Physical Chemistry C 118, 4–15 (2014). (DOI: 10.1021/jp4044013)
92. Junhao Lin, Ovidiu Cretu, Wu Zhou, Kazu Suenaga, Dhiraj Prasai, Kirill I. Bolotin, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, Susumu Okada, Andrew R. Lupini, Juan-Carlos Idrobo, Dave Caudel, Arnold Burger, Nirmal J. Ghimire, Jiaqiang Yan, David G. Mandrus, Stephen J. Pennycook, Sokrates T. Pantelides, "Flexible metallic nanowires with self-adaptive Ohmic contact to semiconducting transition-metal dichalcogenide monolayers", *Nature Nanotechnology* Vol. 9, 436 -- 442 (2014). (doi:10.1038/nnano.2014.81)
  93. Mina Maruyama and Susumu Okada, "Two-dimensional sp<sup>2</sup> Carbon Networks of Fused Pentagons", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 53, 06JD02 (2014). (doi:10.7567/JJAP.53.06JD02)
  94. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, "Structural Dependence of Electronic Properties of Graphene Nanoribbons on an Electric Field", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 53, 06JD05 (2014). (doi:10.7567/JJAP.53.06JD05)
  95. Shota Kigure and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of C<sub>60</sub> Included in [n]Cyclacene Molecules: Dynamical and Electronic Properties of C<sub>60</sub>", *Japanese Journal of Applied Physics* Vol. 53, 06JD06 (2014). (doi:10.7567/JJAP.53.06JD06)
  96. Kazuya Nomura and Susumu Okada, "An anomalous dipole-dipole arrangement of water molecules encapsulated into C<sub>60</sub> dimer", *Chemical Physics Letters* Vol. 608, pp. 351--354 (2014). (DOI: 10.1016/j.cplett.2014.06.013)
  97. Daisuke Hirai, Takahiro Yamamoto, and Satoshi Yamamoto, "Anomalous satellite inductive peaks in alternating current response of defective carbon nanotubes", *J. Appl. Phys.* 115, 174312 (2014).
  98. Satoru Konabe and Takahiro Yamamoto, "Valley photothermoelectric effects in transition-metal dichalcogenides", *Physical Review B* 90, 075430 (2014). (DOI:10.1103/PhysRevB.90.075430)
  99. Kohei Narita and Susumu Okada, "Spin-state tuning of decamethyl C<sub>60</sub> by an external electric field", *Chemical Physics Letters* 614, 10–14 (2014). (DOI: 10.1016/j.cplett.2014.08.063).
  100. U Ishiyama, Nguyen Thanh Cuong, and Susumu Okada, "Carrier accumulation of carbon nanotubes with atomic defects by an gate electrode", *Japanese Journal of Applied Physics* 53, 115102 (2014). (DOI: 10.7567/JJAP.53.115102)
  101. Shota Kigure, Yoko Iizumi, Toshiya Okazaki, and Susumu Okada, "Electronic and Geometric Structures of Carbon Nanotubes Encapsulating Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Molecules", *Journal of the Physical Society of Japan* **83**, 124709 (2014). (DOI: 10.7566/JPSJ.83.124709)
  102. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, "Electron injection into nearly free electron states of graphene nanoribbons under a lateral electric field", *Applied Physics Express* **7**, 125103 (2014). (DOI: 10.7567/APEX.7.125103)
  103. Lok Kumar Shrestha, Rekha Goswami Shrestha, Yusuke Yamauchi, Jonathan P. Hill, Toshiyuki Nishimura, Kun'ichi Miyazawa, Katsunori Wakabayashi, Takazumi Kawai, Susumu Okada, and Katsuhiko Ariga, "Nanoporous Carbon Tubes from Fullerene Crystals as the  $\pi$ -Electron Carbon Source", *Angewandte Chemie International Edition*, **53**, 951 -- 955 (2014). (DOI: 10.1002/anie.201408856)
  104. Masahiro Shigeta, Katsumasa Kamiya, Mitsugu Uejima, Susumu Okada, "Dispersion of CNT in Organic Solvent by Commercial Polymers with Ethylene Chains: Experimental and Theoretical Studies", *Japanese Journal of Applied Physics* **54**, 035101 (2015). (DOI: 10.7567/JJAP.54.035101)
  105. Hideyuki Jippo, Mari Ohfuchi, and Susumu Okada, "Electronic transport properties of 10 nm graphene channel between Au electrodes", *e-Journal of Surface Science and*

- Nanotechnology **13**, 54–58 (2015). (DOI: 10.1380/ejssnt.2015.54)
106. Shota Kigure, Haruka Omachi, Hisanori Shinohara, and Susumu Okada, “Nano-Saturn: Energetics of the Inclusion Process of C60 into Cyclohexabiphenylene”, *Journal of Physical Chemistry C* (2015). (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b00449)
  107. Shota Kigure and Susumu Okada, “Nano-Saturn: Theoretical Design of New C60 Inclusion Compounds”, *Japanese Journal of Applied Physics* (2015). in press
  108. Kohei Narita and Susumu Okada, “Electronic structures of Decamethyl C60 under an Electric Field”, *Japanese Journal of Applied Physics* (2015). In press
  109. Mina Maruyama and Susumu Okada, “Geometric and Electronic Structures of Polymerized C32 Fullerenes: Electronic Structure Tuning by Fullerene and CNT Filling”, *Japanese Journal of Applied Physics* (2015). in press
  110. U Ishiyama, Nguyen Thanh Cuong, and Susumu Okada, “Threshold Voltage Variation for Charge Accumulation in CNT Due to the Monatomic Defect Arrangement”, *Japanese Journal of Applied Physics* (2015). in press
  111. U Ishiyama, Nguyen Thanh Cuong, and Susumu Okada, “Influence of Defects for Carrier Injection In Carbon Nanotubes”, *Japanese Journal of Applied Physics* (2015). in press
  112. Kohei Narita and Susumu Okada, “Radical Spin Interaction in One-dimensional Chain of Decamethyl C60”, *Chemical Physics Letters*. (2015). in press.

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 15 件、国際会議 11 件)

国際会議

1. Susumu Okada (筑波大), “Electronic Structure of Graphite Thin Film: New Surface Localized States and Electron-State Tuning”, International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka Univ. Osaka, May 31 - June 4, (2010).
2. Takahiro Yamamoto (理科大), Kenji Sasaoka (東大), and Satoshi Watanabe (東大), “Coherent AC Electronic Transport in Metallic Carbon-Nanotube Bridges”, Workshop on Simulation and Modeling of Emerging Electronics, (Hong Kong) December 8 (2010).
3. Susumu Okada (筑波大), “Theoretical characteristics of graphene and thin films of graphite”, Graphene Workshop in Tsukuba 2011: Discussion on graphene growth toward future applications, Tsukuba, Jan. 17–18 (2011)
4. T. Nakanishi (AIST), M. Koshino (東工大) and T. Ando (東工大), “Boundary between Monolayer and Bilayer Graphene as Pseudospin Filter”, A3 symposium on emerging materials, Chonju, Korea, 2010.11.10.
5. Susumu Okada (筑波大), “Electronic Structure of Graphene Hybrid Materials”, Recent Progress in Graphene Research, Suwon, Korea. 2011 年 10 月 5 日,
6. Takahiro Yamamoto (理科大), “Quantum-mechanical simulation on coherent phonon transport in carbon nanotubes” MRS 2011 Spring Meeting, San Francisco (USA)、2011 年 4 月 28 日
7. Takahiro Yamamoto (理科大), “Coherent Phonon Transport in Isotope-Disordered Carbon Nanotubes”, 7th US-Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena - Science and Engineering -, Ise-Shima, Japan, 2011 年 12 月 12 日
8. Susumu Okada (筑波大), “Electronic structure modulation of graphene by substrates” Japa-India Joint Workshop on Graphene Sciences, Tokyo Institute of

- Technology, Tokyo, 2012年3月2日
9. Satoru Konabe (筑波大), "Multiple exciton generation in carbon nanotubes", International Conference on Small Science (ICSS2013), Red rock casino resort and spa hotel(ラスベガス), 2013年12月16日.
  10. Takahiro Yamamoto (理科大), "Simulation Study on Thermoelectric Properties of Carbon Nanostructures", 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-12), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, 2013年11月6日.
  11. Satoru Konabe (筑波大), "Theory of high efficiency photoelectric conversion in carbon nanotubes", The 6th IEEE International Nanoelectronics Conference, (INEC2014), (北海道大学) 2014年7月28日-31日

#### 国内会議

12. 近藤剛弘 (筑波大), "グラファイト表面上の単原子層Pt触媒", 第50回真空に関する連合講演会, 学習院大学百周年記念館(東京目白)2009年11月4-6日
13. 近藤剛弘 (筑波大), "グラファイト上のPt添加および触媒機能" 材料機能ドライプロセス部会 第82回例会、カーボン系材料の最先端, 技術東京都立産業技術研究センター城南支所, (東京)2010年1月21日
14. 岡田晋 (筑波大), "ナノ炭素物質複合構造の電子物性", 2010年秋季第71回応用物理学会学術講演会(長崎大)2010年9月14日-17日
15. 山本貴博 (理科大), "カーボンナノチューブの熱伝導シミュレーション", カーボンナノ材料研究会、関西大学(大阪)、2011年6月24日
16. 小鍋哲 (筑波大), "カーボンナノチューブにおける励起子多体相関" 日本物理学会 2012年秋季大会, 横浜国立大学, 2012年9月19日
17. 小鍋哲 (筑波大), "カーボンナノチューブにおける励起子多体効果", 日本物理学会第68回年次大会, 広島大学, 2013年3月29日
18. 山本貴博 (理科大), 炭素ナノ物質のフォノン輸送と熱電変換、日本物理学会 第68回年次大会、広島大学・東広島市、2013年3月27日
19. 岡田晋 (筑波大), "グラファイト複合構造体の物性", ニューダイヤモンドフォーラム 平成24年度第1回研究会「ナノカーボンの最新研究」東京大学(東京)2012年6月15日
20. 小鍋哲 (筑波大), "ナノスケール物質における新奇光電・熱電変換の基礎物理", 仙台「プラズマフォーラム」、東北大学、2013年11月2日.
21. 小鍋哲 (筑波大), "ナノカーボン物質における励起子多体物性", ナノフォトンクスシンポジウム「ナノフォトンクスにおける複雑性・多様性と機能」、慶応大学、2013年7月18日.
22. 岡田晋 (筑波大), "グラフェン系物質のデバイス応用にむけた展望と問題" 2013年真空・表面科学合同講演会, 茨城県つくば市・つくば国際会議場, 2013年11月28日.
23. 山本貴博 (理科大), "ナノカーボン物質の熱電物性シミュレーション" 日本熱電学会 第17回研究会「新しい概念・設計思想に基づく熱電機能の発現・性能向上へのアプローチ」, 東京都港区、国立大学法人北陸先端科学技術大学院大学 東京サテライト, 2013年8月27日.
24. 岡田晋 (筑波大) "複合構造形成によるグラフェン系材料の物性制御", 応物 Siテクノロジー分科会講演会「グラフェンナノ構造の革新的デバイスへの展開」, 産業技術総合研究所, つくば市, 2014年5月23日
25. 山本貴博 (東京理科大), "カーボンナノチューブのコヒーレントなフォノン熱伝導シミュレーション", 第51回日本伝熱シンポジウム, アクトシティ浜松・コンgresセンター (浜松市) 2014年5月21日~5月23日
26. Takahiro Yamamoto (東京理科大), "Heat Transport and Thermoelectric

Properties of Carbon Nanotubes”, 第 47 回 フラワーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム, 名古屋大学 (名古屋市) 2014 年 9 月 3 日～9 月 5 日

② 口頭発表 (国内会議84件、国際会議33件)  
国際会議

1. Minoru Otani (産総研), Mikito Koshino (東北大), Yoshiteru Takagi (筑波大), Susumu Okada (筑波大), “Magnetic Phase control of Rhombohedral Graphite Thin Films by Electric Field”, 37th International Symposium on Compound Semiconductors, Takamatsu, May 31 (2010).
2. Yoshiteru Takagi (筑波大), Susumu Okada (筑波大), “Electronic structure of graphene and a few-layergraphite on metal surface” International Symposium on Graphene Devices, RIEC, Tohoku University, Sendai, Japan on October 27-29th, 2010.
3. K. Sakai (東工大), K. Takai (東工大), K. Fukui (東工大), T. Nakanishi (産総研) and T. Enoki (東工大), “Direct Observation of the Local Electronic Structure in the Vicinity of the Graphene Edge” International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010” (ICSM 2010), Kyoto, Japan. 2010.7.7
4. T. Nakanishi (産総研) and T. Ando (東工大), “Valley polarization in transmission through boundary between mono- and bi-layer graphene”, 30th international conference on the physics of semiconductors (ICPS30), Seoul, 2010.7.27
5. K. Sakai (東工大), K. Takai (東工大), K. Fukui (東工大), T. Nakanishi (産総研) and T. Enoki (東工大), “STM OBSERVATION OF THE FINE STRUCTURE IN THE VICINITY OF THE GRAPHENE EDGE”, Recent Advances in Graphene and Related Materials, Singapore, 2010.8.3
6. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), and Susumu Okada (筑波大), “Geometries and Electronic Structures of Graphene Adsorbed on SiO<sub>2</sub> (0001) Surfaces: The Possibility of the Electronic Structure Tuning by the Insulating Substrate”, IEEE International Electron Devices Meeting, Washington DC, USA, 2011 年 12 月 7 日
7. Susumu Okada (筑波大), “Electronic properties of carbon nanotube hybrid structures”, Workshop on Carbon Nanotube in Commemoration of the 20th Anniversary of its Discovery (“2011-CNT20”), The International House of Japan, Tokyo, 2011 年 12 月 13 日
8. S. Konabe (筑波大) and S. Okada (筑波大), “Spin-Related Novel Optical Phenomena in Single-Walled Carbon Nanotubes”, 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011), Nagoya, 2011 年 9 月 28 日
9. Y. Takagi (筑波大) and S. Okada (筑波大) “Electronic Structure Modulation of Graphene Adsorbed by Metal Pillars”, 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011), Nagoya, Japan, 2011 年 9 月 28 日.
10. Daisuke Hirai (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Satoshi Watanabe (東大), Effect of Disorder on AC Response of Metallic Carbon Nanotube, APS March Meeting 2013, Baltimore, USA, 2013 年 3 月 20 日
11. Nguyen Thanh Cuong (AIST), Minoru Otani (AIST) and Susumu Okada (筑波大), “Electron-state engineering of bilayer graphene by sandwiching ionic molecules”, American Physical Society, March Meeting, March 18-22, 2013, Baltimore.
12. Daisuke Hirai (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Satoshi Watanabe (東大), Simulation of AC Response of Defective Metallic Carbon Nanotubes, International Symposium on Compuatics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka

- Univrsity, Osaka, 2012 年 10 月 12 日
13. Takahiro Yamamoto (理科大)、Heat Transport in Carbon Nanotubes: Non-Equilibrium Green's Function Simulation、IUMRS-ICEM 2012、PACIFICO YOKOHAMA, Kanagawa, 2012 年 9 月 26 日
  14. Daisuke Hirai (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Satoshi Watanabe (東大)、Theoretical Investigation on Influence of Defects on Inductive-Capacitive Transition of AC Response of Metallic Carbon Nanotubes、MRS 2012 Spring Meeting, San Francisco, USA、2012 年 4 月 12 日
  15. Takahiro Yamamoto (理科大), Kenji Sasaoka (神戸大), Satoshi Watanabe (東大)、Coherent Phonon Transport in Isotope-Disordered Carbon Nanotubes、MRS 2011 Spring Meeting, San Francisco, USA、2012 年 4 月 12 日
  16. Y. Tomita (筑波大), T. Nakayama (千葉大), "Chemical Trend of Atomic Impurity States in Organic Semiconductor Films; Theoretical Investigation", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 国立京都国際会館、2012 年 9 月 25 日-27 日
  17. Nguyen Thanh Cuong (AIST), Minoru Otani (AIST), Susumu Okada (筑波大), "Tuning Semiconducting Property of Bilayer Graphene by Ionic Molecules", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 国立京都国際会館、2012 年 9 月 25 日-27 日
  18. Satoru Konabe (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), "Multiple exciton generation in single-walled carbon nanotubes", 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 国立京都国際会館、2012 年 9 月 25 日-27 日
  19. Nguyen Thanh Cuong (AIST), Minoru Otani (AIST), Susumu Okada (筑波大), "Edge-orientation of Graphene Corner: First-principles Calculations", MNC2012, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク (神戸市)
  20. Satoru Konabe (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), "Multiple Exciton Generation in Graphene Nanoribbon", MNC2012, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2012 年 10 月 30 日-11 月 2 日, 神戸メリケンパーク (神戸市)
  21. Y. Takada (理科大), T. Yamamoto (理科大), "Wave-Packet Dynamics Simulation on Electronic Transport in Carbon Nanotubes with Topological Line Defects" 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Royton Sapporo, Hokkaido, Japan, 2013 年 11 月 10 日
  22. K. Sasaoka (神戸大), T. Yamamoto (理科大) and S. Watanabe (東大), "Non-equilibrium Green's Function Simulations of Non-steady Current under Hartree Approximation" 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-12), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, 2013 年 11 月 8 日
  23. D.A. Thomas (東大), T. Yamamoto (理科大), T. Tada and S. Watanabe (東大), "Thermoelectric property simulations of conical carbon nanofibers" 12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-12), Tsukuba International Congress Center, Tsukuba, Japan, 2013 年 11 月 8 日
  24. Yukihiro Takada (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), "Impurity Strength Dependence on Electronic Transport in Single-Walled Carbon Nanotubes" 2013 JSAP-MRS Joint Symposia,同志社大学、京都、2013 年 9 月 20 日
  25. Naoki Homma (理科大), Shintaro Sato (理科大), Shohei Chiashi (東大), Yoshikazu



- Homma (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “RBM of Single-Walled Carbon Nanotubes in Water Vapor” 2013 JSAP-MRS Joint Symposia, 同志社大学、京都, 2013年9月19日
26. Yukihiro Takada (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “Influence of Randomly Distributed Impurities on Electronic Transport in Carbon Nanotubes: Wave-Packet Dynamics Simulation” 19th International Vacuum Congress (IVC-19), Paris, France, 2013年9月11日
27. Derek Ashley Thomas (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Tomofumi Tada (東大), Satoshi Watanabe (東大), “Numerical Simulation of Thermal Transport in Carbon Nanofibers” MRS 2013 Spring Meeting, San Francisco, USA, 2013年4月3日
28. Susumu Okada (筑波大) and Jun-ki Sone (筑波大), “Massless Electrons on Hexagonal Dangling Bond Network on Hydrogen Deposited Diamond (111) and Si(111) Surfaces” ISANN 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, Poipu Beach, Kauai, USA, 2013年12月8日
29. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Design of Novel Two-dimensional Electron Systems” The 5th International Conference on Recent Progress in Graphene Research (RPGR2013), Tokyo Institute of Technology, Tokyo, 2013年9月12日.
30. Satoru Konabe (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Enhanced Photocurrent in Single-walled Carbon Nanotubes by Exciton Interactions” MNC2013, 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Sapporo, 2013年11月7日.
31. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Two-dimensional sp<sup>2</sup> carbon network consisting of fused pentagons”, International Conference of Synthetic Metals, June 30 -- July 5 (2014), Turku.
32. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Energetics and Electronic Structure of Graphene Nanoribbons under an Electric Field”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014).
33. Satoru Konabe (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Nonlinear Optical Properties of Monolayer Transition Metal Dichalcogenides”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014).
- 国内会議
34. Junji Nakamura(筑波大), Takahiro Kondo(筑波大), Kenji Watahiki(筑波大), Yousuke Iwasaki(筑波大), JunePyo Oh(筑波大), Tetsuya Suzuki(筑波大), Yujiro Honma(筑波大), Daigo Hatake(筑波大), “Catalytic Property and Morphology of Pt Clusters on Graphite Surface”, American Vacuum Society (AVS) 56th International Symposium, San Jose (United States) 8-13, November, 2009.
35. 畠 大悟 (筑波大), 吳 準杓(筑波大), 新川 慶太郎(筑波大), 近藤 剛弘 (筑波大), 中村 潤児(筑波大), “金属クラスターとグラファイト表面の界面相互作用の触媒特性への影響”, 第 29 回表面科学学術講演会, タワーホール船堀(東京)2009年10月27-29日
36. 鈴木 哲也(筑波大), 近藤 剛弘(筑波大), 中村 潤児(筑波大), “Pt/HOPG モデル触媒における電子状態の制御”, 第 29 回表面科学学術講演会, タワーホール船堀(東京)2009年10月27-29日
37. 大谷 実(産総研), 越野幹人(東工大), 高木祥光(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “電場によるグラファイト薄膜の磁性制御”, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポ

- ジウム (名城大学, 名古屋市)2010 年 3 月 5 日
38. 高木祥光(筑波大)、岡田晋(筑波大), ``アルミニウムクラスター吸着による単層カーボンナノチューブの E11、E22 バンドギャップ変調”, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (名城大学, 名古屋市)2010 年 3 月 3 日
  39. 岡田晋(筑波大)、大谷実(産総研) ``ポタシウムドープ六方晶窒化ホウ素”, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (名城大学, 名古屋市)2010 年 3 月 4 日
  40. 若林克法(物材機構), 岡田晋(筑波大), ``クライン端構造によるグラフェンナノリボンのエッジ状態と平坦バンド”日本物理学会第 65 回年次大会(岡山市、岡山大学)2010 年 3 月 20~23 日
  41. 高木祥光(筑波大), 岡田晋(筑波大), ``金属表面上の単層カーボンナノチューブの第一原理計”, 日本物理学会第 65 回年次大会(岡山市、岡山大学)2010 年 3 月 20~23 日
  42. 岡田晋(筑波大), ``基板によるグラファイト電子構造変調”, 日本物理学会第 65 回年次大会(岡山市、岡山大学)2010 年 3 月 20~23 日
  43. 町田考洋(筑波大), 郭東輝(筑波大), 近藤剛弘(筑波大), 中村潤児(筑波大):カリウムを蒸着したグラファイト表面の極低温走査トンネル分光計測, 第 106 回触媒討論会, 山梨大学甲府キャンパス(山梨), 2010.9.18
  44. Donghui Guo (筑波大), Takahiro Machida (筑波大), Yujiro Honma (筑波大), Takahiro Kondo (筑波大), and Junji Nakamura (筑波大):STM Observation of Potassium Intercalated in Graphite, 第 106 回触媒討論会, 山梨大学甲府キャンパス(山梨), 2010.9.17
  45. 町田考洋 (筑波大), 郭東輝 (筑波大), 近藤剛弘 (筑波大), 中村潤児 (筑波大):カリウムをドープしたグラファイト表面の極低温走査トンネル分光計測, 真空・表面科学合同講演会(第 30 回表面科学学術講演会+第 51 回真空に関する連合講演会)大阪大学コンベンションセンター(大阪), 2010.11.4-6
  46. 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), ``カーボンナノチューブの光吸収における不純物効果”, 日本物理学会 2010 年秋季大会(大阪府立大学)2010 年 9 月 23 日-26 日
  47. 岡田晋 (筑波大)、大谷実 (産総研), ``h-BN の電子構造制御の探索:NFE 状態へのキャリア注入”, 日本物理学会 2010 年秋季大会(大阪府立大学)2010 年 9 月 23 日-26 日
  48. 神谷克政 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), ``一本鎖 DNA 内包単層カーボンナノチューブの原子構造と電子構造”, 日本物理学会 2010 年秋季大会(大阪府立大学)2010 年 9 月 23 日-26 日
  49. 高木祥光 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), ``金属上の数層グラフェンの第一原理計算”, 日本物理学会 2010 年秋季大会(大阪府立大学)2010 年 9 月 23 日-26 日
  50. 山本貴博 (理科大), 笹岡健二 (東大), 渡邊聡 (東大), “発表タイトル:金属カーボンナノチューブの交流応答関数のキャリアドーピング効果”,日本物理学会 2010 年秋季大会(大阪府立大学)2010 年 9 月 23 日-26 日.
  51. 高木祥光 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), ``金属上の数層グラフェンの電子構造”, 第 39 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (京都大学)2010 年 9 月 5 日-7 日.
  52. 中西毅 (産総研), 越野幹人 (東工大), 安藤恒也 (東工大), “1,2 層グラフェン境界における谷分極伝導”, 第 39 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム, 京都, 2010.9.5.
  53. 酒井 建一 (東工大), 高井 和之 (東工大), 福井 建一 (東工大), 中西 毅 (産総研), 榎 敏明 (東工大), “グラフェン端近傍の磁場中局所観察”, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 大阪府立大学, 2010.9.24.

54. 中西毅 (産総研), 越野幹人 (東工大), 安藤恒也 (東工大), “単層, 2 層グラフェン境界における谷分極伝導”, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 大阪府立大学, 2010.9.25.
55. 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “単層カーボンナノチューブにおける単一光子による多重励起子生成”, 第 41 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (首都大学東京, 東京) 2011 年 9 月 6 日.
56. 高木祥光 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “カリウム-水素-グラファイト三元系層間化合物薄膜によるハントキャップエンシニアリング” 第 41 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (首都大学東京, 東京) 2011 年 9 月 7 日.
57. 岡田晋 (筑波大), “2 次元ポリマー化コロネン”, 第 41 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (首都大学東京, 東京) 2011 年 9 月 7 日.
58. 高木祥光 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “電極金属が誘起するグラフェン電子構造の空間的変調”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山市) 2011 年 9 月 21 日
59. 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “カーボンナノチューブにおける励起子多体効果” 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山市) 2011 年 9 月 21 日
60. 岡田晋 (筑波大), “2 次元ポリマー化したコロネンの構造と電子状態”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学(富山市) 2011 年 9 月 24 日
61. 神谷克政 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “カーボンナノチューブに吸着したアミノ酸のエネルギー論と電子構造”
62. 第 42 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, 東京大学(東京) 2011 年 3 月 6 日-8 日
63. 小鍋哲 (筑波大), 松田一成 (京大), 岡田晋 (筑波大), “キャリアドープした単層カーボンナノチューブの励起子-電子弾性散乱” 第 42 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, 東京大学(東京) 2011 年 3 月 6 日-8 日
64. 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “カーボンナノチューブにおける多重励起子生成”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学(西宮市) 2012 年 3 月 25 日
65. 岡田晋 (筑波大), “コロネンポリマー内包 CNT のエネルギー論と電子状態”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学(西宮市) 2012 年 3 月 25 日
66. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), Susumu Okada (筑波大), “Origin of the n-type Transport Behavior of C59N Encapsulated Single-Walled Carbon Nanotube” 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学(西宮市) 2012 年 3 月 25 日
67. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “C26 多面体をユニットとする二次元炭素結晶相の安定構造と電子状態”, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日
68. 山中綾香 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “電界下における有限長 zigzag カーボンナノチューブの電子物性”, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日
69. 近藤剛弘 (筑波大), Donghui Guo (筑波大), 町田考洋 (筑波大), 鹿野大志 (筑波大), 鈴木哲也 (筑波大), 櫻井雅崇 (筑波大), 岩竹啓吾 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), 中村潤児 (筑波大), “グラファイト表面に無磁場下で出現するランダウ準位の起源”, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日
70. 新夕晴奈 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “十重付加体フラーレンの電子構造”, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日
71. 曾根準基 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面におけるディラック電子”, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日-29 日

72. Nguyen Thanh Cuong (AIST), Minoru Otani (AIST), Susumu Okada (筑波大), "Electron-state control of multilayer MoS<sub>2</sub> by electric field", 日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学、2013 年 3 月 26 日-29 日
73. 高島健吾 (理科大), 高田幸宏 (理科大), 山本貴博 (理科大), グラフェンナノリボンの電気伝導特性へのエッジラフネスの影響、日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学・東広島市、2013 年 3 月 28 日
74. 加藤 哲平 (理科大), 臼井 信志 (理科大), 山本 貴博 (理科大), CNT 薄膜の熱電物性へのチューブ接触効果: NEGF+DFT シミュレーション、日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学・東広島市、2013 年 3 月 26 日
75. 平井大介 (東大), 山本貴博 (理科大), 渡邊聡 (東大), カーボンナノチューブの交流特性への不純物散乱の影響、日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学・東広島市、2013 年 3 月 26 日
76. 船谷 宜嗣 (神戸大), 山本 貴博 (理科大), 小川 真人 (神戸大), 相馬 聡文 (神戸大), グラフェンの機械的変形が熱物性に与える影響、日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学・東広島市、2013 年 3 月 26 日
77. 平井大介、山本貴博 (理科大)、渡邊聡、カーボンナノチューブの交流伝導特性の理論解析、第二回 ナノスケール分子デバイスセミナー、化学会館・東京、2013 年 3 月 14 日
78. 加藤 哲平 (理科大), 臼井 信志 (理科大), 山本 貴博 (理科大), SWNT 薄膜の熱起電力の第一原理シミュレーション、第 44 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、東京大学・伊藤国際学術研究センター・謝恩ホール・東京、2013 年 3 月 13 日
79. 高島健吾 (理科大), 高田幸宏 (理科大), 山本 貴博 (理科大), 欠損のあるグラフェンナノリボンにおけるアンダーソン局在、第 44 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、東京大学・伊藤国際学術研究センター・謝恩ホール・東京、2013 年 3 月 11 日
80. 小鍋 哲 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), "2 層グラフェンにおけるクーロンドラッグと励起子絶縁体", 第 44 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, 東京大学(東京)2013 年 3 月 11 日-13 日
81. 小鍋哲 (筑波大), 松田一成 (京大), 岡田晋 (筑波大), "キャリアドーブした単層カーボンナノチューブにおける励起子位相緩和", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(横浜市)2012 年 9 月 19 日
82. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), "C<sub>28</sub> をユニットとした新しい物質の安定構造と電子状態", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(横浜市)2012 年 9 月 21 日
83. 山中綾香 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), "電界下におけるキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性", 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学(横浜市)2012 年 9 月 21 日
84. Thanh Cuong Nguyen (AIST), Minoru Otani (AIST), Susumu Okada (筑波大), "Bilayer graphene sandwiched by ionic molecules: Band-gap and carrier type engineering", 第 43 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, 東北大学(仙台)2012 年 9 月 5 日-7 日
85. 小鍋 哲 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), "電界下における二層グラフェンの電子状態", 第 43 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, 東北大学(仙台)2012 年 9 月 5 日-7 日
86. 小鍋 哲 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), "単層遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバレーに依存した励起子多体効果" 第 45 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, 大阪大学(豊中市), 2013 年 8 月 6 日.
87. Mark Bissett, Satoru Konabe, Susumu Okada, Masaharu Tsuji, Hiroki Ago,

- “Tuning the Chemical Reactivity of Graphene by Mechanical Strain” 第 45 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, 大阪大学(豊中市)2013 年 8 月 7  
日.
88. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), Susumu Okada (筑波大),  
“Electronic structure of potassium doped MoS<sub>2</sub>” 第 45 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, 大阪大学(豊中市)2013 年 8 月 8 日.
  89. 山中綾香 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “電界下における有限長カーボンナノチ  
ューブの電荷蓄積と電子物性” 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013  
年 9 月 26 日.
  90. 木暮聖太 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “C<sub>60</sub> を抱接した環状炭化水素分子のエ  
ネルギー論と電子状態” 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013 年 9 月  
26 日.
  91. 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “単層遷移金属ダイカルコゲナイドの光学  
応答に関する理論的研究” 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013 年 9  
月 27 日.
  92. 猪谷太輔 (筑波大), 大橋洋士 (慶大), 岡田晋 (筑波大), “2 次元ディラック電子  
系における超伝導状態での集団励起” 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学,  
2013 年 9 月 28 日.
  93. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “5 員環からなる 2 次元 sp<sup>2</sup> 炭素結晶の電  
子構造” 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013 年 9 月 25 日.
  94. 高島健吾 (理科大), 高田幸宏 (理科大), 山本貴博 (理科大), “グラフェンナリ  
ボンにおけるエッジラフネスの影響のリボン幅依存性” 日本物理学会 2013 年秋季  
大会, 徳島大学, 2013 年 9 月 26 日.
  95. 船谷宜嗣 (神戸大), 山本貴博 (理科大), 小川真人 (神戸大), 相馬聡文 (神戸  
大), “グラフェンの熱物性における面内歪みの影響” 日本物理学会 2013 年秋季  
大会, 徳島大学, 2013 年 9 月 26 日.
  96. 山本貴博 (理科大), “ナノカーボン材料の熱電物性シミュレーションと熱電変換  
材料としての可能性” ナノカーボン材料の熱電物性シミュレーションと熱電変換材  
料としての可能性, 東京理科大学・森戸記念会館, 2013 年 6 月 20 日.
  97. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “C<sub>32</sub> フラーレン固体相の物質設計と物  
性解明” 日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学, 2014 年 3 月 27 日.
  98. 猪谷太輔 (筑波大), 大橋洋士 (慶大), 岡田晋 (筑波大), “2 次元ディラック電子  
系における超伝導状態での集団励起 II” 日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海  
大学, 2014 年 3 月 27 日
  99. 木暮聖太 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “多環炭化水素分子を内包したカーボン  
ナノチューブの物性” 日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学, 2014 年 3 月  
28 日.
  100. 山中綾香 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “グラフェン端のエネルギー論と電子状  
態” 日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学, 2014 年 3 月 28 日.
  101. 毛利真一郎 (京大), 周利中 (京大), 壺井佑夏 (京大), Minglin Toh (京大), 宮  
内雄平 (京大), 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), 江田剛輝 (京大), 松田一成  
(京大), “単層遷移金属ダイカルコゲナイドにおける発光ダイナミクスと励起子 励起  
子相互作用” 日本物理学会 第 69 回年次大会, 東海大学, 2014 年 3 月 28 日.
  102. 實宝 秀幸 (富士通研), 岡田 晋 (筑波大), 大淵 真理 (富士通研), “グラフェ  
ン/金属電極界面における接触抵抗の第一原理計算”, 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
  103. 五十嵐透 (首都大), 河合英輝 (首都大), Nguyen Thanh Cuong (産総研), 岡田  
晋 (筑波大), Thomas Pichler (ウィーン大), 柳和宏 (首都大), “高密度キャリア注入  
により単層カーボンナノチューブに形成される表面プラズモン散乱”, 日本物理学会

2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月 7 日-10 日

104. 丸本一弘 (筑波大), 松本大佑 (筑波大), 柳和宏 (首都大), 岡田晋 (筑波大), 竹延大志 (早大), “半導体単層カーボンナノチューブにおける両極性電場誘起スピ  
ン消失の ESR 直接観測” 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9  
月 7 日-10 日
105. 石山佑 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “欠陥を有する CNT の電界下での電子物  
性” 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月 7 日-10 日
106. 木暮聖太 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “ナノサターン:新奇 C60 包摂系の物質  
設計と電子物性解明”, 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月  
7 日-10 日
107. 小鍋哲 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバ  
レー分極緩和の理論的研究”, 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014  
年 9 月 7 日-10 日
108. 成田康平 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “電場による十重付加体 C60 のラジカル  
スピンの制御”, 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月 7 日-10  
日
109. 野村和哉 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “C60 ダイマー中の特異な水分子相対  
配向”, 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月 7 日-10 日
110. 山中綾香 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “電界によるグラフェンナノリボンへの自  
由電子注入”, 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月 7 日-10  
日
111. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “新奇2次元原子層物質の物質設計と  
物性解明”, 日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学、2014 年 9 月 7 日-10 日
112. 小鍋 哲(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバ  
レー分極緩和の理論的研究”, 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
113. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “Magnetic Ordering of Two-dimensional  
Networks of Fused C36 Polyhedra under an Electric Field” 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
114. 石山佑(筑波大), 岡田晋(筑波大), “種々の欠陥を有する CNT における電荷  
蓄積電圧のばらつき”, 日本物理学会 第 70 回年次大会、早稲田大学、2015 年 3  
月 21 日-24 日
115. 山中綾香(筑波大), 岡田晋(筑波大), “グラフェン端に出現する NFE 状態の電  
界方向依存性”, 日本物理学会 第 70 回年次大会、早稲田大学、2015 年 3 月 21  
日-24 日
116. 丸山実那(筑波大), 岡田晋(筑波大), “内部構造を有する原子層物質の電場  
による電子物性変調”, 日本物理学会 第 70 回年次大会、早稲田大学、2015 年 3  
月 21 日-24 日
117. 成田康平(筑波大), 岡田晋(筑波大), “十重付加体 C60 鎖の磁性状態”, 日本  
物理学会 第 70 回年次大会、早稲田大学、2015 年 3 月 21 日-24 日

③ ポスター発表 (国内会議57件、国際会議71件)

国際会議

1. Minoru Otani(産総研), Mikito Koshino (東北大), Yoshiteru Takagi (筑波大), and  
Susumu Okada (筑波大), “Spin polarization and magnetic phase control of graphite  
thin films” 11th International Conference on the Science and Application of  
Nanotubes (NT10), Montreal, June 27 - July 2, (2010).
2. Susumu Okada (筑波大), “Electronic structure of C59N-Encapsulated Carbon  
Nanotubes” 11th International Conference on the Science and Application of  
Nanotubes (NT10), Montreal, June 27 - July 2, (2010).

3. Takahiro Yamamoto (理科大), Takuma Shiga (東大), Satoru Konabe (筑波大), and Susumu Okada (筑波大), "Electronic and thermal properties of graphene-diamond hybrid structures" 11th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT10), Montreal, June 27 - July 2, (2010).
4. S. Konabe (筑波大), T. Shiga(東大), T. Yamamoto, J. Shiomi (東大), S. Maruyama (東大), S. Okada (筑波大), "Electronic and Thermal Properties of Graphene-Diamond Hybrid Structures", Recent Advances in Graphene and Related Materials, Singapore, August 1-6, (2010).
5. Yoshiteru Takagi (筑波大), Mikito Koshino (東北大), Minoru Otani(産総研), Susumu Okada (筑波大), "Magnetic moment on (0001) surfaces Rhombohedral graphite induced by edge states", Recent Advances in Graphene and Related Materials, Singapore, August 1-6, (2010)
6. S. Konabe (筑波大), T. Yamamoto and K. Watanabe, "Auger-Ionization and Photocurrents in Single-Walled Carbon Nanotubes", 11th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT10), Montreal, June 27 - July 2, (2010).
7. S. Konabe (筑波大), N. Onoda (東大), T. Yamamoto (理科大) and K. Watanabe (東大), " Auger-Recombination Induced Photocurrents in Carbon Nano-Materials", The 37th International Symposium on Compound Semiconductors, Takamatsu, May 31 (2010).
8. Susumu Okada (筑波大), Minoru Otani(産総研), "Electron-state Control of Hexagonal Boron Nitride: Carrier Injection into Inter-layer Band", The 37th International Symposium on Compound Semiconductors, Takamatsu, May 31 (2010).
9. Yoshiteru Takagi (筑波大), Susumu Okada (筑波大), "Electronic-state Modulation on Single-Walled Carbon Nanotube Adsorbed on Metal Surfaces", 37th International Symposium on Compound Semiconductors, Takamatsu, May 31 (2010).
10. Daisuke Hirai (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), and Satoshi Watanabe (東大), "AC Transport in Metallic Carbon Nanotubes with Single Monatomic Vacancy", Workshop on Simulation and Modeling of Emerging Electronics, (Hong Kong) December 8 (2010).
11. T. Nakanishi (産総研) and T. Ando (東工大), "Valley polarization in a mono- and bilayer graphene junction", Recent Advances in Graphene and Related Materials, Singapore, 2010.8.3.
12. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), Susumu Okada (筑波大), "Electronic structure of graphene adsorbed on (0001) surfaces of SiO<sub>2</sub> substrate", NT11 International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Cambridge, UK, 2011年7月10日
13. Satoru Konabe (筑波大), Susumu Okada (筑波大), "Spin-Related Novel Optical Phenomena in Single-Walled Carbon Nanotubes", 11th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT11), Cambridge, UK, 2011年7月12日.
14. Katsumasa Kamiya (筑波大), Naoto Umezawa (NIMS), Susumu Okada (筑波大), "Energetics and Electronic Structures of Graphene Adsorbed on HfO<sub>2</sub> Surfaces", 11th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT11), Cambridge, U.K. 2011年7月12日.
15. Katsumasa Kamiya (筑波大), Susumu Okada (筑波大), "Energetics and Electronic Structure of Encapsulated Single- Stranded DNA in Carbon Nanotubes", 12th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT11), Cambridge, UK, 2011年7月12日.

16. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), and Susumu Okada (筑波大), "Tunable Magnetic Properties of Rhombohedral Graphite Thin Films", 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011), Nagoya, 2011年9月28日
17. Susumu Okada (筑波大) and Takazumi Kawai (NEC), "Electronic Structure and Energetics of Corrugated Graphene Sheet" 2011 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2011), Nagoya, 2011年9月28日
18. Katsumasa Kamiya (筑波大), Naoto Umezawa (NIMS), and Susumu Okada (筑波大), "Electronic structure of graphene adsorbed on HfO<sub>2</sub> surfaces", 24th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, ANA hotel, Kyoto, 2011年10月25日.
19. Y.Takagi (筑波大) and S.Okada (筑波大), "Band-Gap Engineering of Hydrogen-Potassium Ternary Graphite Intercalation Compound Thin Films", 24th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, ANA hotel, Kyoto, 2011年10月26日.
20. Y.Takagi (筑波大) and S.Okada (筑波大), "Band-Gap Engineering of Hydrogen-Potassium Graphite Ternary Intercalation Compound Thin films" The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Tokyo, Japan, 2011年10月31日
21. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), and Susumu Okada (筑波大), "Origin of the n-type Transport Behavior of C59N Encapsulated Semiconducting Single Wall Carbon Nanotube", The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Tokyo, Japan, 2011年10月31日
22. Katsumasa Kamiya (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), "Energetics and Electronic Structures of Inserted Single-Stranded DNA into Single-Walled Carbon Nanotubes", Workshop on Carbon Nanotube in Commemoration of The 20th Anniversary of its Discovery ("2011-CNT20"), The International House of Japan, Tokyo, 2011年12月12日~13日.
23. S. Konabe (筑波大) and S. Okada (筑波大), "Multiple Exciton Generation by a Single Photon in Single-Walled Carbon Nanotubes" International Symposium on Surface Science (ISSS-6), Tokyo, 2011年12月14日
24. Teppei Kato (理科大), Shinji Usui (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), Edge Effects and Mechanical Deformation Effects on Thermoelectric Power of Graphene Nanoribbons, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC 2012), Kobe, Japan, 2012年11月1日
25. Yukihiro Takada (理科大), Kengo Takashima (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), Wave Packet Dynamics Simulations on Electronic Transport in Nano-carbon Materials, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference (MNC 2012) 、Kobe, Japan, 2012年10月31日
26. Daisuke Hirai (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Satoshi Watanabe (東大), Theoretical Analysis on Influence of Defects on AC Transport in Metallic Single-Walled Carbon Nanotubes, 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12)、Brisbane Convention & Exhibition Centre, Australia 、2012年6月28日
27. Derek A. Thomas (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Tomofumi Tada (東大), Satoshi Watanabe (東大), Non-equilibrium thermal transport simulation of conical carbon nanofiber nanostructures, 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12)、Brisbane Convention & Exhibition Centre,



- Australia、2012年6月25日
28. Susumu Okada (筑波大), “Electronic structures of graphene ribbons encapsulated in carbon nanotube”, 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24 – June 29, 2011, Brisbane.
  29. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, “Energetics and electronic structures of graphene corner edges”, 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24 – June 29, 2011, Brisbane.
  30. Katsumasa Kamiya (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Energetics and Electronic Structures of Amino Acid Residues Adsorbed on Carbon Nanotubes”, 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24 – June 29, 2011, Brisbane.
  31. Satoru Konaba (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Multiple exciton generation by a single photon in semiconducting single-walled carbon nanotubes”, 13th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT12), June 24 – June 29, 2011, Brisbane.
  32. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Properties of Carbon Nanotubes under the Electric Field”, 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2012), 国立京都国際会館、2012年9月25日-27日
  33. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Properties of Carbon Nanotubes under the Electric Field”, MNC2012, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2012年10月30日-11月2日, 神戸メリケンパーク (神戸市)
  34. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “New Elemental Semiconductors of Fused Small Fullerenes”, MNC2012, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2012年10月30日-11月2日, 神戸メリケンパーク (神戸市)
  35. Satoru Konabe (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Structures of Bilayer Graphene under Electric Field”, MNC2012, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2012年10月30日-11月2日, 神戸メリケンパーク (神戸市)
  36. Y. Tomita (筑波大), S. Okada (筑波大), “Topological line-defect induced band offset in hexagonal boron nitride”, MNC2012, 25th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, 2012年10月30日-11月2日, 神戸メリケンパーク (神戸市)
  37. Y. Tomita (筑波大), T. Nakayama (千葉大), S. Okada (筑波大), “First-principles Study of Atomic Impurity States in Organic Semiconductors: Their Chemical Classification”, The 31st International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2012), Zurich Switzerland, 2012年8月.
  38. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Anomalous Electric-Field Screening at the Edge Atomic Sites of Finite-Length Zigzag Carbon Nanotubes” 14th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT13), Aalto University (Espo), 2013年6月26日.
  39. Satoru Konabe (筑波大), Kazunari Matsuda (京大), and Susumu Okada (筑波大), “Suppression of Exciton-Electron Scattering in Doped Single-Walled Carbon Nanotubes” 14th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT13), Aalto University (Espo). 2013年6月27日.
  40. Nguyen Thanh Cuong (産総研), Minoru Otani (産総研), Susumu Okada (筑波大), “Tailoring electronic structure of MoS<sub>2</sub> by electrostatic doping” 14th International

- Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT13), Aalto University (Espoo), 2013 年 6 月 27 日.
41. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Magnetic Two-Dimensional  $sp^2$  Carbon Sheet of Fused Pentagons” 14th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT13), Aalto University (Espoo), 2013 年 6 月 27 日.
  42. Junki Sone (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Slow Dirac Electrons on Hexagonal Dangling Bond Networks on Hydrogen Deposited Diamond (111) and Si (111) Surfaces” 14th International Conference on the Science and Application of Nanotubes (NT13), Aalto University (Espoo), 2013 年 6 月 27 日.
  43. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Design of New Carbon Allotropes of Fused Small Fullerenes” The 40th International Symposium on Compound Semiconductors, Kobe Convention Center, Kobe, 2013 年 5 月 23 日.
  44. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electrostatic Potential of Hydrogenated Finite-length Carbon Nanotubes under an Electric Field” The 40th International Symposium on Compound Semiconductors, Kobe Convention Center, Kobe, 2013 年 5 月 22 日.
  45. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Two-dimensional  $sp^2$  Carbon Network of Fused Pentagons: All Carbon Ferromagnetic sheet” MNC2013, 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Sapporo, 2013 年 11 月 7 日.
  46. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Structural Dependence of Electronic Properties of Graphene Nanoribbons on an Electric Field”, MNC2013, 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Sapporo, 2013 年 11 月 7 日.
  47. Shota Kigure (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Energetics and Electronic Structures of  $C_{60}$  included within  $[n]$ Cyclacene Molecules” MNC2013, 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Sapporo, 2013 年 11 月 7 日.
  48. Daisuke Inotani (筑波大), Yoji Ohashi (慶大), and Susumu Okada (筑波大), “Collective Properties of Superconducting Graphene” MNC2013, 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Sapporo, 2013 年 11 月 7 日.
  49. Shota Kigure (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Dynamical Properties and Electronic Structure of  $C_{60}$  included  $[n]$ Cyclacene” ISANN 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, Poipu Beach, Kauai, 2013 年 12 月 11 日.
  50. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “A Two-dimensional Carbon Network of Fused Pentagons: All Carbon Magnetic Sheet” ISANN 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, Poipu Beach, Kauai, 2013 年 12 月 11 日.
  51. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Properties of Graphene under an Electric Field” ISANN 2013 International Symposium on Advanced Nanodevices and Nanotechnology, 2013 Poipu Beach, Kauai, 2013 年 12 月 11 日.
  52. T. Kato (理科大), S. Usui (理科大) and T. Yamamoto (理科大), “Ab-initio Study on Thermoelectric Power of CNT-thin Film” 26th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Royton Sapporo, 2013 年 11 月 10 日.
  53. Teppei Kato (理科大), Shinji Usui (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “DFT

- Study on Thermoelectric Power of SWNT Buckypapers” 2013 JSAP-MRS Joint Symposia, 同志社大学、京都, 2013年9月18日.
54. Kengo Takashima (理科大), Yukihiro Takada (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “Edge-Disorder effect on Electronic Transport in Graphene Nanoribbons, 2013 JSAP-MRS Joint Symposia, 同志社大学、京都, 2013年9月17日 .
  55. Masaaki Araidai (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), Kenji Shiraishi (理科大), “First-Principles Study on Current-Induced Magnetization Switching in Magnetic Tunnel Junctions” 19th International Vacuum Congress (IVC-19), Paris, France, 2013年9月11日.
  56. Kengo Takashima (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “Computational Simulation on Electronic Transport in Edge-Disordered Graphene Nanoribbons” 19th International Vacuum Congress (IVC-19), Paris, France, 2013年9月10日.
  57. Teppei Kato (理科大), Shinji Usui (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “First-Principles Simulation on Thermoelectric Properties of Carbon Nanotube Thin Films” The 32nd International Conference on Thermoelectrics (ICT2013), 神戸市、2013年7月2日.
  58. Teppei Kato (理科大), Shinji Usui (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “Simulation on thermoelectric power of SWNT buckypapers” NT13: The Fourteenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Aalto University, Espoo, 2013年6月27日.
  59. Yukihiro Takada (理科大), Takahiro Yamamoto (理科大), “Impurity Effects on Electronic Transport in Carbon Nanotubes: Wave Packet Dynamics Simulation” NT13: The Fourteenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Aalto University, Espoo, 2013年6月27日.
  60. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Properties of Graphene under an Electric Field”, International Conference of Synthetic Metals, June 30 -- July 5 (2014), Turku.
  61. Shota Kigure (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Energetics and Electronic Structures of CNT Encapsulating PAH Molecules”, International Conference of Synthetic Metals, June 30 -- July 5 (2014), Turku.
  62. Hideyuki Jippo (富士通), Susumu Okada (筑波大), and Mari Ohfuch (富士通), “First-principles electronic transport calculations of graphene with metal electrodes”, The 7th International Symposium on Surface Science, Matsue, (November, 2-6, 2014).
  63. U Ishiyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Threshold Voltage Variation for Charge Accumulation in CNT Due to the Monatomic Defect Arrangement”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014).
  64. Shota Kigure (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Nano-Saturn : Theoretical Design of New C60 Inclusion Compounds”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014).
  65. Mina Maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Geometric and Electronic Structures of Polymerized C32 Fullerene”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014). Kohei Narita and Susumu Okada, “Spin-State Tuning of Decamethyl C60 by an Electric Field”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014).
  66. Hideyuki Jippo (富士通), Susumu Okada (筑波大), and Mari Ohfuchi (富士通), “First-Principles Study on the Contact Problem of 10 nm Graphene Channel

- Devices”, MNC2014, 27th International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, (November, 5-7, 2014).
67. Kohei Narita (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Spin-state Tuning of Decamethyl C60 by an Electric Field”, International Symposium on the Functionality of Organized Nanostructures (FON '14), Miraikan, Tokyo (November 26-28, 2014).
68. U Ishiyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic structure of carbon nanotubes with monovacancy under an electric field”, International Symposium on the Functionality of Organized Nanostructures (FON '14), Miraikan, Tokyo (November 26-28, 2014).
69. Ayaka Yamanaka (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Properties of Graphene under an Electric Field”, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Univ. Tokyo, Tokyo (December 1-3, 2014)
70. Mina maruyama (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Electronic Structures of Two-dimensional sp<sup>2</sup> Carbon Networks of Fused Pentagon Trimers”, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Univ. Tokyo, Tokyo (December 1-3, 2014)
71. Satoru Konabe (筑波大) and Susumu Okada (筑波大), “Exciton many-body physics in carbon nanotubes”, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Univ. Tokyo, Tokyo (December 1-3, 2014)
- 国内会議
72. 千葉奨(筑波大)、岡田晋(筑波大), “金属ドーブフラーレンポリマーの電子状態”, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (名城大学, 名古屋市)2010 年 3 月 4 日
73. Donghui Guo (筑波大), Takahiro Machida (筑波大), Takahiro Kondo (筑波大), Junji Nakamura (筑波大):STM/STS investigation of graphite modified by potassium intercalation, 真空・表面科学合同講演会(第 30 回表面科学学術講演会+第 51 回真空に関する連合講演会)大阪大学コンベンションセンター(大阪), 2010.11.4-6
74. 町田考洋 (筑波大), 郭東輝 (筑波大), 近藤剛弘 (筑波大), 中村潤児 (筑波大):カリウムを蒸着したグラファイト表面の極低温走査トンネル分光計測, 表面・界面スペクトロスコープ2010, 筑波山京成ホテル, 2010.12.3-4
75. Donghui Guo (筑波大), Takahiro Kondo (筑波大), Takahiro Machida (筑波大), Keigo Iwatake (筑波大), Junji Nakamura (筑波大):Observation of Landau levels from K partially intercalated HOPG under zero magnetic fields, 表面・界面スペクトロスコープ2010, 筑波山京成ホテル, 2010.12.3-4
76. S. Konabe (筑波大) and S. Okada (筑波大), “Optically Activated Triplet Excitons in Single-Walled Carbon Nanotubes”, 第 39 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (京都大学)2010 年 9 月 5 日-7 日.
77. Susumu Okada (筑波大) and Toshiya Okazaki (産総研), “Energetics and Electronic Structure of Carbon Nanotubes Encapsulating C59N”. 第 39 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (京都大学)2010 年 9 月 5 日-7 日.
78. 大窪清吾 (産総研), 岡崎俊也 (産総研), 廣瀬香里 (産総研), 末永和知 (産総研), 岡田晋 (筑波大), 坂東俊治 (名城大), 飯島澄男 (産総研), “楕円形 C70 を内包した単層カーボンナノチューブの電子状態”, 第 39 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (京都大学)2010 年 9 月 5 日-7 日.
79. 神谷克政 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “一本鎖 DNA 内包単層カーボンナノチューブのエネルギ論と電子構造”, 第 39 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (京都大学)2010 年 9 月 5 日-7 日.
80. 丸山実那 (筑波大)、岡田晋 (筑波大), “C32 固体の構造と電子状態” 第 42 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, 東京大学(東京)2011 年 3 月

- 6日-8日
81. 山中綾香 (筑波大)、岡田晋 (筑波大), “電界下におけるカーボンナノチューブの電子物性”第 42 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, 東京大学(東京)2011年3月6日-8日
  82. 岡田晋 (筑波大), “コロネンポリマーを内包したナノチューブの電子状態” 第 42 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, 東京大学(東京)2011年3月6日-8日
  83. 神谷克政 (筑波大)、岡田晋 (筑波大), “ダイヤモンドナノ粒子の原子構造と電子構造”, 第 42 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, 東京大学(東京)2011年3月6日-8日
  84. 高木祥光 (筑波大)、岡田晋 (筑波大), “イオン層コートによる2層グラフェンの半導体化” 第42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, 東京大学(東京)2011年3月6日-8日
  85. Daisuke Hirai (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Satoshi Watanabe (東大), Effect of Impurity Scattering on AC Transport in Carbon Nanotubes, 第 44 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, 東京大学・伊藤国際学術研究センター・謝恩ホール・東京, 2013年3月11日
  86. 船谷 宜嗣 (神戸大), 山本 貴博(理科大), 小川 真人 (神戸大), 相馬 聡文 (神戸大), グラフェンの機械的変形が熱物性に与える影響, 第 44 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, 東京大学・伊藤国際学術研究センター・謝恩ホール・東京, 2013年3月12日
  87. 木暮 聖太 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “短いCNTに内包されたC60のエネルギー論と電子構造”, 第 44 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, 東京大学(東京)2013年3月11日-13日
  88. 曾根 準基 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “部分的に水素終端されたダイヤモンド構造(111)面における線形分散バンド”, 第 44 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, 東京大学(東京)2013年3月11日-13日
  89. 新夕 晴奈 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “十重付加体フラーレンの磁性状態”, 第 44 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, 東京大学(東京)2013年3月11日-13日
  90. 山中 綾香 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “平行電界によって電荷が蓄積されたキャップ付きカーボンナノチューブの電子物性”, 第 44 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, 東京大学(東京)2013年3月11日-13日
  91. 丸山 実那 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “2次元金属炭素同素体の物性”, 第 44 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, 東京大学(東京)2013年3月11日-13日
  92. 岡田 晋 (筑波大), 山本 貴博 (理科大), “ラジカルを有するフラーレンのスピ状態”, 第 44 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, 東京大学(東京)2013年3月11日-13日
  93. 丸山実那 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “C26 からなる二次元炭素結晶相の構造と電子状態”, 第 43 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, 東北大学(仙台)2012年9月5日-7日
  94. 山中綾香 (筑波大), 岡田晋 (筑波大), “電界下における水素終端カーボンナノチューブの静電ポテンシャル”, 第 43 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, 東北大学(仙台)2012年9月5日-7日
  95. 小鍋 哲 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “単層カーボンナノチューブの多重励起子生成による光電流”, 第 43 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, 東北大学(仙台)2012年9月5日-7日
  96. 富田 陽子 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “トポロジカル欠陥のある六方晶系窒

- 化ホウ素の電子構造”, 第 43 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, 東北大学(仙台)2012 年 9 月 5 日-7 日
97. 岡田 晋 (筑波大), “C60 がドーピングされた固体シリコンのエネルギー論と電子状態”, 第 45 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, 大阪大学(豊中市) 2013 年 8 月 6 日.
  98. 丸山 実那 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “5 員環からなる 2 次元 sp<sup>2</sup> 炭素結晶の電子構造” 第 45 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, 大阪大学(豊中市), 2013 年 8 月 7 日
  99. 山中 綾香 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “電界下におけるグラフェンの電子物性” 第 45 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, 大阪大学(豊中市), 2013 年 8 月 7 日.
  100. 猪谷 太輔 (筑波大), 大橋 洋士 (慶大), 岡田 晋 (筑波大), “超伝導グラフェンにおける集団励起” 第 45 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, 大阪大学(豊中市), 2013 年 8 月 8 日.
  101. 木暮 聖太 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “C60 を内包した[n]シクラセンの生成過程のエネルギー論” 第 45 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, 大阪大学(豊中市), 2013 年 8 月 7 日.
  102. 洗平昌晃 (名大), 山本貴博 (理科大), 白石賢二 (名大), “磁気抵抗メモリの電流誘起磁化スイッチングに関する第一原理計算” 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013 年 9 月 26 日.
  103. 笹岡健二 (神戸大), 山本貴博 (理科大), 渡邊聡 (東大), “時間依存平均場を考慮した非平衡グリーン関数法による過渡電流シミュレーション” ナノカーボン材料の熱電物性シミュレーションと熱電変換材料としての可能性, 東京理科大学・森戸記念会館, 2013 年 6 月 20 日.
  104. Derek Ashley Thomas (東大), Takahiro Yamamoto (理科大), Tomofumi Tada (東工大), Satoshi Watanabe (東大), “Theoretical study of thermoelectric properties of conical carbon nanofibers”, ナノカーボン材料の熱電物性シミュレーションと熱電変換材料としての可能性, 東京理科大学・森戸記念会館, 2013 年 6 月 20 日.
  105. 船谷宜嗣 (神戸大), 山本貴博 (理科大), 小川真人 (神戸大), 相馬聡文 (神戸大), “歪み印加によるグラフェンの熱物性制御に関する研究” ナノカーボン材料の熱電物性シミュレーションと熱電変換材料としての可能性, 東京理科大学・森戸記念会館, 2013 年 6 月 20 日.
  106. 本間 直樹 (理科大), 千足 昇平 (東大), 本間 芳和 (理科大), 山本 貴博 (理科大), “水蒸気雰囲気下 SWNT の RBM 振動数の直径依存性” 第 46 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, 東京大学 伊藤国際学術研究センター 伊藤謝恩ホール, 2014 年 3 月 4 日.
  107. 高島 健悟 (理科大), 藤井 宏武 (理科大), 山本 貴博 (理科大), “半導体グラフェンナリボンの電子輸送におけるエッジラフネス効果” 第 46 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” 東京大学 伊藤国際学術研究センター 伊藤謝恩ホール, 2014 年 3 月 3 日.
  108. 野村 和哉 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “水分子を内包した C60 ダイマーのエネルギー論” 第 46 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, 東京大学(東京), 2014 年 3 月 3 日.
  109. 小鍋 哲 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “単層遷移金属ダイカルコゲナイドにおける励起子消滅” 第 46 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, 東京大学(東京)2014 年 3 月 4 日.
  110. 成田 康平 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “電界による十重付加体 C60 のスピンの制御” 第 46 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, 東京大学(東京), 2014 年 3 月 4 日.

111. 丸山 実那 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “C32 ポリマーの安定構造と電子状態” 第 46 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, 東京大学(東京), 2014 年 3 月 4 日.
112. 木暮 聖太 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “多環芳香族炭化水素分子を内包したカーボンナノチューブのエネルギー論と電子状態” 第 46 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, 東京大学(東京), 2014 年 3 月 5 日.
113. 石山 佑 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “電荷蓄積された欠陥を有する CNT の電子状態” 第 46 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, 東京大学(東京), 2014 年 3 月 5 日.
114. 山中 綾香 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “グラフェン端のエネルギー論と電子状態” 第 46 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, 東京大学(東京), 2014 年 3 月 3 日.
115. 石山 佑 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “欠陥を有する CNT の電界下での電子物性” 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
116. 山中 綾香 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “電界によるグラフェンナノリボンへの自由電子注入” 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
117. 丸山 実那 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “C36 をユニットとした二次元新奇炭素結晶相の物質設計”, 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
118. 木暮 聖太 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “ナノサターン: 新奇 C60 包摂系の物質設計”, 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
119. 成田 康平 (筑波大), 岡田 晋 (筑波大), “十重付加体 C60 鎖の磁性状態”, 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
120. Nguyen Thanh CUONG (産総研), Minoru OTANI (産総研), Susumu OKADA (筑波大), “Electronic Structure of Graphene Wrinkles Induced by Ni Substrate”, 第 47 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, 名古屋大学(名古屋)2014 年 9 月 3 日-5 日
121. 石山 佑(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “電界下における CNT 薄膜の電子物性”, 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
122. 成田 康平(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “コランニユレンポリマーの構造と電子構造”, 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
123. 木暮 聖太(筑波大), 大町 遼(名大), 篠原 久典(名大), 岡田 晋(筑波大), “ナノサターンのエネルギー論”, 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
124. 反町 純也(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “電場下における水内包フラーレンのエネルギー論”, 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
125. 金橋 魁利(早稲田大), 蒲 江(早稲田大), Nguyen Thanh Cuoug(産総研), Lain-Jong Li (KAUST), 岡田 晋(筑波大), 太田 裕道(北大), 竹延 大志(早稲田大), “単層遷移金属ダイカルコゲナイドのゼーベック効果”, 第 48 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, 東京大学(東京)2015 年 2 月 21 日-23 日
126. 實宝 秀幸(富士通), 岡田 晋(筑波大), 大淵 真理(富士通), “金属電極間に架橋されたグラフェンの電気伝導特性”, 第 48 回フラーレン・ナノチューブ・グラフ

- エン総合シンポジウム, 東京大学(東京)2015年2月21日-23日
127. 岸本 健(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “欠陥グラフェン吸着によるグラフェンのバンドギャップ形成”, 第48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, 東京大学(東京)2015年2月21日-23日
128. 山中 綾香(筑波大), 岡田 晋(筑波大), “グラフェンナノリボンの NFE 状態に対する局所電界効果”, 第48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, 東京大学(東京)2015年2月21日-23日

#### (4)知財出願

##### ①国内出願 (2件予定)

1. 光電変換素子、太陽電池及び光センサー、小鍋哲、岡田晋、国立大学法人筑波大学、26年9月9日、特願 2014-183372
2. 記憶装置及びその製法、Nguyen Thanh Cuong、大谷 実、宮本良之、独立行政法人産業技術総合研究所、26年1月9日、特願 2015-003554

#### (5)受賞・報道等

##### ①受賞

- \*日本物理学会若手奨励賞、小鍋哲、2013年3月
- \*MNC 2012 Young Author's Award, 小鍋哲、2013年11月

##### ②マスコミ(新聞・TV等)報道

- 日刊工業新聞、“絶縁体基板にグラフェン吸着 産総研が機構解明”、2011年12月7日
- 化学工業日報、“酸化シリコン基板 グラフェン強く吸着”、2011年12月7日
- 日経産業新聞、“グラフェン製膜条件 計算”、2011年12月7日

上記3報は絶縁体表面(SiO<sub>2</sub>)上に吸着されたグラフェンの基礎物性の解明をおこなったものであり、その吸着機構、吸着による電子物性の変調を報告し、基板の影響がグラフェンの基礎物性に大きな影響を与える可能性があることを世界に先駆けて報告したものである。

- 日経産業新聞、“ナノチューブ太陽電池:シリコン上回る計算”、2012年5月30日

カーボンナノチューブにおいて、その次元性に起因する強いクーロン相互作用効果がナノチューブにおいて、用意に1光子で複数個の励起子を生成することが可能であることを示したものである。すなわち、ナノチューブを用いた高効率光電変換素子実現の鍵となることを示したものである。

- 日刊工業新聞、“グラフェンの半導体化:シミュレーションで解明”、2012年12月3日

2層グラフェンの表面へのイオン性分子吸着により、簡便かつ安価に半導体化グラフェン実現の可能性を提示した。さらに、イオン種の選択的吸着により、半導体化グラフェンの極性の制御も可能であることを示した。

- 日経産業新聞, “疎水性物質に水の層-筒状炭素分子で発見” 2013年4月10日
- 科学新聞, “疎水性のCNT 水で薄く濡れていた!”, 2013年4月26日.

本来疎水性と考えられていた CNT の表面において、水分子を吸着させると吸着した水分子は



CNTをラップするように筒状の水素結合ネットワークを形成し、水分子により“濡れ“つことをシミュレーションにより明らかにした。

## § 5 研究期間中の活動

### 5.1 主なワークショップ、シンポジウム、アウトリーチ等の活動

《チーム主催のワークショップ、シンポジウム、小中高での特別授業、地域での講演、研究機関の一般公開での講演、その他チーム内ミーティング(主なもの)を行った場合、月日、名称、場所、参加人数、目的や内容などを記入してください。なお、チーム内ミーティング等、一般公開でないものは、名称のあとに(非公開)と記載して下さい。》

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2010年12月27日-28日	ナノカーボン物質の基礎と応用	筑波大学	88人	ナノカーボン物質の現状と展望に関する研究会
24年8月7日	グラフェンの材料開発に向けた基礎と応用	筑波大学	100人	グラフェンの材料開発に関する現状の討論

## § 6 最後に

《研究の目標等から見た達成度、得られた成果の意義等の自己評価、今後の研究の展開、研究代表者としてのプロジェクト運営について(チーム全体の研究遂行、研究費の使い方等)、その他自由に記入してください。また、公開して良い研究室の雰囲気や伝わるようなメンバーの集合写真、実験室や作製した主な研究設備のスナップ写真等あれば添付してください。》

本プロジェクトでは、グラファイト系材料と広義異種物質からなる複合構造体に着目し、複合構造形成下におけるグラファイト系材料の基礎物性の詳細を明らかにすることにより、グラファイト系材料のような低次元ナノ物質の関わる界面現象に対する知見の蓄積を行い、その学理の構築を行うことを第一の目的とし、その学理を基盤にグラファイト系材料の各種デバイス応用の可能性の探索とデバイス構造の設計指針の開発を行うことが最終の目標である。前者の目標に対し、量子論に立脚した計算科学の手法を用いて、グラファイト系材料の電子物性、特に低エネルギー電子物性が各種異種物質の環境擾乱に対して非常に脆弱であることを世界に先駆けて報告し、グラファイト系材料の各種応用においては、複合構造による物性変調を考慮に入れたデバイス構造の設計が必要であることを示した。このような点において、我々は本目標を達成したと評価出来る。一方、最終目標に対しては、特にグラフェンの高い伝導特性を有する安定な半導体化方策の開発にて間取り、半導体集積化デバイス応用を目指したデバイス構造の完全な設計指針の提示を行えなかった。しかしながら、それに向けた前段階として、簡便かつ安価な半導体化グラフェン合成方法の開発を行い、同時に半導体化グラフェンの極性制御方法も提示した。従って、100%ではないが概ね当初の目標を達成したものである。さらに、半導体集積化デバイスとは別に、グラファイト系材料の次元性に起因する強いクーロン相互作用効果を用いた高効率光電変換素子のデバイス構造の設計指針の開発を光電変換メカニズムと光電流生成メカニズムの両点に対するミクロスコピックな理論の解明することにより行った。この成果は当初計画/目標から外れるが、これからの環境持続型社会実現の鍵となる基盤技術としての実用化が期待されるものである。

