

岡田 晋

筑波大学・数理物質系  
教授

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

## § 1. 研究実施体制

「筑波大」グループ

① 研究代表者: 岡田 晋 (筑波大学数理物質系・教授)

② 研究項目

- ・グラフェン／金属界面の基礎物性の理論的解明
- ・原子・分子吸着グラフェンの基礎物性の理論的解明
- ・グラフェン・ナノ炭素物質の励起状態の物性解明

(2)「産総研」グループ

① 主たる共同研究者: 大谷 実 (産業技術総合研究所ナノシステム部門・研究員)

② 研究項目

- ・グラフェン／絶縁体複合構造の物性解明
- ・電界下におけるグラフェン、ナノ炭素物質、ならびにこれら高次複合構造体の基礎物性解明

(3)「青山学院大学」グループ

① 主たる共同研究者: 中田 恭子 (青山学院大学理工学部・准教授)

② 研究項目

- ・トポロジー制御による半導体グラフェンの探索
- ・グラフェン関連物質の長周期変調構造の探索

## § 2. 研究実施の概要

種々のグラファイト系物質に着目し、計算科学の手法を基にして、グラファイト系材料の物性解明、グラファイト系材料と広義異種物質からなる複合構造の物性解明を行い、グラファイト系材料において、その物性の本質となる形状と異種物質との界面が関わるナノサイエンスの構築がねらいである。さらに、そこで得られた知見を基盤として、これらのグラファイト系材料を用いた、種々の機能デバイスの設計指針を理論的に提示することを目指す。

25年度は、複合構造の基礎物性解明として、外部電界中に置かれたグラフェンリボンと有限長カーボンナノチューブの電界応答現象を明らかにし、これまであまり顧みられていなかった横方向電界がこれらグラファイト系材料の物性に及ぼす影響を調べた。その結果、ジグザグ型に近い原子配置をネットワークの端近傍に有するグラファイト系物質において、その端近傍の原子位置において、横方向の外部電界を過剰に遮蔽することが明らかになった。すなわち、これらのグラファイト系材料の端において、印加外部電界に対して逆方向の電界が誘起され、端近傍に電極から置いて注入された電子／正孔が散乱を受けてグラファイト系材料の伝導特性が低下する可能性があることを予言し、グラファイト系材料のデバイス応用に於いては、材料の端形状と電界印加方向の制御が必須であることを示した(図 A)。この結果は、これまで我々が明らかにしてきた、グラファイト系材料の保持基板との相互作用による物性変調に加えて、鉛直、平行外部電界による影響も同様に重要な要素であり、両者の影響を包含したデバイス構造の設計を行う必要があることを明示し、最終年度に於ける機能性デバイス設計指針の提示の基盤となるものである。

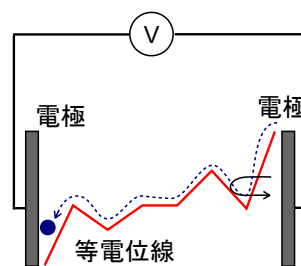


図 A 電極間に於ける等電位線とポテンシャル障壁により散乱されるキャリア（黒丸）と透過するキャリア（青丸）

グラファイト系物質の新奇構造探索と物質設計として、五角形の見から構築される2次元の炭素結晶相の提示を行った(図 B)。この構造は静的／動的共に安定な物質で、一度合成されるとその特異な結晶構造を保持することが可能であることを示した。さらに、6員環を一つも有さないにもかかわらず、グラフェンの特徴である2本の線形分散関係を持つバンドをフェルミレベル近傍に有し、併せて平坦バンドも有する特異な電子構造を有する炭素同素体である。また、このフェルミレベルに存在する平坦バンドにより、このシートは強磁性的な磁気秩序を基底状態で有する、全炭素強磁性体の物質候補となり得ることを予言した。

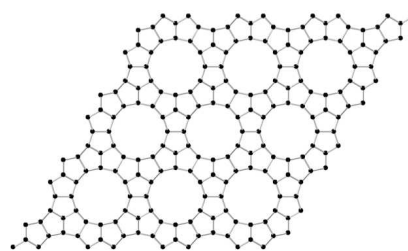


図 B 新奇5員環ネットワーク炭素同素体の構造

グラファイト系物質を用いた機能デバイスの理論的な設計指針の提示として、前年度に引続き、カーボンナノチューブ、グラフェンリボンの光電変換デバイスへの応用を見据えた、デバイス構造の提示と、そのもとの光電変換効率、光電流生成効率の理論的な見積りを行い、カーボンナノチューブ、グラフェンとダイヤモンドからなる複合構造が高い変換効率を有する光電デバイスの構成

要素となり得ることを提示し、高効率光電変換デバイスの設計の指針提示を行った。

### § 3. 成果発表等

#### (3-1) 原著論文発表

##### 論文詳細情報(国内)

1. 小鍋哲、岡田晋、“一次元ナノカーボン物質における高効率光電変換の基礎物理”、固体物理第 48 巻第 8 号 31-40 頁 2013.

##### 論文詳細情報(国際)

1. Derek Ashley Thomas, Takahiro Yamamoto, Tomofumi Tada, and Satoshi Watanabe, "Non-Equilibrium Thermal Transport Simulation of Conical Carbon Nanofibers" Transactions of the Materials Research Society of Japan Vol. 38, 183 (2013).

2. Yasuhiro Takada and Takahiro Yamamoto, "Wave Packet Dynamics Simulation on Electronic Transport in Carbon Nanotubes with Randomly Distributed Impurities" Japanese Journal of Applied Physics Vol. 52, 06GD07 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.06GD07)

3. Teppei Kato, Shinji Usui, and Takahiro Yamamoto, "Nanostructural Effects on Thermoelectric Power of Graphene Nanoribbons" Japanese Journal of Applied Physics Vol. 52, 06GD05 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.06GD05)

4. Yoshikazu Homma, Shohei Chiashi, Takahiro Yamamoto, Kaname Kono, Daiki Matsumoto, Junpei Shitaba, and Shintaroh Sato, "Photoluminescence Measurements and Molecular Dynamics Simulations of Water Adsorption on the Hydrophobic Surface of a Carbon Nanotube in Water Vapor" Physical Review Letter Vol. 110, 157402 (2013). (DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.157402)

5. Satoru Konabe and Susumu Okada, "Enhanced Photocurrent in Single-Walled Carbon Nanotubes by Exciton Interactions" Applied Physics Letters Vol. 102, 113110 (2013). (DOI: 10.1063/1.4798274)

6. Haruna Nitta, Yutaka Matsuo, Eiichi Nakamura, and Susumu Okada, "Magnetic Properties of Deca-Methyl Fullerenes: Radical Spin Interaction on Chemically Functionalized Fullerenes" Applied Physics Express Vol. 6, 045102 (2013). (DOI: 10.7567/apex.6.045102)

7. Satoru Konabe, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "High-Efficient Photoelectric Conversion in Graphene-Diamond Hybrid Structures: First-principles and Model Calculations" Applied Physics Express Vol. 6, 045104 (2013). (DOI: 10.7567/APEX.6.045104)

8. Junki Sone and Susumu Okada, "Massless Electrons on Hexagonal Dangling Bond Network on Hydrogen Deposited Diamond (111) and Si(111) Surfaces" Journal of the

- Physical Society of Japan Vol. 82, 064706 (2013). (DOI: 10.7566/jpsj.82.064706)
9. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Alkanes Adsorbed on Carbon Nanotubes" Japanese Journal of Applied Physics Vol. 52, 06GD10 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.04CN07)
  10. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, "Electronic Properties of Capped Carbon Nanotubes under an Electric Field: Inhomogeneous Electric-Field Screening Induced by Bond Alternation" Japanese Journal of Applied Physics Vol. 52, 06GD04 (2013). (DOI: 10.7567/JJAP.52.06GD04)
  11. Shota Kigure and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of C<sub>60</sub> Included in [n]Cyclacene Molecules" Journal of the Physical Society of Japan Vol. 82, 094717 (2013). (DOI: 10.7566/JPSJ.82.094717)
  12. Mina Maruyama and Susumu Okada, "A Two-dimensional sp<sup>2</sup> Carbon Network of Fused Pentagons: All Carbon Ferromagnetic Sheet" Applied Physics Express Vol. 6, 095101 (2013). (DOI: 10.7567/APEX.6.095101)
  13. Mark A. Bissett, Satoru Konabe, Susumu Okada, Masaharu Tsuji and Hiroki Ago, "Tuning the Chemical Reactivity of Graphene by Mechanical Strain" ACS Nano Vol. 7, pp. 10335 -- 10343 (2013). (DOI: 10.1021/nn404746h)
  14. Mina Maruyama and Susumu Okada, "Design of New Carbon Allotropes of Fused Small Fullerenes" Physica Status Solidi (c) Vol. 10, pp. 1620 -- 1623 (2013). (DOI: 10.1002/pssc.201300237)
  15. Ayaka Yamanaka and Susumu Okada, "Electrostatic Potential of Hydrogenated Finite-length Carbon Nanotubes under an Electric Field" Physica Status Solidi (c) Vol. 10, pp. 1624 -- 1627 (2013). (DOI: 10.1002/pssc.201300234)
  16. Tae-uk Park, Yoko Tomita, and Takashi Nakayama, "First-principles study of Pt-film stability on doped graphene sheets" Surface Science Vol. 621, pp. 7–15 (2014). (DOI: 10.1016/j.susc.2013.10.011)
  17. Mina Maruyama, Kyoko Nakada, and Susumu Okada, "Energetics and electronic structures of polymerized cyclobutadiene" Japanese Journal of Applied Physics Vol. 53, 035103 (2014). (DOI: 10.7567/JJAP.53.035103)
  18. Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, and Susumu Okada, "Electrostatic modulation of electron-states in MoS<sub>2</sub>: First-principles Calculations" Journal of Physics: Condensed Matter Vol. 26, 135001 (2014). (DOI: 10.1088/0953-8984/26/13/135001)
  19. Kengo Takashima and Takahiro Yamamoto, "Conductance fluctuation of edge-disordered graphene nanoribbon: Crossover from diffusive transport to Anderson localization" Applied Physics Letter, Vol. 104, 093105 (2014). (DOI: 10.1063/1.4867473)
  20. Yusuke Nakai, Kazuya Honda, Kazuhiro Yanagi, Hiromichi Kataura, Teppei Kato, Takahiro Yamamoto, and Yutaka Maniwa, "Giant Seebeck Coefficient in Semiconducting Single-Wall Carbon Nanotube Film" Applied Physics Express Vol. 7,

025103 (2014). (DOI: 10.7567/APEX.7.025103)

21. Shohei Chiashi, Tateki Hanashima, Ryota Mitobe, Kotaro Nagatsu, Takahiro Yamamoto and Yoshikazu Homma, "Water Encapsulation Control in Individual Single-Walled Carbon Nanotubes by Laser Irradiation"

The Journal of Physical Chemistry Letter Vol. 5, 408 (2014) (DOI: 10.1021/jz402540v)

22. Brandon C Wood, Tadashi Ogitsu, Minoru Otani, Juergen Biener , "First Principles-Inspired Design Strategies for Graphene-Based Supercapacitor Electrodes" Journal of Physical Chemistry C 118, 4-15 (2014). (DOI: 10.1021/jp4044013)

23. Junhao Lin, Ovidiu Cretu, Wu Zhou, Kazu Suenaga, Dhiraj Prasai, Kirill I. Bolotin, Nguyen Thanh Cuong, Minoru Otani, Susumu Okada, Andrew R. Lupini, Juan-Carlos Idrobo, Dave Caudel, Arnold Burger, Nirmal J. Ghimire, Jiaqiang Yan, David G.

Mandrus, Stephen J. Pennycook, Sokrates T. Pantelides, "Flexible metallic nanowires with self-adaptive Ohmic contact to semiconducting transition-metal dichalcogenide monolayers" Nature Nanotechnology (2014). (in press.)

### (3-2) 知財出願

該当なし