

Al₂O₃ 下のグラフェンでの電気伝導の第一原理解析**First principles analysis on electronic transport in graphene under Al₂O₃**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, Univ. Tokyo³ ○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とらえられている。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 Al₂O₃ 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 Al₂O₃ 4 層からなる α -Al₂O₃ (0001) 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。Al₂O₃ 表面が Al で終端しているとグラフェンの線形分散はフェルミレベルに残り、O で終端していると大きく変調を受けてグラフェンは p-ドーピングになってしまう。得られた構造より図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。

得られたトランスミッションを図に示す。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。Al で終端した場合には、フェルミエネルギー近傍ではグラフェンと同じトランスミッションが得られている。これは Al で終端した表面ではグラフェンの線形分散が残るためである。一方、O で終端した場合には、グラフェンの電子状態が大きく変えられているためトランスミッションが減少してしまう。以上の事より、Al₂O₃ をトップゲート絶縁膜として用いる場合には Al で終端するようにするのが望ましい。

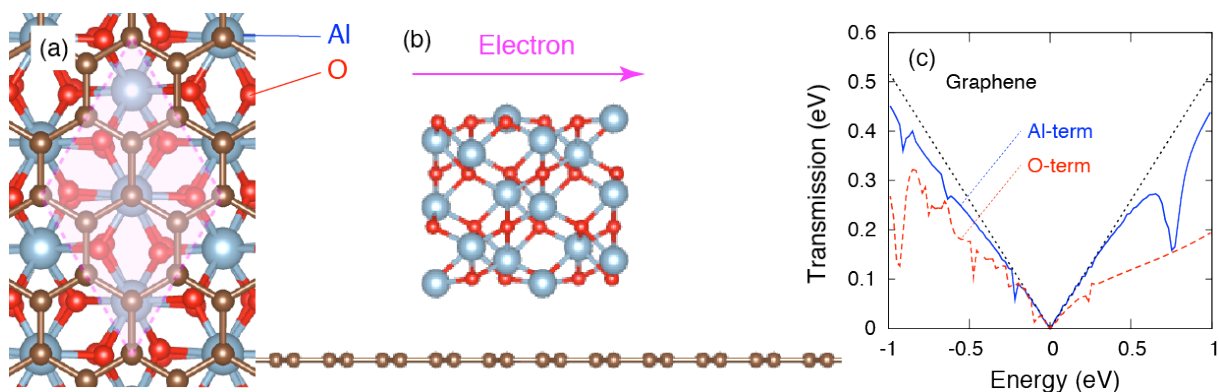


図:(a) Al₂O₃ とグラフェンの界面構造 (Al 終端の場合)。(b) デバイスの模型 (Al 終端の場合)。(c) トランスミッションの計算結果。

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。