

複合構造を形成したナノ炭素物質の電子物性解明

筑波大学 数理物質系 岡田晋

目的

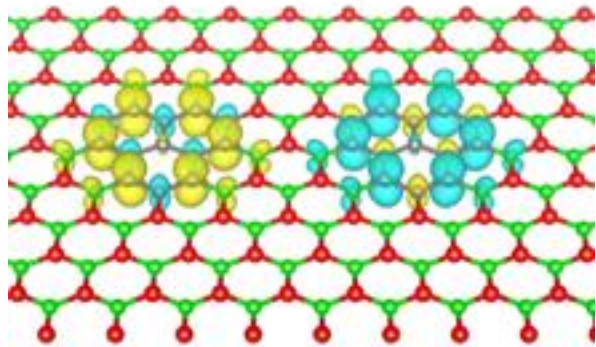
異種物質と複合構造を形成したナノスケールカーボン物質の電子物性の解明。

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等のナノスケール炭素物質の異種物質（原子、分子、外部一様電界等）との複合構造形成下における電子物性の解明を行った。

結果

グラフェンリボンに平行に一様電界を印加することで、端の外側の真空領域に自由電子状態が発現し新たな伝導チャネルとなりえることを示した。また、CNTの薄膜においては、低いキャリアドーピング時において印加電界と逆向きの電界が誘起されることを明らかにした。



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
ベクトル化率	98%
並列化	4並列

図：h-BN中に埋め込まれたグラフェン断片のスピン相互作用