

# ナノスケール炭素物質複合構造体の電子物性解明

筑波大学・数理物質系・岡田晋

**目的:**本プロジェクトでは種々のナノスケール炭素物質の現実的応用において本質となる各種複合構造形成下での電子物性の解明を目的としている。

**内容:**密度汎関数理論に基づく第一原理計算からCNT、グラフェンナノリボンの電界下における振る舞いの解明を行った。特に、欠陥を有するCNTへの電界によるキャリア注入の欠陥構造、廃校依存性の解明、グラフェンナノリボンの外部静電界への応答特製の解明を行った。

**結果:**先ず、欠陥を有するCNTにおいては、欠陥がCNT上に分極を誘起しCNT内に内部電界が生じることが明らかになった。さらにこの内部電界とキャリア注入に関わる外部電界の協調、競合により、キャリア注入に要するゲート電圧にばらつきが生じることを明らかにした。次に、グラフェンナノリボンの外部電界応答については、グラフェンの炭素結合間距離のわずかな違いに応じた電界遮蔽の強弱が存在することを明らかにした。また、グラフェンリボン横の真空領域に分布を持つ自由電子状態が、電界印加により低エネルギーシフトしフェルミレベルを横切ることを明らかにした。

**利用した計算機:** SX-Ace