

原子層ナノ構造物質複合系の電子状態計算

岡田晋（筑波大学 数理物質系）

グラフェンを始めとする原子層ナノ物質は、低次元性よりその稠密な原子ネットワークに比して非常に大きな表面領域を有している。このため、稠密な原子ネットワークの作る電子系が本質的になんらかの形で表面の暴露されている。また、同時に、他の低次元異種物質やバルク物質との複合構造を容易に形成することが可能である。このことは、これら原子層ナノ物質の基礎物性測定やその応用においては、この高い表面領域に起因する電子物性変調、すなわち異種物質との複合構造形成による電子状態の変調を考慮に入れる必要がある。我々は、グラフェンや CNT 薄膜といったナノスケール炭素物質が欠陥や構造変形有する場合や、階層構造を有する場合に着目し、そのような複合構造系の電子物性の解明を第一原理電子状態計算の手法を用いて行った。本講演では、電界印加下における異種物質が吸着されたグラフェンと CNT 薄膜に着目し、電界により誘起される蓄積電荷の分布に対し、複合構造体の電子状態、電界に対する配置が強く影響を及ぼすことを報告する。