

# 研 究 報 告 書

## 「計算科学手法によるナノカーボン素子の設計と物性予測」

研究期間：平成19年10月～平成23年3月

研究者：若林 克法

### 1. 研究のねらい

サッカーボール状分子 $C_{60}$ 、そして飯島による炭素ナノチューブの発見は、その興味深い形状と多彩な電子状態から、物理、化学、工学の分野から強い関心を巻き起こし、今やナノサイエンス/ナノテクノロジー研究における代表的な物質としての地位を占めるに至っている。さらに最近、一原子層のグラファイトシート(グラフェン)からなる電子デバイスの作製が可能になってきたことから、ナノ炭素研究に新たな展開が生まれている。しかし、我々の研究から、グラフェンがナノスケールになると、端の存在とその形状が電子物性に大きな影響を与え、分散の殆んど無い特異なエッジ状態が出現すること、そして、その状態により、磁性が誘起され得る事が明らかになっている。ナノグラフェンを用いれば、炭素ナノチューブで困難である制御された微細化を行った量子伝導素子形成が実験的に可能であることから、次世代デバイスのキー材料として大きな期待が持たれている。

本研究では、ナノ構造化されたカーボン材料における特異なフェルミ面効果を解明し、その特性を積極的に生かしたデバイスの設計あるいは物性の予測が目的である。エッジ状態の物理を用いて、ナノグラフェン伝導素子を形成した際の伝導特性をモデル計算と第一原理電子状態計算を相補的に利用することによって解明する。本研究では、これらの今までの研究を基礎に、以下の課題について研究を行う。(1)原子スケールでの構造と電子状態解析を、モデル計算による数値解析と第一原理電子状態計算手法を併用することで、解明する。今までに気づかれていなかったフェルミ面効果とその制御法を明らかにする。ナノメートルスケールで実現するグラフェン上の量子電子物性の本質を捕らえることが期待できる。(2)ナノグラフェン/ナノグラファイトにおける電子状態・磁性などの電子物性、および電子・スピン伝導などの量子伝導現象を、解析的手法および計算科学手法を援用することによって理論解析し、新しい動作原理に基づく高機能電子スピン素子を設計することを目的とする。

### 2. 研究成果

系のサイズがナノスケールまで小さくなると、端にある炭素原子と局所的にはバルクの環境にある炭素原子の割合が同等になるため、端の存在がフェルミ準位近傍の電子状態に大きな影響を与える。グラフェンは  $sp^2$  炭素原子からなる六角格子構造をもち、その端の形状には、アームチェア端(図 1(a))、ジグザグ端(図 1(b))と呼ばれる2種類が現れる。この周辺構造の違いが、ナノカーボン材料の物性、特に電子輸送特性に大きな影響を与えることを、本研究課題によって明らかにした。

#### 1. ナノグラフェンリボンの電子状態

ここでは、リボン状の一次元グラフェン格子の電子状態を概説した後、端の形状とナノグラフェンの電子状態について紹介する。その後、研究成果について概説していく。

強結合模型(tight binding model)によるアームチェアリボン(図 1(c))のエネルギーバンド構造を図 2(a) に示す。アームチェアリボンの場合には、リボンの幅  $N$  に依存して、系は金属または半導体になる。今の場合、 $N = 3m - 1 (m = 1, 2, 3, \dots)$  のときのみ金属になる。この特徴は、カーボンナノチューブの性質と良く似ている。しかし、ジグザグリボン(図 1(d))では、グラフェンシートあるいはアームチェアリボンにはない、ほとんど分散を持たない平坦なバンドがフェルミ準位( $E=0$ )に現れる(図 2(b))。そのため、状態密度はフェルミ準位に非常に鋭いピークをもつ。グラフェンの状態密度が  $E=0$  でゼロであることから、エッジ状態がナノグラフェン

の物性に大きな影響を与えると予想される。

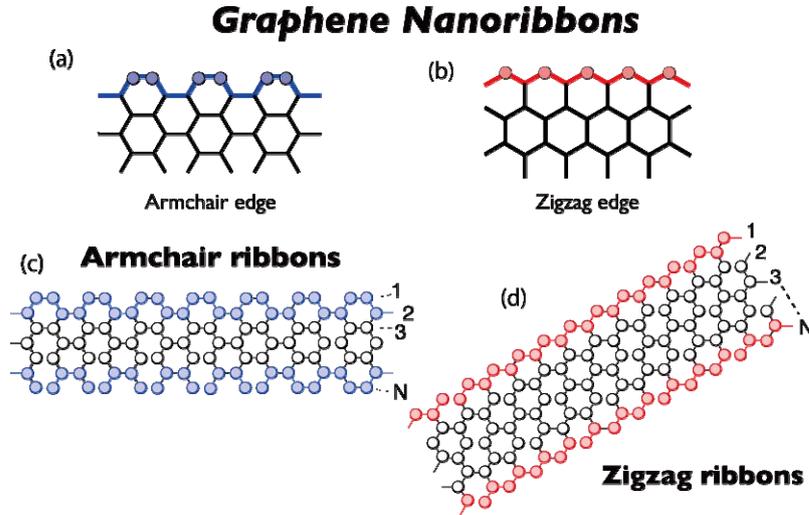


図1 グラフェンの端構造 (a) アームチェア端と (b) ジグザグ端。(c) アームチェアナノリボンと (d) ジグザグナノリボン

$E=0$  付近に形成される特異な電子状態は、ジグザグ端をもつ半無限のグラフェンを考えると、端を起点として解析的に構築される非結合性軌道(Non-Bonding Orbitals; NBO)として理解される。Fig.3(a)-(d)は、各波数における波動関数の様子を図示したものである。 $k=\pi$ ではジグザグ端に沿って2配位のサイトにのみ完全に電子が局在し、 $k$ が $\pi$ からずれるにしたがって徐々に面内に浸透し、 $k=2\pi/3$ で完全に広がったグラフェンのK点の状態になる。したがって、平坦バンドの起源は、ジグザグ端に局在した状態(エッジ状態)である。

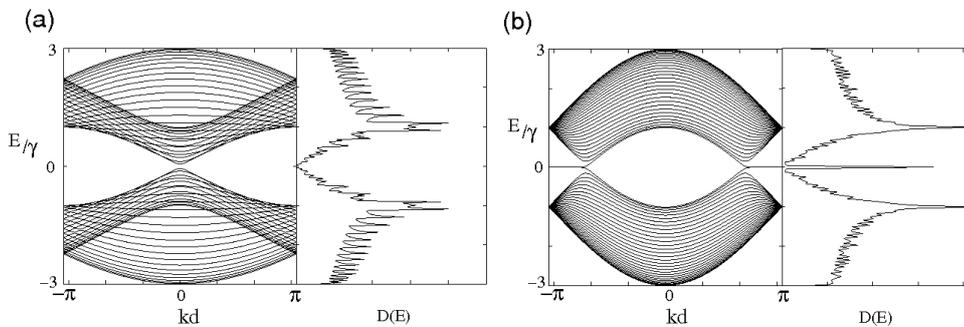


図2 グラフェンナノリボンのエネルギーバンド構造と状態密度。(a) アームチェアナノリボンと (b) ジグザグナノリボン

グラフェンの低エネルギー電子構造は、質量ゼロのディラック方程式(正確には、ワイル方程式)で記述されることが知られている。グラフェンナノリボンの場合も、フェルミ準位近傍のエネルギースペクトラムと波動関数は、このワイル方程式に適切な境界条件を課すことで得られることは知られていた。本研究課題の副産物として、強結合模型の範囲で、それぞれのナノリボンの全エネルギー固有値と波動関数を解析的に導出することができた。これは、Sci. Technol. Adv. Mat. (2010)に出版された。今後、種々の物理量がより簡便な形で計算可能になると期待される。

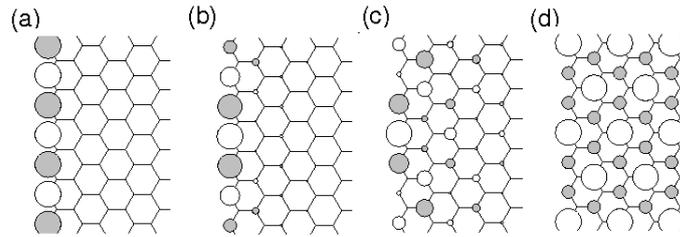


図 3 エッジ状態の波動関数。(a)  $k=\pi$  (b)  $k=8\pi/9$  (c)  $k=7\pi/9$  (d)  $k=2\pi/3$

## 2. ナノグラフェン接合系の電子輸送特性

グラフェンの端での格子構造に依存して、電子状態が大きな影響を受ける。当然のその影響は、電子輸送特性に現れる。ここでは、リボン幅の異なる二つのナノリボンを接合する系を考え、接合領域のエッジ構造に電子輸送特性が大きく変化することを紹介しよう。

Fig.4(a)はアームチェアナノリボン同士を、Fig.4(b)はジグザグリボン同士を接合する系の模式図である。それぞれについて、接合部分をジグザグ端でアームチェア端で切り込んでいく二通りの場合がある。Fig.4(c)と(d)に対応するコンダクタンスのフェルミエネルギー依存性を示す。コンダクタンスは、ランダウアー公式

$$g = \frac{2e^2}{h} MT \equiv g_0 MT$$

によって求められる。ここで  $T$  は、電子波が接合系を透過する確率である。電子波を散乱するものがなければ、 $T=1$  である。しかし、今の場合、電子は接合領域のリボン幅の変化するため、接合部のエッジ形状に依存して電子波の散乱がおきるため、一般に  $T < 1$  である。

また、 $M$  は入射する電子のモード数である。Fig.4(c)と(d)では、 $g_0$ を単位として、コンダクタンスをプロットしている。黒い破線は、リボンの幅を変化させない理想的なナノリボンのコンダクタンスである。この場合には電子散乱が起こらないため、常に  $T=1$  であり、 $g/g_0$ はモード数  $M$ (整数値)になる。これはいわゆるコンダクタンス量子化である。

次にリボン幅を変化させる接合系でのコンダクタンスを見てみる。Fig.4(c)では、赤線は接合部分をジグザグ端に切り込んだ場合、青の破線がアームチェア端に切り込んだ場合である。この二つの場合を比較すると、ディラック点( $E=0$ )近傍での振る舞いが大きく異なることがわかる。ジグザグ端で切り込むと、ディラック点近傍で電子が完全に反射され、コンダクタンスがゼロになる。このことは、ゲート電圧によってフェルミエネルギーを変化させれば、電流の on/off 制御が可能になると示唆している。他方、アームチェア端で切り込んだ場合には、コンダクタンスの落ち込みがほとんど起こらず、ナノグラフェンの電流特性がエッジの形状に強く依存することを物語っており、大変興味深い。これらのエッジ形状に依存したナノグラフェンの電子伝導特性を利用することで、ナノグラフェンからなる電子デバイスの設計が可能になると期待される。Fig.4(d)は、ジグザグナノリボンに、アームチェアおよびジグザグ端で切り込みを入れた場合である。特に、ジグザグ端で切り込むと、ディラック点近傍以外にも、完全反射状態が現れる。またこの完全反射状態付近でのエネルギーをもつ電子は、接合部分で渦電流状態を形成することがわかっている。本節の成果は、Appl. Phys. Lett.(2009)に出版した。

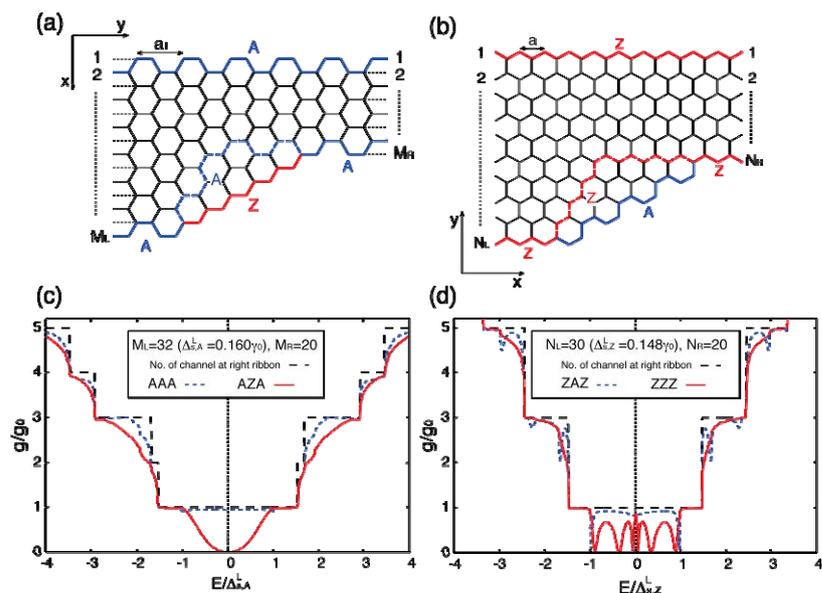


図 4 (a) アームチェアナリボンからなる接合系。(b) ジグザグナリボンからなる接合系。(c) 接合系(a)に対応するコンダクタンス。アームチェアの切れ込みを入れた場合(AAA 接合)には、ほとんど反射が起こらない。(d) 接合系(b)に対応するコンダクタンス。ジグザグエッジの切れ込みを持つ場合(ZZZ)には、反共鳴状態が現れる。

### 3. 量子細線としてグラフェンナリボンの伝導特性

グラフェンは、数千から数万 $\text{cm}^2/\text{Vs}$ という非常に高い電子移動度を持つことが実験的に知られている。これは、グラフェンでは不純物による後方散乱が起こりにくいことに起因している。後方散乱消失の物理的な起源は、電子の波動関数がディラック点周りでベリー位相を $\pi$ 有することに起因している。物理的な起源は異なるが、ジグザグナリボンでも、図 5(a)に示すように、長距離不純物がランダムにばらまかれたナリボンを介した電子伝導を考えると、一つの伝導モードが完全伝導となり、絶縁化しないことを示した。

ジグザグ端があると、エッジ状態がフェルミ準位近傍に形成され、ほとんど分散のない平坦なバンドが現れる。エッジ状態は、非結合性分子軌道であるため、伝導そのものには関与しない。しかし、エッジ状態に起因するサブバンドに由来して、ジグザグナリボンは、通常の量子細線とは本質にことなつた電子構造をもっている。図 5(b)に、グラフェンナリボンのバンド構造を示す。波数  $k=2\pi/3$  と  $k=-2\pi/3$  の近傍に、二つのバレー構造が現れる。バレー間散乱が抑制される状況では、これら二つのバレーは、独立に電子輸送に寄与する。そこで各バレーにおける右向きおよび左向きにチャンネルの数に着目すると、左側のバレーでは、 $1 > E > 0$  の領域で、右向きチャンネルの数が一つ多くなる。一方、右側のバレーでは、左向きのチャンネルが一つ多くなっているおり、左右のチャンネルの数に非対称性をもつ。従って、電流をリボンの左側から入射させることを考えると、常に右向きのチャンネルが一つ余分にある「一方通行チャンネル」系になっている。したがって、長距離型不純物をランダムにばらまいたサンプルに対してコンダクタンスの振る舞いを数値計算によって確認すると、一つのチャンネルは電子散乱の影響を受けにくく、常に一つのチャンネルが完全に伝導することを示した(図 5(c))。これは、ジグザグナリボンは準一次元系にも関わらず、アンダーソン局在を起こさないことを示しており、学術的にも興味深い。さらに、グラフェンナリボンが、配線材料として優れたポテンシャルを有していることを示した。

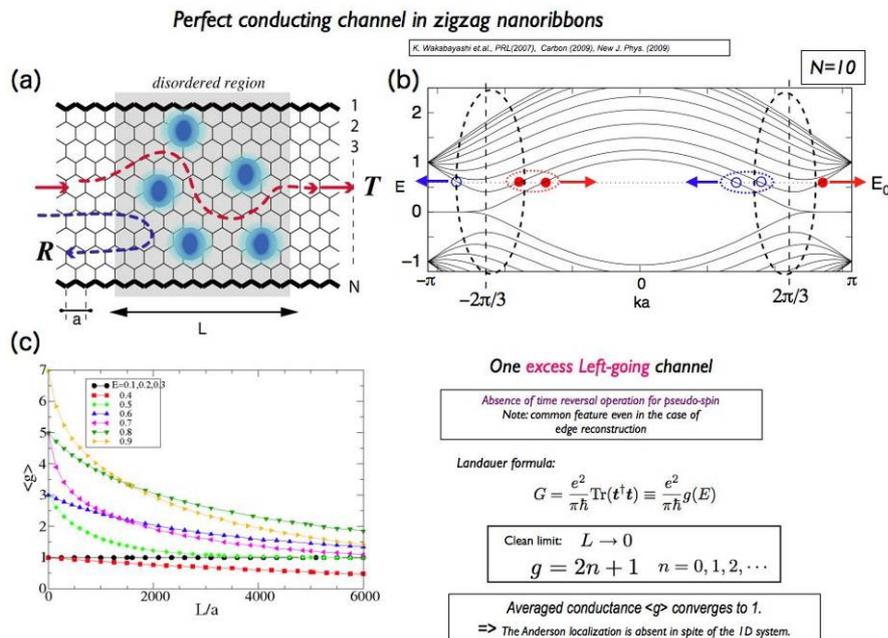


図 5 (a) 長さ  $L$  にわたって不純物がランダムにばらまかれたグラフェンナノリボンの模式図。  $a$  は格子定数。(b) グラフェンナノリボンのエネルギーバンド図。赤丸(青丸)は、右向き(左向き)チャンネルを表す。(c) 平均コンダクタンスの不純物領域の長さ  $L$  依存性。

アームチェア型のエッジを有するナノリボンでも、低エネルギー領域で、不純物散乱がほとんど電子輸送に影響を与えない特異な性質を有することを見いだした。これは、ディラック型分散関係に由来する線形バンドに関して、長距離型不純物による散乱では、Born 近似の範囲で後方散乱の行列要素が消えることから理解できることを示した。

不純物効果および完全伝導チャンネルについて、CARBON(2010)および New J. Phys.(2009)に公表した。また、New J. Phys.(2009)の論文は、Best of 2009 に選出された。

#### 4. カイラル形状のナノリボンの電子状態と伝導特性

グラフェンナノリボンは、半導体微細加工技術によるトップダウン手法および、化学的合成によるボトムアップ手法によって可能になってきている。しかし、トップダウン的な手法では、端の構造制御は極めて困難な状況であり、エッジの乱れの問題が電子輸送特性に与える影響を理解することは重要な課題となっている。

図 6(a)に示すような、ジグザグ端とアームチェア端が混ざった任意角度のナノリボンの電子状態および電子伝導の考察を行った。図 6(b)と(c)に、エネルギーバンド構造を示す。アームチェアナノリボン以外では、常に二つのバレー構造が現れ、それらの波数空間での距離は、ナノリボンのカイラル角度に依存する。また、二つのバレー間を結ぶように、エッジ状態に由来した平坦バンドが出現し、各バレー内において右向きおよび左向きチャンネルの数に差を生み出す。したがって、バレー間散乱が抑制されれば、カイラルナノリボンにおいても、完全伝導チャンネルが一つ現れる。

### Graphene Nanoribbon with Generic Edge Structures

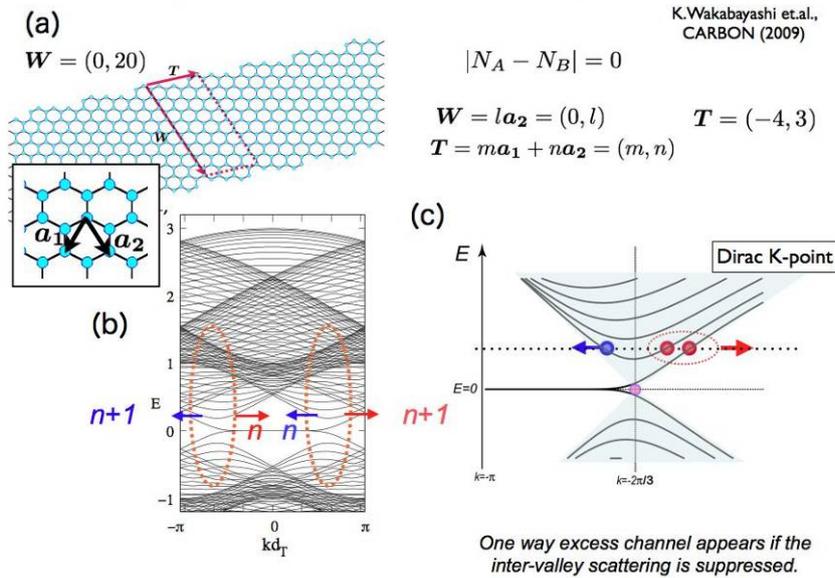


図 6 (a) 一般的な端構造をもつナノリボンの模式図と (b) エネルギーバンド構造。 (c) エネルギーバンド構造における特徴。

任意のエッジ形状での伝導特性についても解析を行い、グラフェン結晶軸と伝導度の相関を数値的に明らかにした。図 7 の模式図に示す接合系に対して数値解析を行った。結晶軸がジグザグ方向に近くなると、完全伝導チャンネルのために、電気伝導は金属的になる。しかし、アームチェア方向に近づくにつれて、絶縁化していくことを示した。

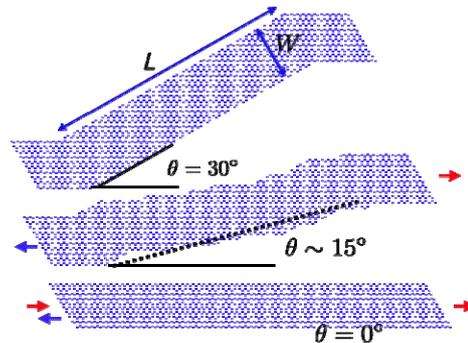


図 7 任意角度をもつナノリボン接合系。

#### 5. 端の構造修飾と機能発現

ナノカーボン材料の優れている点は、サイズやエッジ形状を変えることで、様々な物性を示すところにある。ジグザグ端に出現するエッジ状態は、フェルミ準位近傍に大きな状態密度を形成するため、僅かな電子間相互作用でもフェルミ不安定性を誘起し、スピンのフェリ的に変極した状態が現れる。そこで、我々は、ジグザグ端以外においても、端構造修飾を行うことで、平坦バンドを有し、磁性状態を出現させることができないかを、モデル計算および密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって考察を行った。

平坦バンドを構成させるアプローチとして、最も単純には、A 副格子とB 副格子との間に数の差をつけることであるが、通常そのような系はエネルギー的に不安定になるため、除外した。しかし、磁氣的に異常を起こさないアームチェア型エッジにおいても、エッジ近傍でA 副格子とB 副格子との間に、図 8(a)に示すように、強いポテンシャルに違いを作り込めれば、平坦バンドが現れることを示した。さらに、図 8(b)に示すように、表面再構成がおきても、フェルミ準位近傍に部分平坦バンドが残るため、強いフェルミ不安定性の原因となる。実際に、第一原理計算による考察においても、スピン分極が示唆されている。

本節の研究内容については、J.Phys.Soc.Jpn.(2010)に出版された。

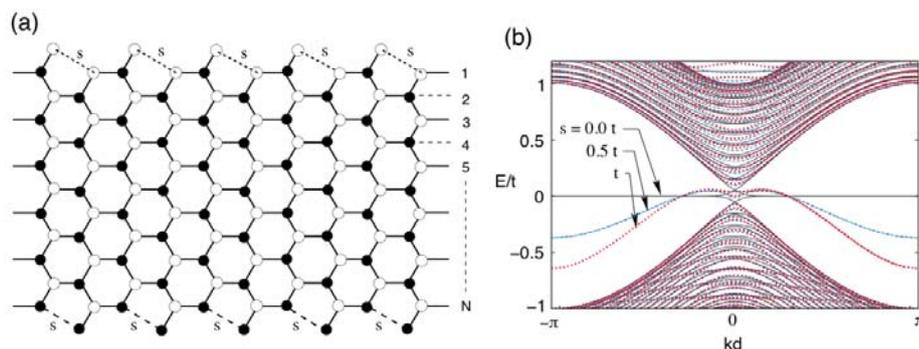


図 8 (a) 構造修飾したアームチェアナノリボンと (b) エネルギーバンド構造。

### 3. 今後の展開

グラフェンは、高い電気伝導性、熱伝導性を有することから、次世代デバイスのキーマテリアルとして、今後重要な位置を占めると考えられる。また、一原子層という薄さから、光の透過性が良く、レアメタルフリーの透明電極材料としても重要視されるだろう。またカーボンナノチューブも、トップダウン技術との整合性にまだ課題はあるものの、次世代デバイスを目指す上で重要な材料である。このようにグラフェンおよびナノカーボン研究の世界的な大きな潮流の中でも、研究代表者らが中心となっておこなってきた、グラフェンナノリボンおよびナノグラフェンの理論研究は、先駆的なものとして認知されていると自負する。

さきかけ研究課題の遂行を通して、ナノリボンにおける電子輸送特性に関する基礎理論の整備が格段に進んだ。特に、通常金属における量子細線とは、その特性は鮮明に異なっており、系は一方通行チャンネルシステムとして記述され、完全伝導チャンネルが出現するなど、極めて特異な伝導機構を解明した。さらに、接合系などにおける、格子の幾何構造と伝導特性の関係も多彩であり、本研究課題を通して、その分類もおこなった。今後我々の研究成果を基に、ナノカーボン材料を利用した配線材料あるいは、カーボンエレクトロニクス素子あるいは分子エレクトロニクス素子の設計と実現を期待したい。また、ナノカーボン配線材料へ応用展開に向けて、現在産学官連携の可能性へと広がりつつある。

端構造修飾による磁性状態の制御などは、カーボンスピントロニクス素子やカーボン磁性材料を設計する上で重要である。その中で、従来磁性に対して沈黙であったアームチェア端についても、ある種の条件化では磁性状態を発現させる可能性を指摘しており、今後の研究に端緒を与えたと言えよう。また、ナノグラフェンについて解析的な考察と理解も、格段に進んでおり、今後グラフェン以外のディラック電子系物質群への適用を含め、基盤理論の整備が進んだことは大きな成果の一つである。

#### 4. 自己評価

さきがけ研究を通して、グラフェンの電子状態、電子輸送特性、磁性におけるナノスケール効果について、理論整備が格段に進んだと評価している。今後は、得られた知見を基に、グラフェン以外のディラック電子系への適用を目論んだ理論整備を行う方向、さらにナノカーボン材料を実際の素子応用へ適用するための理論整備を、さらに進めて行きたい。格子構造やナノスケール効果によって、物性が多彩な顔を見せるのはナノカーボン系のおもしろさであると同時に、応用への障壁にもなっている。このような状況で、輸送現象については、ある一定の交通整理が達成できたのではないかと考えている。一方で、提案しながらも手をつけられなかった課題、あるいは領域会議や研究者同士の交流を通してインスピレーションを得た課題もあるが、積み残した課題があるのも事実ではある。たとえば、スピン依存伝導については、深く切り込む時間がなかった。これは、当初想定したよりも、輸送現象の問題や端修飾の問題が、深い物であり、徹底した考察の必要があったためである。しかし、応用に向けた問題だけでなく、基礎物理の観点からもまだまだすべき問題が残されていると実感している。

#### 5. 研究総括の見解

若林研究者は、ずっと以前からグラフェンの特異な電子構造に着目した先駆的な理論研究を行ってきた力のある研究者です。本さきがけ研究は、ナノグラフェンの電子状態を明確にして、ナノグラフェンの電子物性を積極的に利用した電子デバイスの構築に貢献しようというものです。

グラフェンのナノ構造では、エッジの形状が大きくなはたらきをします。ジグザグ端があると、エッジ状態がフェルミ準位近傍に形成され、ほとんど分散のない平坦なバンドが現れます。エッジ状態は、伝導そのものには関与しませんが、エッジ状態に起因するサブバンドに由来して、ジグザグナノリボン、通常の量子細線とは本質に異なった電子構造をもち、常に一つのチャンネルが完全に伝導することを示しました。アームチェア型のエッジを有するナノリボンでも、低エネルギー領域で、不純物散乱がほとんど電子輸送に影響を与えない特異な性質を有することを見いだしました。

任意のエッジ形状での伝導特性についても解析を行い、グラフェン結晶軸と伝導度の相関を数値的に明らかにしました。接合系に対して数値解析を行ったところ、結晶軸がジグザグ方向に近くなると、完全伝導チャンネルのために、電気伝導は金属的になる一方、アームチェア方向に近づくにつれて、絶縁化していくことも示しました。また、カイラルナノリボンにおいても、完全伝導チャンネルが現れることが明らかになりました。エッジの存在とその形状が、グラフェンの電子物性にどのように影響するかを具体的に明らかにしたことは大いに評価できます。若林研究者は、本領域の貴重な2人の理論家のうちの1名です。領域会議、ミニワークショップでは、積極的に質問し、意見を述べて領域を活性化してくれました。3期生に多い分子系の研究者の理論的な柱として、終了後もネットワークを通じて実験研究との連携が進むものと期待します。

ノーベル賞受賞に見られるようにグラフェンおよびナノカーボン研究は世界的な大きな潮流となっています。若林研究者らが中心となっておこなってきたグラフェンナノリボンおよびナノグラフェンの先駆的な理論研究は、今後とも世界をリードするものと確信しています。

#### 6. 主要な研究成果リスト

##### (1) 論文(原著論文)発表

1.	K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto, and M. Sigrist, Edge Effect on Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons and Presence of Perfectly Conducting Channel, CARBON (Elsevier), vol. 47, 124–137 (2009)
2.	M. Yamamoto, Y. Takane, and K. Wakabayashi, Nearly Perfect Single-Channel Conduction in Disordered Armchair Nanoribbons, Phys. Rev. B vol. 79, 125421 (2009).
3.	Y. Takane, and K. Wakabayashi, Conductance Fluctuation in Disordered Wires with

	Perfectly Conducting Channels, J. Phys. Soc. Jpn. vol. 77, No.5, 054702(1)–054702(6) (2008).
4.	K. Wakabayashi, and M. Sigrist, Enhanced conductance fluctuation due to the zero-conductance Fano resonances in the quantum point contact on graphene. J. Phys. Soc. Jpn. (Letters), vol. 77, No. 11, 113708 (2008).
5.	Y. Takane, S. Iwasaki, Y. Yoshioka, M. Yamamoto, and K. Wakabayashi, Conductance Distribution in Disordered Quantum Wires with a Perfectly Conducting Channel, J. Phys. Soc. Jpn. vol.78, No.3, 034717 (2009).
6.	K. Sasaki, M. Yamamoto, S. Murakami, R. Saito, M. S. Dresselhaus, K. Takai, T. Mori, T. Enoki, K. Wakabayashi, Kohn Anomalies in Graphene Nanoribbons, Phys. Rev. B80, 155450 (2009).
7.	M. Yamamoto and K. Wakabayashi, Control of electric current by graphene edge structure engineering, Applied Physics Letters vol. 95, 082109 (2009).
8.	K. Sasaki, Y. Shimomura, Y. Takane, and K. Wakabayashi, Hamiltonian decomposition for bulk and surface states, Phys. Rev. Lett. vol. 102, 146806 (2009).
9.	K. Wakabayashi, Y. Takane, M. Yamamoto and M. Sigrist, Electronic transport properties of graphene nanoribbons, New Journal of Physics, vol.11, 095016 (2009).
10.	K. Sasaki, R. Saito, K. Wakabayashi and T. Enoki, Identifying the Orientation of Edge of Graphene Using G Band Raman Spectra, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 044603 (2010).
11.	K. Sasaki, K. Wakabayashi, and T. Enoki, Berry's Phase for Standing Wave Near Graphene Edge, New Journal of Physics, 12, 083023 (2010).
12.	K. Wakabayashi, S. Okada, R. Tomita, S. Fujimoto, and Y. Natsume, Edge States and Flat Bands of Graphene Nanoribbons with Edge Modification, J. Phys. Soc. Jpn. 79, 034706 (2010).
13.	K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, Electronic states of graphene nanoribbons with analytic solutions Sci. Technol. Adv. Mater. 11 (2010) 054504.

(2)特許出願

研究期間累積件数：0件

(3)その他(主要な学会発表、受賞、著作物等)

受賞

平成22年度 文部科学大臣表彰 若手科学者賞

著作物

1. Katsunori Wakabayashi, Electronic properties of graphene nanoribbons, Graphene Nanoelectronics, Springer Series in Materials Science, Edited by Hassan Raza, Springer-Verlag
2. Koichi Kusakabe, and Katsunori Wakabayashi, Nano-carbon systems: Nanotubes and graphene, Handbook of computational materials design, Edited by H. Katayama-Yoshida et.al, Pan Stanford Publishing, Singapore
3. 若林克法, 草部浩一, グラフェンシートの電子物性 - ナノグラフェン - 日本物理学会誌解説 63 巻 p. 344-352 (2008 年 5 月)
4. 若林克法, ナノグラフェンの特異な電子物性, 炭素(TANSO), no. 243, 116-120 (2010).
5. 若林克法, グラフェン電子状態の理論的側面、日経エレクトロニクス別冊、グラフェン・イノベーション、日経 BP 社(2011)
6. 塚越一仁, 若林克法, 新たな世界を作り出した物質“グラフェン” - 流れを引き寄せた洞察力 -, 岩波書店 科学 2011 年1月号

主たる招待講演

1. (招待講演) Joint International Conference “Advanced Carbon Nanostructures” combining the 10<sup>th</sup> Biennial Workshop “Fullerenes and Atomic Clusters” and the 4<sup>th</sup> International Symposium “Detonation Nanodiamonds Technology, Properties, and Applications”, July 4-8, 2011, St. Petersburg, Russia
2. (基調講演) Graphene 2011 -IMAGINENANO-, Apr. 11-14, 2011, Bilbao Exhibition Center, Bilbao, Spain
3. (招待講演) Graphene Workshop 2011 in Lancaster, UK, Feb., 2011, Lancaster University, UK
4. (招待講演) K.Wakabayashi, Quantum Electronic Transport and Magnetic Properties of Nanographene Systems, Graphene Workshop 2011 in Tsukuba, Jan. 17-18, 2011, Okura Frontier Hotel Tsukuba
5. (招待講演) K. Wakabayashi(NIMS/MANA, JST/PRESTO), Electronic and Transport Properties of Nano-Graphene Systems, International Conference on Quantum Effects in Solids of Today (I-ConQuEST), Dec. 20-23, 2010, National Physical Laboratory, New Delhi, India.
6. (招待講演) K. Wakabayashi, Electronic and Transport Properties of Graphene Nanoribbons and Nanojunctions, Solid State Device and Materials (SSDM2010), Area 9, F-1 Graphene Structures and Transport, The University of Tokyo, 2010, Sep. 22

7. (招待講演) K. Wakabayashi, Peculiar Electronic and Transport of Graphene Nanoribbons, MANA Symposium 2010, 2010, Mar. 3, Tsukuba, Japan
8. (招待講演) K. Wakabayashi, Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges, Indo-Japan Conference on “Graphene”, 2009, Nov. 17-19, Jawaharlal Nehru Center for Advanced Scientific Research, Bangalore, India
9. (招待講演) K. Wakabayashi, Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges, ICCMSE2009, 2009年9月30日, Rhodes, Greece.
10. (招待講演) K. Wakabayashi, Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges, KIAS Workshop on Physical Properties of Graphene, Korea Institute for Advanced Science(KIAS), Seoul, South Korea, Jun. 29-Jul.2, 2009.
11. (口頭発表) K. Wakabayashi, Edge Shape and Magnetic Field Effects on Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons, 15<sup>th</sup> International Symposium on Intercalation Compounds, Beijing, China, 10-14 May 2009.
12. (招待講演) K. Wakabayashi, Electronic Transport Properties of Graphene Nanoribbons, Okazaki Conference 2009, From Aromatic Molecules to Graphene: Chemistry, Physics and Device Applications, Okazaki Conference Center, Okazaki, Japan, Feb. 21-23, 2009.
13. (招待講演) K. Wakabayashi, Peculiar Quantum Transport Properties of Graphene Nanoribbons, International Symposium on “Graphene Device: Technology, Physics and Modeling”(ISGD2008), University of Aizu, Fukushima, Japan, Nov. 17-19, 2008.
14. (口頭発表) K. Wakabayashi, Y. Takane, and M. Sigrist, Perfectly Conducting Channel of Disordered Nanographene Ribbons, 29<sup>th</sup> International Conference on Physics of Semiconductor, Rio de Janeiro, Brazil, July 27- Aug. 1, 2008.
15. (招待講演) K. Wakabayashi, Electronic transport properties and perfectly conducting channel of disordered graphene nanoribbons, Jun. 19, 2008, Aspen Center for Physics, Aspen, Colorado USA.
16. (シンポジウム講演) 若林克法(物材機構), 応用物理学会シンポジウム「革新的デバイス創成を指向した物理とテクノロジーの探索」, 計算科学手法によるカーボン素子の設計と物性予測(25分), (2010年9月15日 長崎大学文教キャンパス工学部1号館1F-12)
17. (招待講演) 若林克法(物材機構), MNC2010(23<sup>rd</sup> International Microprocess and Nanotechnology Conference, Nov.9-12,2010) 技術セミナー「グラフェン」, “理論計算からの興味 何が期待されるか”(45分), (2010年11月9日 リーガロイヤルホテル小倉)
18. (招待講演) 若林克法(物材機構), ナノグラフェンの電子物性と輸送特性, 物性研究所短期研究会「ディラック電子系の物性ーグラフェンおよび関連物質の最近の研究」(2009年10月22-24日 東京大学物性研究所)
19. (依頼講演) 若林克法(物材機構), ナノグラフェンの電子物性と輸送特性, 新世代研究所第2回ナノカーボン研究会, (2009年9月11日 新世代研究所)

20. (シンポジウム講演)若林克法(広大院先端物質), 領域7シンポジウム「グラフェン研究の焦点 ー新しい挑戦ー」日本物理学会(2008年9月 岩手大学)
21. (依頼講演)Katsunori Wakabayashi (NIMS-MANA), ナノグラフェンの特異な電子物性, 東京大学物性研究所理論セミナー, 2010年6月4日, 東京大学物性研究所.
22. (依頼講演) Katsunori Wakabayashi (NIMS-MANA), Peculiar Low-Energy Physical Properties of Nanographenes, MANA Seminar, 2010年1月29日, NIMS-MANA.
23. (依頼講演)若林克法(物材機構), グラフェンナノリボンにおける特異なナノスケール効果と電子物性, 電子情報技術産業協会セミナー, 2010年1月15日, 慶應義塾大学日吉キャンパス.
24. (依頼講演) 若林克法(物材機構), グラフェンにおける特異なナノスケール効果と電子物性, 物質・材料研究機構有機デバイスクラスターセミナー, 2010年1月6日, 物質・材料研究機構並木地区共同研究棟 4F.
25. (依頼講演) 若林克法(物材機構), グラフェンにおける特異なナノスケール効果と電子物性, 奈良女子大学凝縮系物理セミナー, 2009年12月15日, 奈良女子大学理学部.
26. (依頼講演) K. Wakabayashi, Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges, The 1<sup>st</sup> MANA/NIMS-CEMES/CNRS Joint Workshop on the Fusion of Theory and Experiment, 2009年10月13日. Thoulouse, France.
27. (依頼講演) K. Wakabayashi, Electronic Transport of Nanographene: Effect of Geometry and Edges, NIMS CMS Seminar, 2009年6月10日.
28. (依頼講演) 科学技術未来戦略ワークショップ「次世代を拓くナノエレクトロニクス」, 計算科学に基づくナノカーボンの電子物性, JST 研究開発戦略センター, 2009年3月9日, 若林克法(広島大学, JST さきがけ)
29. (依頼講演) ナノグラフェンにおけるエッジ状態が担う特異な電子物性, 東北大学理学部物理教室物性コロキウム, 2008年9月4日, 16:30-18:00, 若林克法(広島大学)
30. (依頼講演) Electronic Properties of Nano-Graphene Ribbons, K. Wakabayashi (Hiroshima Univ. and PRESTO/JST), 2007年10月23日. ETH-Zurich, Klaus Ensslin Group.