

低次元ナノ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

異種物質と複合構造を形成した低次元ナノスケール物質の電子物性の解明。

内容

密度汎関数理論に基づく第一原理計算の手法と有効遮蔽媒質法を組み合わせることにより、既存の周期系向けの電子状態計算コードを用いて、グラフェンやCNT、遷移金属カルコゲン等の低次元ナノスケール物質と異種物質（原子、分子、外部一様電界等）からなる複合構造体の電子物性の解明を行った。

結果

電界効果トランジスタ構造を有するグラフェンに吸着されたAlナノ粒子が、そのゲート電極にたいする相対位置に依存して、グラフェンへのゲート電界による電界電荷注入の阻害を行う可能性があることを理論的に明らかにした。

利用した計算機 SX-ACE

ノード時間	4ノード通年借上
使用メモリ	60GB
ベクトル化率	98%
並列化	4並列

