

絶縁基板上グラフェンの電子移動度解析

Electron Mobility Calculation for Graphene on Insulative Substrates

神戸大工¹, 阪大工², JST CREST³ ○平井 秀樹¹, 土屋 英昭^{1,3}, 鎌倉 良成^{2,3},森 伸也^{2,3}, 小川 真人¹Kobe Univ.¹, Osaka Univ.², JST CREST³ ○H. Hirai¹, H. Tsuchiya²,Y. Kamakura^{2,3}, N. Mori^{2,3}, M. Ogawa¹

E-mail: 136t258t@stu.kobe-u.ac.jp

グラフェンは室温で高い電子移動度を持つため電子デバイスへの応用が期待されている。グラフェンデバイスの実用化にはグラフェンと相性の良い基板が必要であるが、SiO₂ 基板上的グラフェンは電子移動度が 25,000 cm²/Vs 程度に制限されることが知られている[1]。一般に、絶縁基板上グラフェンの移動度低下の理由として、基板表面の荷電不純物による散乱や基板の極性光学フォノンによる散乱などが指摘されている。そのような中で最近、hexagonal BN (h-BN)基板を用いることで、電荷中性点付近において 140,000 cm²/Vs という今までにない高い電子移動度が得られることが報告され注目を集めている[2]。そこで本稿では、絶縁基板上グラフェンの電子移動度の低下を引き起こす散乱機構の解明を試みた。考慮した散乱は、グラフェン自体の音響フォノン散乱と光学フォノン散乱に加え、基板の極性光学フォノン散乱並びに荷電不純物散乱である。

図 1 に、本計算で想定した絶縁基板上グラフェンの模式図を示す。基板は SiO₂、HfO₂、h-BN の 3 種類を用いた。移動度の計算には半古典的モンテカルロ法を用いた。グラフェンのバンド構造は線形分散を仮定し、縮退の効果は散乱後の状態選択の可否にパウリの排他律を適用することで取り入れた。まず、基板の極性光学フォノン散乱の影響を調べるために、荷電不純物散乱を無視して計算を行った結果を図 2 に示す。横軸は電子密度である。“intrinsic” はグラフェン自体の音響フォノン散乱と光学フォノン散乱のみを考慮した場合の結果を表す。挿入図は HfO₂ 基板の結果の拡大図である。SiO₂ 基板と h-BN 基板は、intrinsic の場合とほぼ同等の電子移動度を示すが、HfO₂ 基板では他の基板よりもおよそ 3 桁ほど小さい移動度を示している。これは、HfO₂ 基板の光学フォノンエネルギーが $\hbar\omega_{op}$ (HfO₂) = 12.4 meV と熱エネルギー $k_B T \cong 26$ meV ($T = 300$ K) よりも小さいために、パウリの排他律による散乱の抑制が限定的になり、フェルミエネルギー付近の電子が HfO₂ 基板の極性光学フォノンにより激しく散乱されるためである[3]。一方、SiO₂ 基板と h-BN 基板は光学フォノンエネルギーが熱エネルギーよりも大きく、またその散乱レートも intrinsic よりも低い値を示すために、基板の極性光学フォノンによる移動度の低下はほぼ無視できる[3]。

次に、基板表面の荷電不純物による散乱を考慮した結果を図 3 に示す。計算では基板の極性光学フォノン散乱は無視している。荷電不純物の密度は、 2.5×10^{11} cm⁻² (SiO₂ 基板)と 2.5×10^{10} cm⁻² (h-BN 基板)を仮定した[4]。図 3 より、SiO₂ 及び h-BN 基板のどちらの場合も荷電不純物散乱によって移動度の大幅な低下が生じているが、h-BN 基板では電子密度が 10^{12} cm⁻² 以下で 170,000 cm²/Vs という比較的高い値を示しているのが分かる。これは、上記した通り h-BN 基板の低い荷電不純物密度によるものである。また図 3 の低電子密度時の移動度の値は、各実験結果の値(25,000 cm²/Vs on SiO₂; 140,000 cm²/Vs on h-BN)と良い一致を示していることから、計算精度にも問題がないことが確認できる。したがって、SiO₂ 及び h-BN 基板上で移動度を低下させる主な散乱機構は、荷電不純物散乱であることが明らかとなった。

文献 [1] Y.-W. Tan et al, PRL 99 (2007) 246803. [2] C. R. Dean et al., Nature Nanotech. 5 (2010) 722. [3] H. Hirai et al., submitted to JAP. [4] K. M. Burson et al., Nano Lett. 13 (2013) 3576.

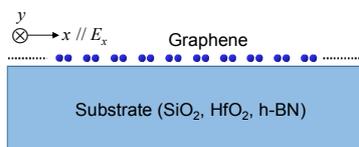


Fig. 1 Schematic of graphene-on-substrate system considered in this study.

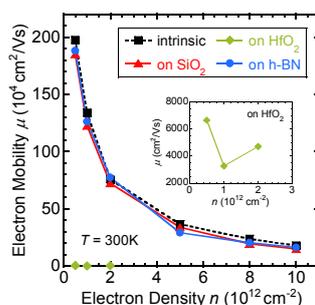


Fig. 2 Electron mobility computed by considering substrate-induced optical scattering. Charged impurity scattering is not included.

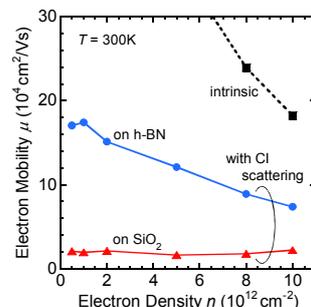


Fig. 3 Electron mobility computed by considering charged impurity scattering, where the substrate-induced optical scattering was ignored.