

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、定常電界等）からなる複合構造体の電子物性の解明を行った。さらに、新しいナノ構造物質の物質設計を行った。

結果

立体形状を有する炭化水素分子を構成単位とした2次元、3次元重合構造体の物質設計を行い、それらが極めて得意な電子物性を有する半導体となることを予言した。

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 |

