

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、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。

結果

グラフェン端からの電界効果電子放出現象のシミュレーションから、放出電流がグラフェンの端形状や、端に吸着した化学官能基種に強く依存することを明らかにした。放出電流の電界強度依存性も明らかにし、一般に放出電流は印加電界の増加に伴い増加す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

