

## 炭素ドーピング h-BN の電子状態計算

### Electronic structure calculation of carbon-doped h-BN

Wei Xie、柳瀬隆、長浜太郎、<sup>○</sup>島田敏宏 (北大・工)

Wei Xie, Takashi Yanase, Taro Nagahama, <sup>○</sup>Toshihiro Shimada (Hokkaido Univ)

E-mail: shimadat@eng.hokudai.ac.jp

グラフェンと h-BN の中間的な物質として、炭素ドーピング h-BN が考えられる。合成実験も報告されているが、原子レベルで炭素の入り方を制御することはできていない。これまでの理論計算では、同じ炭素比では炭素原子がばらばらにドーピングされるよりも炭素同士が集まった構造が安定であるという報告がある[1]。炭素原子が集まった構造は、h-BN に分子が埋め込まれたものとみなすことができ、電子状態に興味をもたれる。本研究では、h-BN の B または N を様々な位置で炭素原子に置換した場合の安定構造の電子状態を密度汎関数法で計算した。

結果として、炭素同士が集まった構造が安定であることが確認された。偶数個の炭素で同数の B と N を置換した場合、炭素の割合を増やしていくとバンドギャップが小さくなることがわかった。また、奇数個の炭素で置換した場合には N を多く置換するか B を多く置換するかの 2 通りが考えられる。この場合はどちらも金属になるが、N と B のどちらを多くするかによって仕事関数が大きく変化することがわかった。この 2 種類の金属層を 2 枚重ねた場合、2 層中の炭素の位置関係によって、異なる層の炭素間に  $sp^3$  混成軌道ができる場合、電荷移動錯体ができる場合、相互作用が小さい場合の 3 通りが起こることがわかった。電荷移動錯体ができる場合は、バンドギャップが小さい半導体となる。実験的に作られる C-B-N 複合膜が安定した物性を示さない理由は、電子状態が C の置換位置に敏感であるためであると考えられる。今後の合成技術の進歩に期待が持たれる。 [1] P.P.Shinde et al, PRB 84, 125401 (2011).

