

## 先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム) 実績報告書

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	窒化物半導体との融合を目指したエピタキシャルニホウ化物薄膜の表面・界面研究
研究機関・ 部局・職名	北陸先端科学技術大学院大学・マテリアルサイエンス研究科・准教授
氏名	高村 由起子(山田由起子)

1. 研究実施期間 平成23年2月10日～平成26年3月31日

2. 収支の状況

(単位:円)

	交付決定額	交付を受けた額	利息等収入額	収入額合計	執行額	未執行額	既返還額
直接経費	112,000,000	112,000,000	0	112,000,000	112,000,000	0	0
間接経費	33,600,000	33,600,000	0	33,600,000	33,600,000	0	0
合計	145,600,000	145,600,000	0	145,600,000	145,600,000	0	0

3. 執行額内訳

(単位:円)

費目	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	合計
物品費	879,112	1,810,606	54,119,100	10,952,535	67,761,353
旅費	0	299,870	1,265,300	2,240,084	3,805,254
謝金・人件費等	72,830	5,992,997	13,844,632	13,849,835	33,760,294
その他	0	1,294,895	2,597,224	2,780,980	6,673,099
直接経費計	951,942	9,398,368	71,826,256	29,823,434	112,000,000
間接経費計	285,582	23,288,418	5,313,000	4,713,000	33,600,000
合計	1,237,524	32,686,786	77,139,256	34,536,434	145,600,000

4. 主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関名
easyScan 2-STM System Special	ナノサーフ社製	1	1,298,915	1,298,915	2011/10/18	北陸先端科学技術大学院大学
ソフトウェアCD(CRISP software for HRTEM image processing)	CRISP software for HRTEM image processing	1	614,013	614,013	2012/5/14	北陸先端科学技術大学院大学
超高真空高温走査プローブ顕微鏡システム	VTSTM100-DRH MPC、MATRIX	1	44,625,000	44,625,000	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
スペクトルリード(4-grid SPECTRALEED 254mm)	4-grid、254mm、B002921	1	2,151,660	2,151,660	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
ソフトウェア(Electronics and software for Auger Spectroscopy)	B002972	1	2,838,360	2,838,360	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
リードファンシャッター(LEED fan Shutter)	B002744	1	574,980	574,980	2013/3/27	北陸先端科学技術大学院大学
赤外線放射温度計	KTL-PRO-04(300~2000℃)	1	527,310	527,310	2013/5/7	北陸先端科学技術大学院大学
PIXcel1D 検出器	スペクトリス株式会社製	1	3,441,532	3,441,532	2013/7/29	北陸先端科学技術大学院大学
顕微鏡用デジタルカメラ	DS-Ri1-U3	1	1,336,581	1,336,581	2013/10/24	北陸先端科学技術大学院大学

様式20

残留ガス分析計(Windows用ソフト付)	RGA100型	1	651,000	651,000	2013/12/24	北陸先端科学技術大学院大学
-----------------------	---------	---	---------	---------	------------	---------------

5. 研究成果の概要

省エネ・低環境負荷を実現する固体照明用発光素子の高効率化基板として導電性と除熱に優れた二ホウ化物を被覆したシリコンウェハを使用する目的でその表面・界面構造を、最先端顕微鏡技術を駆使して原子・元素レベルで明らかにした。その結果、欠陥の少ない導電性基板として高品質窒化物薄膜の成長に寄与することが期待される、より単結晶配向かつ平坦な二ホウ化物薄膜の成長に成功した。また、この薄膜上にケイ素版グラフェンといえる全く新しい二次元材料「シリセン」が自己組織的に形成されているのを発見した。この究極的に薄いシリコンの同素体は、微細化が進む従来の電子素子を超越した素子を実現するための材料として期待される。

課題番号

GR046

## 先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム) 研究成果報告書

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名 (下段英語表記)	窒化物半導体との融合を目指したエピタキシャルニホウ化物薄膜の表面・界面研究 Surface and interface studies of epitaxial diboride thin films for integration with nitride semiconductors
研究機関・部局・ 職名 (下段英語表記)	北陸先端科学技術大学院大学・マテリアルサイエンス研究科・准教授 Japan Advanced Institute of Science and Technology・School of Materials Science・Associate Professor
氏名 (下段英語表記)	高村 由起子(山田由起子) Yukiko Yamada-Takamura

### 研究成果の概要

(和文):

省エネ・低環境負荷を実現する固体照明用発光素子の高効率化基板として導電性と除熱に優れたニホウ化物を被覆したシリコンウェハーを使用する目的で、その表面・界面構造を最先端顕微鏡技術を駆使して原子・元素レベルで明らかにした。その結果、欠陥の少ない導電性基板として高品質窒化物薄膜の成長に寄与することが期待される、より単結晶配向かつ平坦なニホウ化物薄膜の成長に成功した。また、この薄膜上にケイ素版グラフェンといえる全く新しい二次元材料「シリセン」が自己組織的に形成されているのを発見した。この究極的に薄いシリコンの同素体は、微細化が進む従来の電子素子を超越した素子を実現するための材料として期待される。

(英文):

In order to utilize diboride thin films grown on Si wafers as electrically and thermally conductive substrate for efficient solid-state lighting devices, the surface and interface structures were studied by cutting-edge microscopic techniques at atomic and elemental resolutions. As a result, the growth of single-crystalline diboride films with less misoriented crystals was achieved. In addition, Si-version graphene "silicene" was found to spontaneously form on diboride films grown on Si wafers. This ultimately thin form of Si is expected to contribute to future nanoelectronics.

1. 執行金額 145,600,000 円  
(うち、直接経費 112,000,000 円、間接経費 33,600,000 円)

2. 研究実施期間 平成23年2月10日～平成26年3月31日

### 3. 研究目的

発光ダイオード(LED)を使用した固体照明は、熱フィラメントや水銀蒸気の放電を使用した従来の照明方法と比較して寿命やエネルギー効率、安全性に優れるため、一般照明用として広く使用される様になれば、世界のエネルギー消費量の削減に大きく寄与すると期待されている。現在、白色 LED の発光効率は、従来法では最も効率に優れる蛍光管に匹敵するまでに向上しており、その上、1980 年代からほとんど効率の向上が見られない蛍光管と異なり、更なる高効率化の可能性を残している。

白色 LED に使用されている主な半導体材料は、バンドギャップの広い窒化ガリウム(GaN)であるが、経済的なホモエピタキシャル基板が存在しないため、格子整合性が悪く、絶縁体である単結晶サファイアを成長基板とした素子が実用に供されている。サファイア基板の問題は電気と熱の伝導性が低い点にある。このため、電極を横に並べた素子構造になってしまい、光の取り出し効率が悪く、また電極配置と放熱の悪さから大電流を流しにくい。縦型素子を作製しようとする化学的あるいは物理的にサファイアから窒化物膜を剥がして、熱及び電気伝導性に優れた材料に貼付ける工夫が必要になる。シリコン(ケイ素)や炭化ケイ素といった電気・熱伝導性に優れた基板への GaN 成長も行われているが、格子整合性の悪さと導電性緩衝(バッファ)層の欠如、及びサファイア上ほど成長研究が行われていないことから、高品質膜が得られていないのが現状である。

グリーン・イノベーションを実現する高輝度・高効率白色 LED 実現のためには、格子整合性に優れ、電気及び熱の伝導性に優れた成長基板が望まれており、本研究課題ではこの新しい成長基板の開発と、その上の窒化物半導体膜の成長及び高品質化を目的とする。

### 4. 研究計画・方法

GaN との格子整合性に優れる二ホウ化ジルコニウム( $ZrB_2$ )は、融点が高く、硬くて脆い導電性セラミックスであり、単結晶のままでは大面積化や切削・研磨など基板として使用するにあたって克服すべき問題点が多い。本研究では、超高真空化学気相エピタキシー法を用いた高純度気体原料からの二ホウ化物薄膜成長を安価かつ大面積化が容易なシリコン(Si)ウェハーなどを基板として行い、我々が特に得意とする走査プローブ顕微鏡などの最先端顕微鏡技術を駆使して薄膜成長表面の系統的なその場観察と第一原理計算を進め、表面・界面の観点から薄膜の微視的成長機構を解明し、プロセスの高度化とバッファ層としての薄膜の高品質化を目指す。また、得られた単結晶配向二ホウ化物薄膜上の窒化物の生成・成長過程の原子レベルでの観察と考察を行い、二ホウ化物薄膜表面の選択的窒化による不活性化を利用した窒化物結晶の横方向成長によ

る欠陥の低減を目指す。

## 5. 研究成果・波及効果

Si 基板上の  $ZrB_2$  薄膜表面を走査トンネル顕微鏡 (STM) により高分解能観察して得られた知見をもとに、窒化物半導体薄膜成長に適した(0001)面の面積が広く、より単結晶配向した薄膜を得ることに成功した[査読有論文 3]。また、(0001)面上には、基板から薄膜表面に拡散した Si が、室温で原子一層厚みのグラフェン状の二次元結晶「シリセン」を自発的に形成していることが明らかになり[査読有論文 6]、その特異な結合状態[査読有論文 1, 2, 5]に起因して表面を不活化していることが明らかとなった。薄膜表面における Si の存在は、放射光施設における光電子分光により高い温度においても確認され、この Si 層の働きにより、薄膜原料の反応と成長は主にテラス端で起こり、広い(0001)面が形成されることが明らかとなった。一方、(0001)面が基板と平行ではない異配向の結晶粒は、(0001)面からなるテラスが基板面内方向に一様に成長するのに対して、成長方向に異方性があり、成長端が小さいのが特徴である。(0001)面テラスの成長端の大きさと比較した異配向結晶粒の成長端の小ささと、テラス上の核生成の Si 層による抑制を利用して薄膜成長条件を最適化した結果、冒頭に記した成果が得られた。

また、二ホウ化物薄膜表面の高温における窒化プロセスによりエピタキシャルに形成される不活性な窒化物層について、Si 層の存在という新たな知見を含めてこのプロセスを見直し、窒化過程を実験的に詳細に分析した。その結果、処理温度を最適化することで Si を含まない六方晶窒化ホウ素 (hBN) 層が形成されることが光電子分光の結果などから確認された。hBN と  $ZrB_2$  の格子の組み合わせから形成されるモアレ構造の STM 観察に初めて成功し、その像をもとに界面構造モデルを構築することが可能となった。格子不整合な組み合わせなので大規模計算が必要であったが、hBN/ $ZrB_2$  界面の第一原理電子状態計算を行うことが出来た。これらの成果をもとに付加元素による hBN の不安定化のメカニズムに迫り、その性質を積極的に利用して窒化物半導体薄膜の高品質化を達成する。

本研究課題では、全く新しい試みとして、熱応力による GaN 層のクラック発生を防止する目的で、Si よりも GaN と  $ZrB_2$  の双方と熱膨張係数の整合性に優れるゲルマニウム (Ge) ウェハを基板とした  $ZrB_2$  薄膜のエピタキシャル成長も試みた。 $ZrB_2$  の Ge への濡れ性は良好で、成長条件を最適化することで単結晶  $ZrB_2$ (0001)配向膜を得ることに成功した。X 線回折を用いてこの薄膜の構造解析を行った結果、Si ウェハを基板として成長した  $ZrB_2$  薄膜で生成したような異配向結晶は認められなかった。現在、この良好な配向性の原因となっている界面構造を透過電子顕微鏡観察により明らかにしつつある。Ge 基板上の  $ZrB_2$  薄膜表面にも基板からの Ge の拡散が認められたが、Si を基板とした場合と異なり、原子一層分より厚い層が形成されていた。そのせいか、 $ZrB_2$  薄膜の成長が強く抑制され、膜厚が 10nm を超える単結晶配向膜の成長には、いまだに成功していない。今後、Si を基板とした場合と同様に、この薄膜表面の窒化プロセスを明らかにし、GaN 薄膜成長基板としての可能性を探る。

本研究課題で得られた研究成果の中で、科学的に最も波及効果が大きかったのが、Si ウェハ

一上  $ZrB_2$  薄膜表面に自己組織的に形成される Si 版グラフェン「シリセン」の発見である。本研究課題では、二ホウ化物の単結晶では観察されたことのない、Si ウェハを基板としたときにのみ二ホウ化物薄膜表面に現れる再構成構造に着目し、その構造、組成、電子状態を実験と第一原理計算から詳細に調べた結果、この成果を挙げることができた。二ホウ化物薄膜成長に関しては、シリセンはサーファクタント(平坦性を促進する)ともアンチサーファクタント(薄膜成長速度を著しく低下させる)とも言える役割を果たしているが、世界中から注目を集めたのは、シリセンそのもののグラフェンを超える「二次元材料」としての性質で、平成 25 年度戦略目標の中でも取り上げられている。この成果により、我々は、実験的に得られたシリセンの構造と電子状態を世界で初めてほぼ同時に明らかにした二つの研究グループのうちの一つとなることができた。二つのグループによる独立の研究は「二ホウ化物薄膜上のシリセン」と「銀単結晶上のシリセン」という二つの異なる材料系で行われたが、我々の系は高品質二ホウ化物薄膜を成長できるのは世界でも我々のグループだけのため追実験が難しく、後追いで実験を始めた世界中のグループは、ほとんど後者の系に取り組んでいる。我々の系は、独自性が高すぎて我々にしか研究が進められないわけであるが、共同研究を希望する方には薄膜試料を提供しており、現在、共同研究の環は国内の大学だけでなく、米国、英国、オランダに広がっている。この「二ホウ化物薄膜上のシリセン」に関する最初の論文[査読有論文 6]が *Physical Review Letters* 誌に掲載されてから二年が経過したが、被引用数は 160 を超え、この成果のインパクトと波及効果の大きさを感じている。シリセンは現在半導体素子に多用されるダイヤモンド構造を持つシリコンの究極的に薄い同素体であり、今後二次元材料の研究が進むことで、微細化の限界が見えてきた従来の電子素子を超越した全く新しい素子の実現が期待される。

一方、二ホウ化物薄膜上で二次元状 Si「シリセン」がサーファクタント(またはアンチサーファクタント)として機能していることを発見したことによる波及効果も大きいことが期待される。Si は、III-V 族系、III-N 系半導体で基板やドーパントとして使用されることが多く、昔からそれらの薄膜の再構成構造や、Si ドープ量の増減に伴うナノ構造物の形態の変化などがそのメカニズムは不明のまま報告されていた。我々は放射光施設を含む最先端顕微鏡技術を用いてこれをつきとめたが、我々の成果に則して考えれば、これらの材料系にも同様に詳細な分析を施せば、表面に存在する Si(「シリセン」である可能性もある)が表面エネルギーを変化させ、ナノ構造の形態を決定するのに大きな役割を果たしていることが明らかとなり、ナノワイヤーやナノドットなどのナノ構造の形成機構の理解がより深まる可能性がある。

ワイドギャップ半導体を用いた発光ダイオードによる固体照明は、電気から可視白色光への変換効率が 50%に近づいており、現在主流の白熱灯や蛍光灯などの伝統的な照明器具にとって代わることで、世界のエネルギー消費量の削減に大きく寄与すると考えられている。この固体照明用発光素子の更なる高効率化・高輝度化を妨げているのが、窒化物薄膜の成長基板である単結晶サファイアである。サファイアは絶縁性であるため、デバイスのデザインは電極を膜表面上に横に配置したものにならざるを得ず、光の取り出しや電流パスの制限といった問題が生じる。導電性の成長基板を使用すれば、電極を縦(薄膜表面と基板)に配置した素子が可能となり、高効率化

が達成されるが、サファイア上ほど高品質の窒化物薄膜を成長できる導電性成長基板が存在しないのが現状である。格子整合性の良くないシリコンなどを成長基板とする場合にその導電性を活かすには、窒化物薄膜と基板との間のバッファ層が導電性である必要があり、現在主流の絶縁性の窒化アルミニウムバッファ層に代わって導電性の  $ZrB_2$  が使用されるようになれば、グリーン・イノベーションの推進に寄与する縦型の高輝度・高効率白色 LED の実現に近づくことができる。本研究の成果を利用した高効率・高輝度の発光素子が可能になれば、従来の照明器具の固体照明への変換に伴ってエネルギー消費量の削減、 $CO_2$  削減に大きく寄与する他、二ホウ化物薄膜がワイドギャップを利用した高電圧・高出力デバイス材料や熱電変換材料の基板や電極材料、超格子化材料として、その性能向上に寄与することが可能になれば、従来のシリコンベースのデバイスの代替や高温における熱電変換などにより、より一層の省エネルギーへの貢献が可能となる。

6. 研究発表等

<p>雑誌論文 計 10 件</p>	<p>(掲載済み一査読有り) 計 6 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1 Microscopic origin of the <math>\pi</math> states in epitaxial silicene, A. Fleurence, Y. Yoshida, C.-C. Lee, T. Ozaki, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, and Y. Hasegawa, Applied Physics Letters 104, 021605(1-4) (2014). <a href="http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/104/2/10.1063/1.4862261">http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/104/2/10.1063/1.4862261</a></li> <li>2 First-principles study on competing phases of silicene: Effect of substrate and strain, C.-C. Lee, A. Fleurence, R. Friedlein, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, and T. Ozaki, Physical Review B 88, 165404 (1-10) (2013). <a href="http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.88.165404">http://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.88.165404</a></li> <li>3 Mechanisms of parasitic crystallites formation in ZrB<sub>2</sub>(0001) buffer layer grown on Si(111), A. Fleurence, W. Zhang, C. Hubault, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, Applied Surface Science 284, 432-437 (2013). <a href="http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433213014268">http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433213014268</a></li> <li>4 Unfolding method for first-principles LCAO electronic structure calculations, C.-C. Lee, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, and T. Ozaki, Journal of Physics: Condensed Matter 25, 345501(1-9) (2013). <a href="http://iopscience.iop.org/0953-8984/25/34/345501/">http://iopscience.iop.org/0953-8984/25/34/345501/</a></li> <li>5 Tuning of silicene-substrate interactions with potassium adsorption, R. Friedlein, A. Fleurence, J. T. Sadowski, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, Applied Physics Letters 102, 221603(1-4) (2013). <a href="http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/102/22/10.1063/1.4808214">http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/102/22/10.1063/1.4808214</a></li> <li>6 Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, H. Kawai, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, Physical Review Letters 108, 245501 (2012). <a href="http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.245501">http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.245501</a></li> </ol> <p>(掲載済み一査読無し) 計 4 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. シリセン - <math>\pi</math> 電子を有するモノレイヤーケイ素シートの化学, ライナー・フリードライン, <u>高村(山田)由起子</u>, 化学と工業 第 66 巻 900-902 (2013).</li> <li>2. シリセン:ケイ素で出来たグラフェン?, <u>高村(山田)由起子</u>, アントワヌ・フロランス, ライナー・フリードライン, 尾崎泰助, 日本物理学会誌 第 68 巻 305-308 (2013).</li> <li>3. Buckling induced <math>\pi</math>-band gap opening in epitaxial silicene, R. Friedlein, A. Fleurence, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, Photon Factory News 30, 15-18 (2012). <a href="http://pfwww.kek.jp/publications/pfnews/30_3/saikin2.pdf">http://pfwww.kek.jp/publications/pfnews/30_3/saikin2.pdf</a></li> <li>4. Buckling-induced direct <math>\pi</math>-band gap opening in epitaxial silicene, R. Friedlein, A. Fleurence, T. Ozaki, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, ISSP Activity Report 2011, 47-48 (2012). <a href="http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/highlight/2011/fried1_en.html">http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/highlight/2011/fried1_en.html</a></li> </ol> <p>(未掲載) 計 0 件</p>
<p>会議発表 計 43 件</p>	<p>専門家向け 計 39 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. シリセン: <math>\pi</math> 電子を有するモノレイヤーケイ素シートの合成と評価, <u>高村(山田)由起子</u>, 日本化学会 第 94 春季年会 (2014), 名古屋大学, 2014.03.27</li> <li>2. Novel two-dimensional silicon and germanium allotropes: a first-principles study, F. Gimbert, C.-C. Lee, R. Friedlein, A. Fleurence, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, and T. Ozaki, American Physical Society March Meeting 2014, Denver, U.S.A., 2014.03.06</li> <li>3. Microscopic origin of the <math>\pi</math> states in epitaxial silicene on ZrB<sub>2</sub>(0001), A. Fleurence, Y. Yoshida, C.-C. Lee, T. Ozaki, Y. Hasegawa, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, American Physical Society March Meeting 2014, Denver, U.S.A., 2014.03.05</li> <li>4. Formation of hBN monolayers by nitridation of ZrB<sub>2</sub> thin films with epitaxial silicene, K. Aoyagi, A. Fleurence, R. Friedlein, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, American Physical Society March Meeting 2014, Denver, U.S.A., 2014.03.03</li> <li>5. ニホウ化ジルコニウム薄膜上のシリセンの形成, <u>高村(山田)由起子</u>, 日本金属学会関西支部材料物性談話会, 京都大学, 2013.12.05</li> </ol>

6.	シリセン:ケイ素で出来た新しい二次元材料, <u>高村(山田)由起子</u> , 平成 25 年度 日本表面科学会中部支部研究会, 金沢, 2013.10.25
7.	Nitridation study of ZrB <sub>2</sub> (0001) thin films on Si(111): Formation process of graphene-like BN layer, K. Aoyagi, A. Fleurence, and <u>Y. Yamada-Takamura</u> , International Symposium on Advanced Materials 2013, JAIST, 2013.10.17
8.	二ホウ化物薄膜上のシリセンの形成, <u>高村(山田)由起子</u> , 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島大学, 2013.9.25
9.	Large-scale first-principles calculations of epitaxial silicene on ZrB <sub>2</sub> , C.-C. Lee, A. Fleurence, R. Friedlein, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , and T. Ozaki, 2013 JSAP-MRS Joint Symposia, Kyoto, Japan, 2013.09.16
10.	Microscopic study of structural and electronic properties of epitaxial silicene on ZrB <sub>2</sub> (0001), A. Fleurence, Y. Yoshida, C.-C. Lee, T. Ozaki, Y. Hasegawa, and <u>Y. Yamada-Takamura</u> , 19th International Vacuum Congress (IVC-19), Paris, France, 2013.09.13
11.	Epitaxial silicene - tunable hybridization with the substrate and weak interactions with epitaxial organic overlayers, R. Friedlein, A. Fleurence, F. Bussolotti, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , 19th International Vacuum Congress (IVC-19), Paris, France, 2013.09.10
12.	エピタキシャルシリセンの合成と評価, <u>高村(山田)由起子</u> , 日本学術振興会第 151 委員会平成 25 年度第二回研究会「2 次元原子薄膜の最前線」, 東京大学, 2013.8.30
13.	Silicene: A new two-dimensional material made of silicon, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , SPIE Optics + Photonics 2013, San Diego, U.S.A., 2013.8.25
14.	Spontaneous formation of silicene on diboride thin films grown on Si wafers, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , 17th International Conference on Crystal Growth and Epitaxy (ICCGE-17), Warsaw, Poland, 2013.08.16
15.	First-principles calculations on germanene multilayers under strain, F. Gimbert, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , and T. Ozaki, International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4), Tokyo, Japan, 2013.07.23
16.	From germanene monolayer to multilayers: first-principles calculations, F. Gimbert, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , and T. Ozaki, The 12th Asia Pacific Physics Conference (APPC12), Makuhari, Japan, 2013.07.15
17.	Electronic structure and chemistry of epitaxial silicene on zirconium diboride substrates, R. Friedlein, A. Fleurence, F. Bussolotti, and <u>Y. Yamada-Takamura</u> , Collaborative Conference on 3D & Materials Research 2013, Jeju, Korea, 2013.06.24
18.	エピタキシャルシリセン研究とナノプローブ技術, <u>高村(山田)由起子</u> , 日本学術振興会第 167 委員会(ナノプローブテクノロジー)研究会「グラフェン・シリセンがもたらすナノ材料のブレークスルー ~基礎・応用・展望~」, 産業技術総合研究所臨海副都心センター, 2013.04.18
19.	シリセンの合成と構造・電子状態評価, <u>高村(山田)由起子</u> , 2013 年第 60 回応用物理学会春季学術講演会, 神奈川工科大学, 2013.03.28
20.	Electronic properties of epitaxial silicene: a LT-STM/STS study, A. Fleurence, C.-C. Lee, T. Ozaki, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , Y. Yoshida, and Y. Hasegawa, American Physical Society March Meeting 2013, Baltimore, U.S.A., 2013.03.20
21.	A planar-like silicene on ZrB <sub>2</sub> (0001) surface revealed by a first-principles study, C.-C. Lee, <u>Y. Yamada-Takamura</u> , and T. Ozaki, American Physical Society March Meeting 2013, Baltimore, U.S.A., 2013.03.20
22.	Experimental Realization of Silicene - Si-version Graphene -, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u> , 7th Japanese-French Frontiers of Science Symposium (JFFoS2012), Shiga, Japan, 2013.01.25-27
23.	LT-STM/STS Investigation of the Electronic Properties of Epitaxial Silicene, A. Fleurence, Y. Yoshida, C.-C. Lee, T. Ozaki, Y. Hasegawa, and <u>Y. Yamada-Takamura</u> , 40th Conference on the Physics & Chemistry of Surfaces & Interfaces (PCSI-40), Waikoloa, U.S.A., 2013.01.20
24.	エピタキシャルシリセン-Si 版グラフェン-の構造と電子状態, <u>高村(山田)由起子</u> , 第 32 回表面科学学術講演会, 東北大学片平キャンパス, 2012.11.22
25.	A simple formula to unfold first-principles band structures with a non-orthogonal basis

	<p>set, Chi-Cheng Lee, Taisuke Ozaki, Antoine Fleurence, and <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, 15th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-15), Taipei, Taiwan, 2012.11.05</p> <p>26. Epitaxial Growth of Zirconium Diboride Thin Film on Ge(111) Wafer, C. Hubault, A. Baba, A. Fleurence, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, American Vacuum Society 59th International Symposium and Exhibition, Tampa, U.S.A., 2012.10.31</p> <p>27. Epitaxial silicene: 2D silicon with <math>\pi</math> electronic bands, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, International Conference on Nanoscience + Technology (ICN+T2012), Paris, France, 2012.07.23</p> <p>28. Epitaxial silicene on ZrB<sub>2</sub> buffer layer: Structure and electronic properties, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, European Materials Research Society 2012 Spring Meeting, Strasbourg, France, 2012.05.15</p> <p>29. Structural and Electronic Properties of Epitaxial Silicene, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, The 39th International Conference on Metallurgical Coatings and Thin Films (ICMCTF2012), San Diego, U.S.A., 2012.04.23</p> <p>30. Structural and electronic properties of epitaxial silicene, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, A. Fleurence, T. Ozaki, Y. Wang, F. Bussolotti, and R. Friedlein, The 6th Japan-Sweden Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-VI), ASOMEA-VI organizing committee, Kaga-Onsen, Japan, 2011.11.25</p> <p>31. Experimental study of epitaxial silicene on zirconium diboride, A. Fleurence, R. Friedlein, T. Ozaki, Y. Wang and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, The 6th Japan-Sweden Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-VI), ASOMEA-VI organizing committee, Kaga-Onsen, Japan, 2011.11.24</p> <p>32. Optimization of ZrB<sub>2</sub> thin film growth on Si(111), Antoine Fleurence, Wenyong Zhang, <u>高村(山田) 由起子</u>, 日本金属学会 2011 年秋期(第 149 回)大会, 日本金属学会、沖縄, 2011.11.07</p> <p>33. 第一原理計算による ZrB<sub>2</sub> 表面上の Silicene 構造の研究, 尾崎 泰助, 川井 弘之, Antoine Fleurence, Rainer Friedlein, <u>高村(山田) 由起子</u>, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 日本物理学会、富山大学五福キャンパス, 2011.09.23</p> <p>34. Epitaxial Silicene: Structure and Electronic Properties, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, University College London (UCL)- Faculty of Mathematical and Physical Sciences (MAPS) &amp; JAIST-School of Materials Science (SMS) Workshop, JAIST &amp; UCL, London, U.K., 2011.08.11</p> <p>35. Epitaxial Si layer formed on ZrB<sub>2</sub> thin films – Silicene?, A. Fleurence, R. Friedlein, Y. Wang, F. Bussolotti, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, The 38th International Conference on Metallurgical Coatings and Thin Films (ICMCTF2011), American Vacuum Society Advanced Surface Engineering Division, San Diego, U.S.A., 2011.05.05</p> <p>36. ニホウ化ジルコニウム薄膜上シリセンの構造と電子状態, <u>高村(山田) 由起子</u>, アントワーズ フロランス, 川井 弘之, 王 鷹, 尾崎 泰助, ライナー フリードライン, 2011 年春季第 58 回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 地震により中止(講演は成立), 応用物理学学会, 2011.03.25</p> <p>37. ZrB<sub>2</sub> 上の Si 単一層の第一原理電子状態計算, 川井弘之, 尾崎泰助, Antoine Fleurence, Rainer Friedlein, <u>高村(山田)由起子</u>, 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学五十嵐キャンパス, 地震により中止(講演は成立), 日本物理学会, 2011.03.25</p> <p>38. Epitaxial silicene formed on single-crystalline ZrB<sub>2</sub> thin films: structure and electronic properties, A. Fleurence, R. Friedlein, Y. Wang, and <u>Y. Yamada-Takamura</u>, American Physical Society March Meeting 2011, Dallas, U.S.A., American Physical Society, 2011.03.24</p> <p>39. Epitaxial Silicene on Diboride Thin Film, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, Antoine Fleurence, Hiroyuki Kawai, Ying Wang, Taisuke Ozaki and Rainer Friedlein, The 2011 WPI-AIMR Annual Workshop, Sendai, Japan, WPI-AIMR, Tohoku University, 2011.02.22</p> <p>一般向け 計 4 件</p> <p>1. 原子・分子からナノマテリアルへ 創る・観る・測る, <u>高村 由起子</u>, C. F. Hirjibehedin, JAIST 国際スクー</p>
--	--

	<p>ル 2014 日英ナノテクフロンティア, 秋葉原, 2014.3.11</p> <p>2. シリセン-Si 製のグラフェン?ー:最薄 Si シート研究の現状と可能性, 高村(山田)由起子, JAIST シンポジウム 2012, 秋葉原, 2012.11.16</p> <p>3. Silicene - Beyond Graphene, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, JAIST International Seminar on Emerging Nanotechnologies for 'More-than-Moore' and 'Beyond CMOS' era (ISEN2012), JAIST, Kanazawa, Japan, 2012.03.28</p> <p>4. エピタキシャルシリセン-Si 版グラフェン-の構造と電子状態, 高村(山田) 由起子, 先端化学・材料技術部会講演会, 社団法人新化学技術推進協会, 東京, 2011.06.14</p>
図書	
計 0 件	
産業財産権	(取得済み) 計 0 件
出願・取得状況	(出願中) 計 0 件
計 0 件	
Webページ (URL)	<p>研究室ホームページ: <a href="http://www.jaist.ac.jp/ms/labs/yukikoyt">http://www.jaist.ac.jp/ms/labs/yukikoyt</a></p> <p>プレスリリース日本語版:<a href="http://www.jaist.ac.jp/news/press/2012/post-322.html">http://www.jaist.ac.jp/news/press/2012/post-322.html</a></p> <p>プレスリリース英語版: <a href="http://www.jaist.ac.jp/en/top/newst/2012/05/structurally-flexible-silicene-integrated-with-si-wafers.html">http://www.jaist.ac.jp/en/top/newst/2012/05/structurally-flexible-silicene-integrated-with-si-wafers.html</a></p>
国民との科学・技術対話の実施状況	<p>1. 窒化物半導体との融合を目指したエピタキシャル二ホウ化物薄膜の表面・界面研究, FIRST シンポジウム「科学技術が拓く 2030 年」へのシナリオ, 新宿, 一般の来場者及び最先端・次世代研究開発支援プログラム研究者(参加者 300-500 名程度)に対してポスター形式で研究成果の発表を行った。2014.03.01</p> <p>2. 富山県立高岡高校の理科担当の先生7人が実験室を訪問され、研究内容を説明した。2012.10.05</p> <p>3. 本学の一般向けオープンキャンパス「JAIST FESTIVAL 2012」にて青少年科学教室「原子を観る:走査トンネル顕微鏡を使ってみよう!」を開催。高校生 3 名を相手に走査トンネル顕微鏡による原子像観察に関する講義と実演を行った。2012.09.29</p> <p>4. アントワーヌ・フロランス特別研究員が金沢大学附属高等学校(石川県)において日本学術振興会サイエンス・ダイアログ事業の一環として本補助事業で得られた研究成果等に関する講演を行う際に同行者として参加し、内容の日本語による説明、ディスカッションの補助を行った。講演題目は、「石川県のフランス人材料科学者」で、物理を選択している二年生 76 名が受講した。企画は補助事業者と高校教諭が行った。2011.12.16</p> <p>5. 能美市立宮竹小学校(石川県)の二年生の生活科の学習におけるまち探検で、一学年 27 名及び担任の教諭 2 名が補助事業者の研究室、同僚の准教授の管理する計算機室、本学の図書館を見学した。補助事業者の研究室では模型を使用した結晶構造の説明とその表面構造を実空間で観察可能な走査トンネル顕微鏡装置の説明を行った。企画は補助事業者が行った。2011.10.05</p> <p>6. 本学の一般向けオープンキャンパス「JAIST FESTIVAL 2011」にて青少年科学教室「原子を観る:走査トンネル顕微鏡を使ってみよう!」を開催。高校生 3 名、中学生 3 名、及び高校の物理担当教諭 1 名を相手に走査トンネル顕微鏡による原子像観察に関する講義と実演を行った。2011.10.01</p>
新聞・一般雑誌等掲載	<p>1. Silicene: atom-thick silicon with tunable properties, R. Friedlein, A. Fleurence, <u>Y. Yamada-Takamura</u>, and T. Ozaki, SPIE Newsroom(国際光学会の運営するニュースサイト), 7 June 2013 DOI: 10.1117/2.1201305.004854</p> <p>2. Sticky problem snares wonder material, Nature 誌(英国), vol. 495., p. 152-153 (2013). 2013.03.14</p> <p>3. Silicene: The next wonder material emerges from the shadows, ZDNet(Web ニュース, 米国), 2012.07.04 <a href="http://www.zdnet.com/silicene-the-next-wonder-material-emerges-from-the-shadows-7000000209/">http://www.zdnet.com/silicene-the-next-wonder-material-emerges-from-the-shadows-7000000209/</a></p> <p>4. Silicene may join graphene as wonder material, COSMOS 誌オンライン版(豪州), 2012.07.02 <a href="http://www.cosmosmagazine.com/news/silicene-may-join-graphene-wonder-material/">http://www.cosmosmagazine.com/news/silicene-may-join-graphene-wonder-material/</a></p> <p>5. Silicene pops out of the plane Physics World 誌オンライン版(英国), 2012.06.20</p>
計 18 件	

	<p><a href="http://physicsworld.com/cws/article/news/2012/jun/20/silicene-pops-out-of-the-plane">http://physicsworld.com/cws/article/news/2012/jun/20/silicene-pops-out-of-the-plane</a></p> <p>6. 北陸先端大, シリコン膜作成, 厚み, 原子一個分, 半導体の性質, 日経産業新聞, 12 面, 2012.05.31</p> <p>7. 北陸先端大, 次世代電子材料「シリセン」の大面积製造技術を確立, 日刊工業新聞, 29 面, 2012.05.31</p> <p>8. ケイ素で極薄シート, 先端大, 大きく作る手法開発, 北國新聞, 43 面, 2012.05.31</p> <p>9. 極薄ケイ素シート, 大きく作る, 新素材開発に期待, 先端大が新手法, 北陸中日新聞, 26 面, 2012.05.31</p> <p>10. ケイ素の極薄シート作製に新手法 電子材料に応用期待, 共同通信, 2012.05.30</p> <p>11. Silicon's Next Wave, Discover 誌(米国), Jan-Feb., p. 82 (2011). (Year in Science 特集号, “Top 100 stories of 2011” の#86 に選ばれる。)</p> <p>12. Scientists study graphene sibling: Single-layer ‘silicene’ sheets might have electronic uses, Science News 誌(米国), 179, p. 14 (2011)</p> <p>13. Ook silicium vormt monolaag, DeIngenieur 誌(蘭国), 15 April issue, p.11 (2011)</p> <p>14. Superslim silicene, Science News FOR KIDS (web ニュース, 米国), 2011.04.13 <a href="http://www.sciencenews.org/view/generic/id/72716/title/FOR.KIDS_Superslim_silicene">http://www.sciencenews.org/view/generic/id/72716/title/FOR.KIDS_Superslim_silicene</a></p> <p>15. Si 版石墨烯“Silicene”, 日本北陸先端科技大首次在 Si 基板上制备成功, Tech On! China (web ニュース, 中国), 2011.04.13 <a href="http://china.nikkeibp.com.cn/cgi-bin/cgi-bin/news/nano/55996-20110413.html">http://china.nikkeibp.com.cn/cgi-bin/cgi-bin/news/nano/55996-20110413.html</a></p> <p>16. Si 版グラフェンの「シリセン」, 北陸先端大が初めて Si 基板上に作製, Tech On! (web ニュース), 2011.04.12 <a href="http://www.nikkeibp.co.jp/article/news/20110412/266701/">http://www.nikkeibp.co.jp/article/news/20110412/266701/</a></p> <p>17. Grafeen krijgt broertje: silicene, Bits&amp;Chips (web ニュース, 蘭国), 2011.04.01 <a href="http://www.bits-chips.nl/nieuws/bekijk/artikel/grafeen-krijgt-broertje-siliceen.html">http://www.bits-chips.nl/nieuws/bekijk/artikel/grafeen-krijgt-broertje-siliceen.html</a></p> <p>18. Silicene: It could be the new graphene, Science News 誌オンライン版(米国), 2011.03.24 <a href="http://www.sciencenews.org/view/generic/id/71705/title/Silicene_It_could_be_the_new_graphene">http://www.sciencenews.org/view/generic/id/71705/title/Silicene_It_could_be_the_new_graphene</a></p>
その他	<p>1. Silicene – control of atomic-scale buckling by epitaxial strain, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, Seminar at MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente, Enschede, the Netherlands, 2012.10.02 (蘭国の大学における招待講演)</p> <p>2. Band Engineering of Silicene through Structure Control, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, DARPA 2D Materials beyond Graphene Workshop, Pont-a-Mousson, France, 2012.09.26 (米国国防省国防高等研究計画局主催のワークショップにおける招待講演)</p> <p>3. ケイ素(Si)原子 1 層のシート“シリセン”の合成に成功, KEK 物構研トピックス, 2012.06.14. <a href="http://imss.kek.jp/news/2012/topics/120614Silicene/index.html">http://imss.kek.jp/news/2012/topics/120614Silicene/index.html</a></p> <p>4. 世界で初めてシリセンの構造と性質の関係を実験から解明～グラフェンでは難しいバンドギャップの導入が可能～, Nanotech Japan, 2012.06.12. <a href="https://nanonet.go.jp/muta49cxx-281/#_281">https://nanonet.go.jp/muta49cxx-281/#_281</a></p> <p>5. Structural and Electronic Properties of Epitaxial Silicene, <u>Yukiko Yamada-Takamura</u>, Physical Science Seminar, IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Heights, U.S.A., 2012.03.09 (米国企業の研究所における招待講演)</p> <p>6. 固体照明を支える材料技術, 高村(山田)由起子, 芝浦工業大学工学部材料工学科特別講義「材料の技術史」, 芝浦工業大学豊洲キャンパス, 2011.10.14 (大学三年生向けのオムニバス形式講義の一部)</p>

## 7. その他特記事項

・掲載済一査読有り論文 6 の被引用数が、雑誌掲載後一年と半年経った平成 25 年 12 月末に 100 を超えた(Web of Science 参照)。

・掲載済一査読有り論文 6 が Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology の June 25, 2012 issue に採録された。