

ナノチューブにおけるアドアトム・不純物の構造及び物性に関するシミュレーション

メタデータ	言語: jpn
	出版者:
	公開日: 2021-01-25
	キーワード (Ja):
	キーワード (En):
	作成者: Saito, Mineo
	メールアドレス:
	所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00060128

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



◀ Back to previous page

ナノチューブにおけるアドアトム・不純物の構造及び物性に関するシミュレーション

Publicly

Project Area	Carbon nanotube nanoelectronics
Project/Area Number	22016003
Research Category	Grant-in-Aid for Scientific Research on Priority Areas
Allocation Type	Single-year Grants
Review Section	Science and Engineering
Research Institution	Kanazawa University
Principal Investigator	斎藤 肇雄 金沢大学, 数物科学系, 教授 (60377398)
Co-Investigator(Kenkyū-buntansha)	石井 史之 金沢大学, 数物科学系, 准教授 (20432122)
Project Period (FY)	2010 – 2011
Project Status	Completed (Fiscal Year 2011)
Budget Amount *help	¥1,900,000 (Direct Cost: ¥1,900,000) Fiscal Year 2011: ¥900,000 (Direct Cost: ¥900,000) Fiscal Year 2010: ¥1,000,000 (Direct Cost: ¥1,000,000)

Keywords ナノチューブ / 不純物 / 物性 / 磁性 / 第一原理計算 / スピン分極

Research Abstract

グラフェン・ナノチューブのナノエレクトロニクス応用において欠陥・不純物の制御が重要であり、本研究では、欠陥・不純物の第一原理に基づくシミュレーションを行う。本年は、水素不純物の研究を行った。まず、グラフェンでは水素原子が1個吸着すると1μBの磁気モーメントが発生することが分かった。水素の1s軌道とグラフェンのDirac cone点における波動関数の混成によって生じた波動関数にマジョリティスピンを持った電子が占有することにより、スピン分極が生じる事が分かった。次に、水素原子が2個吸着する場合であるが、2個の水素原子は、最近接の関係にある炭素原子と結合を作る事が分かった。このとき、二つの水素原子はグラフェン面の上下に存在する構造が最安定であると結論された。いっぽうに、奇数個の水素原子が吸着した最安定構造では、1μBの磁気モーメントが発生し、偶数個の水素原子が吸着した最安定構造では、非磁性の電子構造が最安定である事がわかった。このことは、ナノチューブでも同様である事がわかった。ナノチューブに水素原子が1個吸着する場合、水素原子はチューブの外側に存在する構造が最安定である事が分かった。また、2個吸着する場合も、水素原子はチューブの外側に存在することが結論される。吸着のエネルギーは一般にナノチューブの方が、グラフェンよりも大きく、グラフェンよりも、ナノチューブの方が水素化されやすい事が分かった。また、キャップのあるナノチューブについて計算したところ、吸着のエネルギーは、キャップ領域の方が、チューブ領域よりも大きく、キャップ領域の方が水素化されやすいと結論する。水素原子が1個吸着する場合、水素原子は、キャップ領域の5員環に吸着する構造が最安定である事が分かった。

Report (2 results)

- 2011 Annual Research Report
- 2010 Annual Research Report

Research Products (63 results)

		All	2012	2011	2010
		All	Journal Article	Presentation	
[Journal Article] Edge States of Bi Nanoribbons on Bi Substrates: First-Principles Density Functional Study				2012	▼
[Journal Article] First-Principles Calculations of Hydrogen and Hydrogen-Vacancy Pairs in Graphene				2011	▼
[Journal Article] First-Principles Calculation of the Interlayer Distance of the Two-Layer Graphene				2011	▼
[Journal Article] Magnetism in Dehydrogenated Armchair Graphene Nanoribbon				2011	▼
[Journal Article] Stability and Dynamical Process of Graphene Adatom and Its Dimer				2010	▼
[Journal Article] Magnetism in Graphene Nanoribbons on Ni(111) : First-Principles Density Functional Study				2010	▼

[Presentation] Electronic Structures of Adatom-vacancy Pair Defects in Nano-carbon Materials	2012	▼
[Presentation] First-principles calculations of hydrogen impurities in nano-carbon materials	2012	▼
[Presentation] 多層グラフェン/Ni(111)のRashba効果と電気伝導の第一原理計算	2012	▼
[Presentation] 第一原理計算によるBi薄膜のRashba効果の解析	2012	▼
[Presentation] First-Principles Study of Rashba Effect in the Graphene on Ni(111)	2012	▼
[Presentation] First-principles calculation of magnetism in graphene nanoribbons	2011	▼
[Presentation] Rashba effect of Bi(001) film	2011	▼
[Presentation] Hydrogen impurities in graphenes and carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] Rashba effect of Bi(001) structure	2011	▼
[Presentation] グラフェン・ナノチューブ上の固有欠陥における第一原理計算	2011	▼
[Presentation] First-principles calculations of hydrogen dimers in graphene and carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-principles calculation of healing of adatom-vacancy pair on carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] Ca3CoMnO6における三角格子の交換相互作用と電気分極の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] Magnetism and Transport Property of Graphene on Substrates	2011	▼
[Presentation] Fully relativistic calculation of Bi(001) films without inversion symmetry	2011	▼
[Presentation] Spin-Polarized Electronic States and Rashba Effect in the Graphene on Ni(111)	2011	▼
[Presentation] Magnetism and Transport Property of Graphene on Substrates	2011	▼
[Presentation] Edge state of zigzag Bi Nanoribbon and Bi substrate	2011	▼
[Presentation] グラフェン・ナノチューブにおけるアドアトム関連欠陥の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] First-principles study of healing of adatom-vacancy pair in carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-principles calculation of the interlayer distance of the two-layer graphene	2011	▼
[Presentation] シリコン中10原子空孔の特異な電子構造	2011	▼
[Presentation] Ca3CoMnO6の三角格子における磁気秩序と電気分極の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] カーボンナノチューブの電気伝導の第一原理計算:水素不純物と磁性電極の影響	2011	▼
[Presentation] 磁性電極を用いたグラフェンにおける伝導特性の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] ナノカーボン材料のナノシミュレーション	2011	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Hydrogen Impurities in Graphenes and Carbon Nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Defects in Graphenes and Carbon Nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-principles calculation of adatom-vacancy pair on carbon nanotubes	2011	▼
[Presentation] First-Principles Calculations of Di-Hydrogen on Graphene	2011	▼
[Presentation] カーボンナノチューブにおける電気伝導の第一原理計算:水素吸着の効果	2011	▼
[Presentation] 基板上グラフェンにおける磁性と伝導特性	2011	▼
[Presentation] Biエッジ状態の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] Adatom-vacancy Pair in Carbon Nanotubes : First-principles study	2011	▼

[Presentation] グラフェンシート上アドアトム・空孔対に対する第一原理計算	2011	▼
[Presentation] シリコン中10原子空孔の電子状態	2011	▼
[Presentation] Ca3CoMnO6における交換相互作用と電気分極の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] カーボンナノチューブの磁性と伝導の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] 水素吸着カーボンナノチューブにおける電気伝導の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] スピントロニクス/マルチフェロイクスの応用へ指向した材料探索	2011	▼
[Presentation] ノンコリニア磁性体の電子状態と物性の第一原理計算	2011	▼
[Presentation] 基板上グラフェンナノリボンの磁性	2010	▼
[Presentation] 有機物強誘電体の第一原理計算	2010	▼
[Presentation] Adatom related defects in carbon nanotubes	2010	▼
[Presentation] Biナノリボンの電子状態シミュレーション	2010	▼
[Presentation] 欠陥・不純物を含む炭素系物質の量子伝導の第一原理計算	2010	▼
[Presentation] マルチフェロイック酸化物における交換相互作用の第一原理計算	2010	▼
[Presentation] シリコン中強相関中心:10原子空孔	2010	▼
[Presentation] Electronic Structures of Bismuth Nanoribbon	2010	▼
[Presentation] シリコン10原子空孔の大規模第一原理計算	2010	▼
[Presentation] 水分子クラスタと有機物強誘電体におけるプロトン移動に関する第一原理計算	2010	▼
[Presentation] Biナノリボンのエッジ状態	2010	▼
[Presentation] カーボンナノチューブにおける、アドアトム・空孔対の安定構造	2010	▼
[Presentation] 基板上グラフェンナノリボンにおける磁性	2010	▼
[Presentation] グラフェンにおけるアドアトム・空孔対の第一原理計算	2010	▼
[Presentation] Magnetism in Graphene Nanoribbons on Substrates	2010	▼
[Presentation] Magnetism in Graphene Nanoribbons on Substrates	2010	▼

URL: