

## カーボンナノ構造体のシミュレーション

工学研究科 乾 徳夫



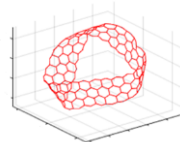
## キーワード

カーボンナノ構造体, グラフェン, ファンデルワールス力

## 研究概要

グラフェンをはじめとする低次元炭素材料は軽くて丈夫であり、また、優れた電気・熱伝導性を有するため、新奇電子デバイスやMEMSへの応用が提案されている。我々は主として優れた機械的性質を活かすためのシミュレーションを行っている。例として、ガスクラスターとグラフェンの衝突解析、グラフェンナノメカニカルスイッチの動特性解析を行ってきた。最近では、グラフェンに挟まれた液体やメビウスグラフェンと呼ばれるねじれたグラフェンについても分子動力学シミュレーションを行っている。

近年、グラフェン以外にも特異な物性を有する2次元物質が合成され、それらを組み合わせたファンデルワールスヘテロ構造体の研究が進められている。強固な結合ではなく弱いファンデルワールス力で結合することで新たな物性が発現すると期待されている。よって、今後は2次元物質間のファンデルワールス力が重要になると考えられるが、ファンデルワールス力は重力やクーロン力とは異なり、力の加算性が厳密には成り立たないため、正確なシミュレーションが困難である。現在はそれを克服するシミュレーション方法について研究を進めている。



メビウスグラフェン

## アピールポイント

ファンデルワールス力は量子揺らぎから生じ、また、ナノ構造体では多体効果を考慮しなければならないため計算が複雑である。しかし、逆の見方をすれば、ファンデルワールス力を変化させることのできる因子が多くあるとも言える。通常、ファンデルワールス力は引力であるが、それを斥力化することを目指している。

## 応用分野

グラフェンを利用した表面改質, 新奇カーボンナノ構造体合成