

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 計算科学によるグラファイト系材料の基礎物性解明とそのデバイス応用における設計指針の開発

2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名(研究機関名・職名は研究参加期間終了時点):

研究代表者

岡田 晋 (筑波大学数理物質系 教授)

主たる共同研究者

大谷 実 ((独)産業総合技術研究所ナノシステム研究部門 上級主任研究員)

中田 恭子 (青山学院大学理工学部 准教授)

3. 事後評価結果

○評点

A 期待通りの成果が得られている

○総合評価コメント:

グラフェンを中心としたグラファイト系材料のデバイス応用における現実的課題の抽出を計算科学の立場で適切なシミュレーションを行い、ユニークな知見を得て設計指針に対応させたことは、当初の目標を達成したと評価できる。具体的には、グラフェンをチャネル材料として用いる場合のエッジ形状、非平面性、層構造、欠陥の有無、ゲート絶縁膜界面、コンタクト抵抗、ゲート電界の効果などのパラメータとデバイス特性との関連を系統的かつ網羅的に明らかにした。グラフェンのもつ超高移動度を保ちつつバンドギャップを拡大することは本質的に難しく、結果として超高速・低リークのスウィッチング素子のチャネルには適用しにくいことを示唆した。ドーピングに依らないp型・n型半導体相の形成可能性、グラファイト材料系のフォノン物性、光子との相互作用など、当初想定外の成果も少なからずあった。

3つのグループ間の議論や連携を通した新デバイス考案・知財化の活動は十分でなかった。最終的に、1次元グラファイト構造における多重励起子生成に基づく新たな光電変換デバイスを考案し特許出願に結びつけたことは評価したい。

グラフェン材料のデバイス応用を目指して様々な観点から物性予測を行い、発表論文が100編以上と活発な成果は評価できる。ただし、まだ基礎的知見に留まっているので、新規デバイスの考案を目指して理論的検討を継続すると共に実験グループとの連携・検証に発展させて欲しい。