

## 窒素ドーピンググラフェンの構造安定性と電子状態

## Structural stability and electronic structure of N-doped graphene

電通大院先進理工<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup> 梅木 暁図<sup>1,2</sup>, ○ 赤石 暁<sup>1,2</sup>, 中村 淳<sup>1,2</sup>Department of Engineering Science, The Univ. of Electro-Communications (UEC-Tokyo)<sup>1</sup>CREST, Japan Science and Technology Agency (JST)<sup>2</sup>,Tsguto Umeki<sup>1,2</sup>, ○Akira Akaishi<sup>1,2</sup>, Jun Nakamura<sup>1,2</sup>

E-mail: akaishi@natori.ee.uec.ac.jp

グラフェンは、非常に高い電子移動度を持つことから半導体素材・ナノデバイスへの応用が期待される材料のひとつである。特に異種元素をドーピングしたグラフェンは、ドーピングする元素により p 型・n 型的な振る舞いをする事が示され [1]、シリコンに変わる電子材料としての期待が集まっている。ドーピングされたグラフェンの構造安定性・電子状態は、ドーパントのドーピング位置によって大きく変化することが知られている [2]。異種元素ドーピンググラフェンの電子状態を制御するためには、理論的アプローチによりその構造安定性・電気的特性を知ることが必要不可欠である。

本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、窒素を周期的にドーピングしたグラフェンの構造安定性と電子状態との関係を調べる。図 1 は窒素ドーピンググラフェンの計算モデルを示す。窒素原子が、Triangular 格子状または Honeycomb 格子状に周期的に配置された構造について、それぞれ格子の大きさを変えて (窒素原子のドーピング濃度を变化させて) 計算を行った。構造安定性の指標として、生成エネルギー

$$E_f = \frac{(E_{N\text{-doped}} + n_N \mu_C) - (E_{\text{graphene}} + n_N \mu_N)}{n_N} \quad (1)$$

を計算した。ここで、 $E_{\text{graphene}}$ ・ $E_{N\text{-doped}}$  はそれぞれグラフェン・窒素ドーピンググラフェンの全エネルギー、 $\mu_C$  はグラフェンにおける炭素原子 1 個あたりのエネルギー、 $\mu_N$  は窒素分子における窒素原子 1 個あたりのエネルギー、 $n_N$  はユニットセル中の窒素原子の数である。

図 2 は、ドーピングした窒素原子密度を変えたときの生成エネルギーを示す。ほとんどの場合、窒素密度が大きくなると生成エネルギーが大きくなる傾向を示すものの、特異的に生成エネルギーが小さくなる場合がある (図 2 の矢印)。生成エネルギーの振る舞いは電子状態と対応しており、Honeycomb 格子における特異的な生成エネルギーの減少は、系の半導体化がその主たる要因であることが明らかになった。

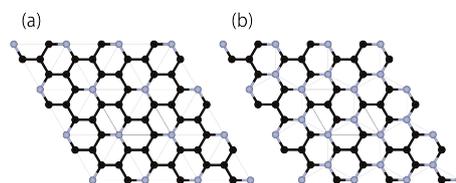
[1] R. J. Koch *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 075401 (2012).[2] H. J. Xiang, B. Huang, Z. Y. Li, S.-H. Wei, J. L. Yang and X. G. Gong, Phys. Rev. X **2**, 011003 (2012).

図 1: 窒素ドーピンググラフェンのモデル。黒色球、灰色球はそれぞれ炭素原子、窒素原子を示す。(a)Triangular 格子 (b)Honeycomb 格子上に窒素原子をドーピングした。

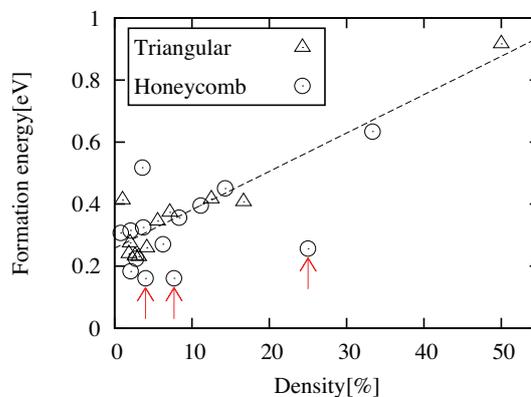


図 2: 生成エネルギーの窒素原子密度依存性。