

計算物質科学による低次元複合構造体の物性探索と物質設計

筑波大学数理物質系物理学域 丸山実那

グラフェンやフラーレンなどのナノ物質は、自身の幾何構造に強く依存した特異な電子状態を有する。加えて、自身を構成単位とした凝集構造や、他のナノ構造物質との複合構造を形成することが可能である。これらの高次構造は、構成単位となるナノ物質の物性の単純な代数和を超える特異な電子状態を示すことが知られている。とりわけ、凝集構造や複合構造中でのナノ物質間の配列や配列に起因する空隙は、物性を決定づける新たなパラメータとなっている。講演者はこれまで、計算物質科学の手法を用いて、構造と物性の間の強い相関関係に着目した新奇低次元複合構造体の物質探索とその物性解明を行ってきた。本セミナーでは、スピン分極や双極子モーメントを有する炭化水素分子を構成単位とした分子重合構造の物質設計とその物性探索の結果を示す(図 a) [1,2]。さらに、2次元半導体物質である、遷移金属カルコゲン化合物薄膜やその複合構造体の電子状態に対する電界効果に関する最近の研究成果について報告する(図 b) [3,4]。また、これら低次元ナノ複合構造体に関連する、実験グループとの共同研究に関する取り組みについても紹介する [5,6]。

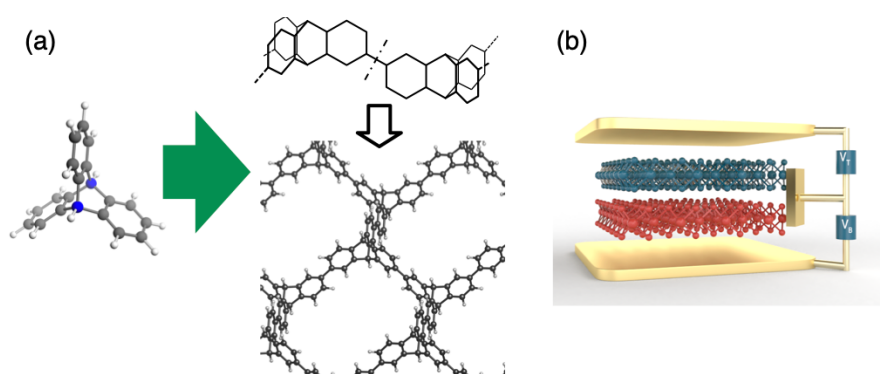


図:(a) 炭化水素分子からなる重合構造. (b) 二層遷移金属カルコゲン化合物電界効果トランジスタ.

- [1] M. Maruyama, N. T. Cuong, S. Okada, *Carbon* **109**, 755 (2016).
- [2] Y. Fujii, M. Maruyama, S. Okada, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 125203 (2018).
- [3] M. Maruyama, K. Nagashio, S. Okada, *ACS Appl. Electron. Mater.* **2**, 1352 (2020).
- [4] M. Maruyama, K. Nagashio, S. Okada, *Phys. Rev. Appl.* **14**, 044028 (2020).
- [5] M. Maruyama, et al. *ACS Appl. Nano Mater.* **6**, 5434 (2023).
- [6] R. Xiang, et al. *Science* **367**, 537 (2020).