

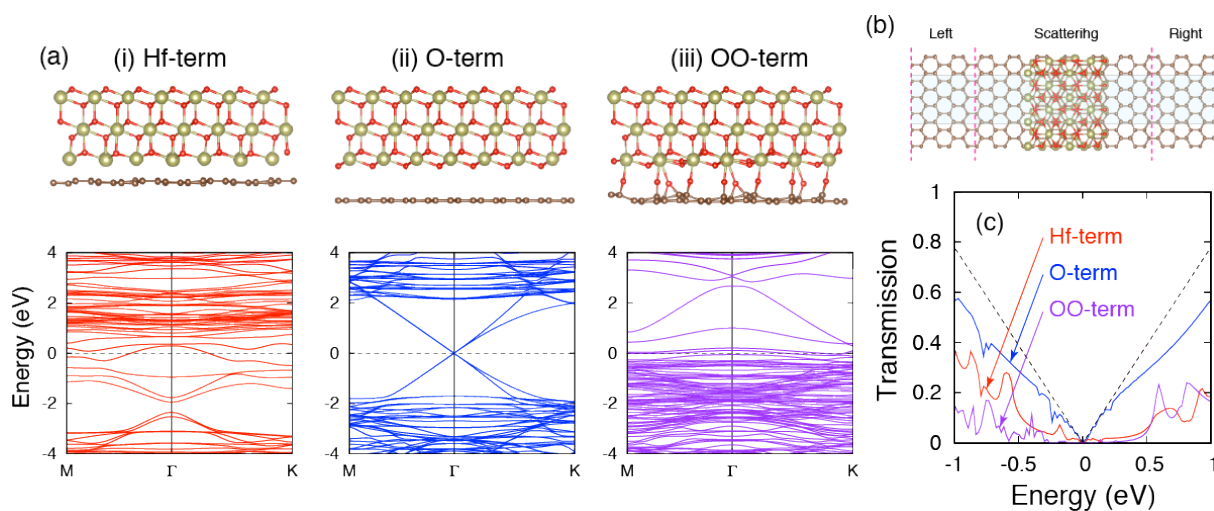
HfO₂ 下のグラフェンについての電気伝導の第一原理解析First principles analysis on electronic transport in graphene under HfO₂物材機構¹, 高効率電子デバイス材料コンソーシアム², 東大生産研³○金子 智昭^{1,2}, 大野 隆央^{1,2,3}NIMS¹, MARCEED², Tokyo Univ.³ ○Tomoaki Kaneko^{1,2}, Takahisa Ohno^{1,2,3}

E-mail: KANEKO.Tomoaki@nims.go.jp

グラフェンデバイスの作成においてはトップゲート絶縁膜の形成が重要な課題として考えられている。これまでの研究により、金属酸化物とグラフェンの相互作用は金属酸化物の界面構造に依存する事が報告されている。この伝導特性への影響は大変重要な問題と考えられるが、その報告はまだ無い。そこで、本研究では HfO₂ の堆積のグラフェン伝導への影響について、密度汎関数法、及び、非平衡グリーン関数法に基づく第一原理解析によって調べた。

図のように c-HfO₂ (111) とグラフェンの界面構造を作成し、PHASE コードで構造最適化をおこなった。先行研究に習い、図(a)のように Hf-term, O-term, OO-term の界面を考えた。得られた構造より図(b)に示すようなデバイス構造を作成し、ASCOT コードを用いて伝導特性を計算した。グラフェンと HfO₂ の重なりは 12.6 Angstrom である。

得られたトランスミッションを図(c)に示す。参考のために、グラフェンのトランスミッションを点線で示した。O-term の場合にはグラフェン線形分散が残っているためグラフェンのトランスミッションに近い良い伝導特性を示す事が分かった。一方、Hf-term, OO-term では HfO₂ 表面とグラフェンが強く結合を作ってしまうため、電子状態が乱されトランスミッションが減少している事が分かる。これらの構造の安定性についても議論した。HfO₂ をゲート絶縁膜として用いる場合には酸素分圧を低くする事が望ましい事が分かった。



図：(a) HfO₂ とグラフェンの界面構造とバンド構造。(b) デバイスの模型。(c) それぞれの界面構造の場合でのトランスミッションの計算結果。

謝辞：この研究は HPCI 戦略プログラムの支援を受けておこなわれました。