

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

2層遷移金属カルコゲン化合物をチャネルとする薄膜トランジスタへの電解効果によるキャリア注入現象が、両層の相対積層構造、電界強度、注入キャリア濃度に強く依存する子を明らかにした。

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~120GB
ベクトル化率	98%
並列化	4~16並列

