

令和 5 年 6 月 16 日現在

機関番号：12102

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2022

課題番号：20K22323

研究課題名（和文）電界下でのナノスケール炭素物質のダイナミクス解明

研究課題名（英文）Dynamics of nanoscale carbon materials under an electric field

研究代表者

高 燕林（Gao, Yanlin）

筑波大学・数理物質系・助教

研究者番号：50847051

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、高効率な電界電子放出源の候補であるグラフェンやカーボンナノチューブ等のナノ炭素物質に注目し、量子論に立脚した計算物質科学の手法を用いて、電界放出時に発生する、種々のナノ炭素物質やそれらと異種物質からなる複合系の構造ダイナミクスの理論解明を行った。その結果、アームチエア端が高い電流密度を与えることとOHやNHの吸着による電界放出電流密度の増加を予言した。また、二層グラフェンの電界効果キャリア蓄積現象の解析、五員環と六員環からなる二次元新奇炭素ネットワークの物質設計、正電界下でのグラフェンの端周辺のNe原子のダイナミクス、やダイヤモンドナノワイヤの構造と電子特性の解明も行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の学術的意義は、計算物質科学の手法を用いて、電界下でナノ構造物質並びに、その端近傍における原子ダイナミクスの解明を行った点にある。すなわち、強電場が印加されたグラフェン等のナノ構造物質において、その形状や電場に対する配向がダイナミクスと電子物性決定を決定する極めて重要な要素であることを明らかにした。この結果をもとに、今後の高効率な電界放出デバイスの設計指針の提示を行った点が社会的な意義となる。

研究成果の概要（英文）：In this work, we focused on nano-carbon materials such as graphene and carbon nanotubes, which are candidates for highly efficient field electron emission sources. Theoretical elucidation of the structural dynamics of nanocarbon materials and composite systems composed of nano-carbon materials and other nano-materials was carried out. We found that the armchair edge would give a high current density and that the adsorption of OH and NH would increase the field emission current density of graphene. Additionally, we also investigated carrier accumulation phenomena in bilayer graphene under an external electric field, structure and electronic properties of novel two-dimensional carbon networks consisting of five- and six-membered rings, dynamics of Ne atoms around the edges of graphene under a positive electric field, and structure and electronic properties of diamond nanowires.

研究分野：物性理論

キーワード：ナノ炭素物質 電界効果 ダイナミクス

1. 研究開始当初の背景

グラフェンやカーボンナノチューブ (CNT) 等のナノカーボン物質は高いアスペクト比、 sp^2 共有結合が生み出す高い機械剛性と安定性、および優れた導電性のために、高効率電界エミッタ材料の候補と見なされている。電界電子放出によって、分子や原子をグラフェンから脱離やグラフェンに吸着し、ラフェンの構造が変え、逆にグラフェンの電界電子放出効率に影響を及ぼすことが示されている。ナノカーボン物質の電界電子放出源や種々のデバイスへの応用において、電界によって誘起される構造変調の解明は喫緊の課題である。本研究課題は計算物質科学の手法を用い、電界下でのダイナミクスの計算で、ナノスケール炭素物質の安定性と電界下での構造変化の微視的な過程を解明し、安定で高効率な電界放出源の設計指針の提示することである。

2. 研究の目的

本研究の目的は、電界電子放出現象をはじめとする、種々の強電界下におけるナノスケール炭素物質の構造変調の微視的なダイナミクスの理論的な解明にある。

3. 研究の方法

量子論に立脚した計算物質科学の手法を用いて、計算を行う。特に、密度汎関数理論と有効遮蔽媒質法を用いることにより、第一原理的に種々のナノカーボン物質ならびにその複合構造体の電界下での原子ダイナミクスと電子物性の解明をおこなう。

4. 研究成果

鉛直電場下における2層グラフェンへのキャリア蓄積における積層効果

テキストボックス 2層グラフェンの電子構造は2層の積層構造に依存することが知られている。さらに、そこに鉛直電場を印加することにより更なる電子構造変調が誘起される。ここでは、2重ゲート電極を有する、2層グラフェン電界効果トランジスタに対して、外部鉛直電場を印加しつつキャリアの注入を行い、注入されたキャリアの空間分布の解析をおこなった。Bernal, AA, 28° 捻り積層の3種類の積層構造を考え、それらを2枚の電極下におき、下側電極を正極、上側電極を負極として電場印加、さらに電子の注入をおこなった (図1)。その結果、AB 積層構造では上側のグラフェンに選択的に電子注入がなされるのに対して、捻り積層構造では下側のグラフェンへの電子蓄積が支配的であった。さらに、興味深いことに、AA 積層構造では電場下にもかかわらず2層のグラフェンにほぼ等価に電子の蓄積が見られた。このことは、2層グラフェンの積層構造を変調させ、かつ鉛直電場を印加することで2層グラフェンでのキャリア分布が制御可能であることを明らかにしたものである。

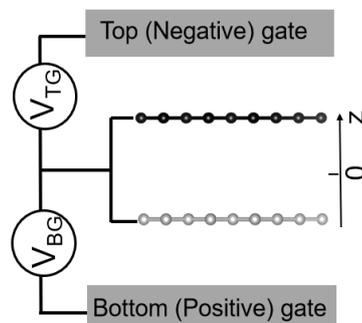


図1: 2層グラフェン電界効果トランジスタの計算モデル。

電場下におけるグラフェン端近傍の荷電粒子の動力学

テキストボックス Field ion microscopy (FIM) は、イオンを用いて物質表面は端の構造を原子レベルで観測することが可能である。ここでは、第一原理分子動力学法を用、FIMにおけるイオンのダイナミクスの微視的理解を目指すため、グラフェン端近傍における Ne イオンのダイナミクスの解明をおこなった (図2)。解析の結果、イオンの初期位置、グラフェン端の形状に強く依存しすることが明らかになった。具体的には、もしイオンがグラフェン端直上に位置している場合、イオンはグラフェン表面に向けて移動する。イオンの初期位置がアームチェア端の側面に位置する時は、速やかに対向電極へ移動する。さらに、イオンがジグザグ端側面に位置する場合、イオンは初期位置にとどまる傾向がある。静電ポテンシャルの解析から、これら電場下におけるグラフェン端近傍のイオンダイナミクスの起源は、電場によりイオンとグラフェン全体に誘起された分極と外部電場との相互作用に起因することを明らかにした。

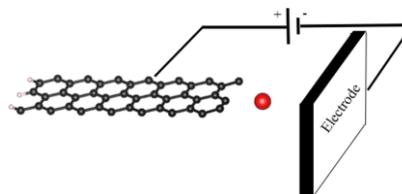


図2: グラフェン端近傍の荷電イオンの動力学解析の計算モデル。黒丸は炭素原子、赤丸は Ne 原子を表す。

ダイヤモンドナノワイヤの外部電場応答

ダイヤモンドは炭素間の共有結合に起因する極めて高い構造と電子構造の安定性から、パワー半導体材料として注目されている。ここでは、ダイヤモンドデバイスの微細化を念頭に置いて、ダイヤモンドナノワイヤの外部電場に対する応答特性の表面終端とワイヤ形状依存性の解明を行った。計算の結果、ダイヤモンドナノワイヤの外部電界応答は、表面修飾、ワイヤ形状に強く依存することが明らかになった(図3)。清浄表面を有するナノワイヤは、その表面で外部電場を完全に遮蔽するのに対して、水素終端されたナノワイヤでは、ナノワイヤ内に有限の電場が分布し、遮蔽が完全でないことが明らかになった。これは、ナノワイヤの電子構造に起因する現象であり、金属的な電子構造が、清浄表面での電場遮蔽の起源である。また、ナノワイヤの鋭角なコーナにおいて、外部電界の強い集中が生じ、ナノスケール構造物に対しても古典電磁気学と同様の現象が観測されることを明らかにした。すなわち、ダイヤモンドナノワイヤの電界効果半導体デバイス応用においては、ワイヤ表面の処理と形状制御が重要であることを予言した。

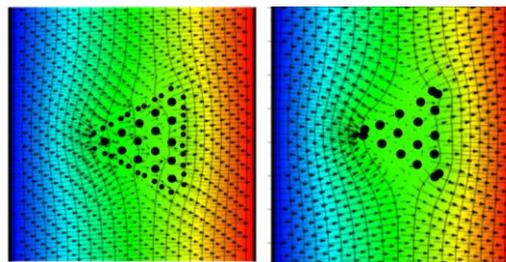


図3 水素終端表面と清浄表面を有するダイヤモンドナノワイヤ周囲の電界分布と電気力線。黒丸は原子位置を表す。各図の左右端に平行平板電極が存在する。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Gao Yanlin, Okada Susumu | 4. 巻 28 |
| 2. 論文標題 Dynamics of a charged Ne atom near graphene edges under a positive static electric field | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 FlatChem | 6. 最初と最後の頁 100265 ~ 100265 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.flatc.2021.100265 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Okada Susumu, Cuong Nguyen Thanh, Gao Yanlin, Maruyama Mina | 4. 巻 185 |
| 2. 論文標題 Spiro-graphene: A two-dimensional metallic carbon allotrope of fused pentagons | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Carbon | 6. 最初と最後の頁 404 ~ 409 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2021.09.033 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Maruyama Mina, Gao Yanlin, Yamanaka Ayaka, Okada Susumu | 4. 巻 29 |
| 2. 論文標題 Geometric structure and piezoelectric polarization of MoS2 nanoribbons under uniaxial strain | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 FlatChem | 6. 最初と最後の頁 100289 ~ 100289 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.flatc.2021.100289 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |
| 1. 著者名 Okada Susumu, Cuong Nguyen Thanh, Gao Yanlin, Maruyama Mina | 4. 巻 91 |
| 2. 論文標題 Geometric and Electronic Structures of Spiro-graphene Comprising Fused Pentagons and Octagons | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan | 6. 最初と最後の頁 404 ~ 409 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.024602 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Maruyama Mina、Gao Yanlin、Thanh Cuong Nguyen、Okada Susumu | 4. 巻 15 |
| 2. 論文標題 A two-dimensional magnetic carbon allotrope of hexagonally arranged fused pentagons | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Applied Physics Express | 6. 最初と最後の頁 035001 ~ 035001 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ac55e8 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|---------------------------------|
| 1. 著者名 Zhang Yan、Kim Heejun、Zhang Wenjin、Watanabe Kenji、Taniguchi Takashi、Gao Yanlin、Maruyama Mina、Okada Susumu、Shinokita Keisuke、Matsuda Kazunari | 4. 巻 34 |
| 2. 論文標題 Magnon Coupled Intralayer Moire Trion in Monolayer Semiconductor-Antiferromagnet Heterostructures | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Advanced Materials | 6. 最初と最後の頁 2200301 ~ 2200301 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.202200301 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Gao Yanlin、Okada Susumu | 4. 巻 125 |
| 2. 論文標題 Electronic properties of diamond nanowires under an external electric field | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Diamond and Related Materials | 6. 最初と最後の頁 109029 ~ 109029 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.diamond.2022.109029 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名 Gao Yanlin、Okada Susumu | 4. 巻 157 |
| 2. 論文標題 Edge morphology effect on field emission properties of graphene thin films | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Carbon | 6. 最初と最後の頁 33 ~ 39 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2019.10.010 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Yoneyama Kazufumi, Maruyama Mina, Gao Yanlin, Okada Susumu | 4. 巻 59 |
| 2. 論文標題 Mechanical properties of carbon nanotube under uniaxial tensile strain | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 SIID02 ~ SIID02 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ab7f5a | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Gao Yanlin, Okada Susumu | 4. 巻 127 |
| 2. 論文標題 Structural effects on carrier doping in carbon nanotube thin-film transistors | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 134301 ~ 134301 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0004886 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Gao Yanlin, Maruyama Mina, Okada Susumu | 4. 巻 13 |
| 2. 論文標題 Influence of interlayer stacking arrangements on carrier accumulation in bilayer graphene field effect transistors | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Applied Physics Express | 6. 最初と最後の頁 065006 ~ 065006 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab88c4 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Okada Susumu, Maruyama Mina, Gao Yanlin | 4. 巻 13 |
| 2. 論文標題 Asymmetric carrier penetration into hexagonal boron nitride in graphene field-effect transistors | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 Applied Physics Express | 6. 最初と最後の頁 075005 ~ 075005 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab9762 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-----------------------------|
| 1. 著者名 Koyama Takeshi, Sugiura Junpei, Koishi Tomonari, Ohashi Ryosuke, Asaka Koji, Saito Takeshi, Gao Yanlin, Okada Susumu, Kishida Hideo | 4. 巻 124 |
| 2. 論文標題 Excitation Energy Transfer by Electron Exchange via Two-Step Electron Transfer between a Single-Walled Carbon Nanotube and Encapsulated Magnesium Porphyrin | 5. 発行年 2020年 |
| 3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C | 6. 最初と最後の頁 19406 ~ 19412 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c06766 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名 Gao Yanlin, Okada Susumu | 4. 巻 14 |
| 2. 論文標題 Carrier distribution control in bilayer graphene under a perpendicular electric field by interlayer stacking arrangements | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Applied Physics Express | 6. 最初と最後の頁 035001 ~ 035001 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/abdd76 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名 Okada Susumu, Gao Yanlin, Maruyama Mina | 4. 巻 60 |
| 2. 論文標題 Modulation of intertube band dispersion relation of carbon nanotube bundles by symmetry and intertube wave function coupling | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 025002 ~ 025002 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/abda07 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計5件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件)

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yanlin Gao, Susumu Okada |
| 2. 発表標題 Field-induced dynamics of Ne atom around graphene edges |
| 3. 学会等名 The 60th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yanlin Gao, Susumu Okada |
| 2. 発表標題 Dynamics of a neon atom around the graphene edge under a positive electric field |
| 3. 学会等名 The Physical society of Japan 2021 Annual (76th) Meeting |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yanlin Gao, Susumu Okada |
| 2. 発表標題 Geometric and electronic structures of diamond nanowires |
| 3. 学会等名 The 68th JSAP Spring Meeting 2021 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Yanlin Gao, Susumu Okada |
| 2. 発表標題 Carrier control in bilayer graphene dual-gate field effect transistors by interlayer atomic arrangement |
| 3. 学会等名 The 59th Fullerene-Nanotube-Graphene General Symposium |
| 4. 発表年 2020年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Yanlin Gao, Susumu Okada |
| 2. 発表標題 Carrier control in bilayer graphene dual-gate field effect transistors by interlayer atomic arrangement |
| 3. 学会等名 JSAP Autumn Meeting 2020 |
| 4. 発表年 2020年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|--|---------------------------|-----------------------|----|
|--|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|