

# SiO<sub>2</sub>/Si 上グラフェンナノリボンの大規模第一原理電子伝導計算

## Large-scale first-principles electronic transport calculations of graphene nanoribbons on SiO<sub>2</sub>/Si

富士通研<sup>1</sup>, 北陸先端大<sup>2</sup> ◯實宝 秀幸<sup>1</sup>, 尾崎 泰助<sup>2</sup>, 大淵 真理<sup>1</sup>

Fujitsu Laboratories Ltd.<sup>1</sup>, JAIST<sup>2</sup> ◯Hideyuki Jippo<sup>1</sup>, Taisuke Ozaki<sup>2</sup>, Mari Ohfuchi<sup>1</sup>

E-mail: jippo.hideyuki@jp.fujitsu.com

グラフェンは、電子デバイス中では通常 SiO<sub>2</sub> などの絶縁膜上に担持され、孤立グラフェンとは著しく異なる電気特性を示す[1,2]。我々はこれまでに、2000 原子程度からなるチャンネル長 9.91nm の SiO<sub>2</sub>/Si 上グラフェンナノリボンの大規模第一原理電子伝導計算を実施し、SiO<sub>2</sub>/Si 上では電流のオンオフ比が孤立グラフェンより 10<sup>8</sup> 程度小さくなることを示した[3]。今回、さらに大規模な 3000 原子程度からなる 15.1nm の長いチャンネル長の場合を計算し、チャンネル長 9.91nm の場合との電子伝導特性の比較を行った。

計算に用いた構造モデルを図 1 に示す。約 1.6eV のバンドギャップを持つ幅 0.7nm のアームチェア型グラフェンナノリボン (AGNR) のチャンネルが、半無限の金属 AGNR リードで挟まれている。チャンネル部分はそれぞれ厚さ 0.45nm、0.40nm の SiO<sub>2</sub>/Si に接している。計算には、第一原理計算コード OpenMX[4]を用いた。

9.91nm と 15.1nm の両方のチャンネル長について、非平衡グリーン関数法で求めたバイアス電圧がゼロの場合の透過率から見積もった電流値を図 2 に示す。ソース・ドレイン電圧が 0.5V の場合を模し、横軸のエネルギーを中心に 0.5eV の範囲で透過率を積分して電流を求めた。横軸はバックゲート電圧印加時の AGNR にかかる電圧と見なせる。SiO<sub>2</sub>/Si 上 AGNR では、電流のオフ領域が約 0.7eV シフトし、p 型伝導を示すことができる。オン電流にチャンネル長依存性はないが、孤立 AGNR では長いチャンネル長でオンオフ比が 10<sup>7</sup> 大きくなるのに対し、SiO<sub>2</sub>/Si 上 AGNR では 10<sup>5</sup> から変化しない。これは、SiO<sub>2</sub>/Si との相互作用による透過率ギャップ中への状態の染み出しがオフ電流を決定するためであると考えられる。オンオフ比 10<sup>5</sup> という値は、チャンネル長は異なる (210nm) もの、SiO<sub>2</sub> 上 GNR の実験結果[1]と一致している。このように、大規模計算を実現することで、将来のナノデバイスにおける環境との相互作用を含んだより現実的な電気伝導特性の予測が可能となった。

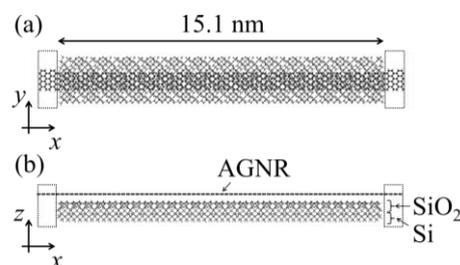


図 1. SiO<sub>2</sub>/Si 上 AGNR の構造モデルを(a)上と(b)横から見た図。両端の点線領域はリード電極のユニットセルを表す。

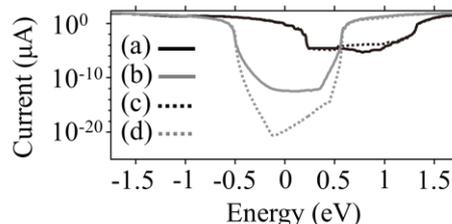


図 2. チャンネル長 9.91nm (実線)、15.1nm (点線) の場合の(a)(c)SiO<sub>2</sub>/Si 上 AGNR、(b)(d)孤立 AGNR の電流値。

[1] X. Li *et al.*, Science 319, 1229 (2008). [2] M.-W. Lin *et al.*, Nanotechnology 22, 265201 (2011).

[3] H. Jippo *et al.*, Appl. Phys. Express, to be published. [4] <http://www.openmx-square.org/>