

hBN 基板中の空孔のグラフェンの伝導への影響の第一原理解析

First-principles analysis on influence of vacancies in hBN on graphene transport

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実現に置いて優良な基板の探索は重要な課題である。hBN は高品質なグラフェンデバイスの基板として知られているが [1]、一方で、高品質な hBN でないと良い伝導特性が得られないとも言われている。本研究では、原子空孔を導入した hBN 基板がグラフェンの伝導にどのような影響を与えるか、密度汎関数理論に基づく第一原理計算と非平衡グリーン関数法により調べた。

平面波基底の PHASE コード [2] を用いて構造最適化を行い図(a) に示すデバイス構造を作成した。伝導計算は局在基底の ASCOT コード [2,3] を用いた。計算はノルム保存擬ポテンシャル、局所密度近似の範囲で行った。

得られたトランスミッションを図(b) に示す。B 空孔の場合には電子、N 空孔の場合には正孔のトランスミッションが理想的な積層構造の場合から下がっている。これは B (N) 空孔によりグラフェンが $n(p)$ ドープになっているためである。また、トランスミッションにディップが見られるが、これらは hBN の欠陥準位に由来する状態によりグラフェンの電子が散乱されているためである。

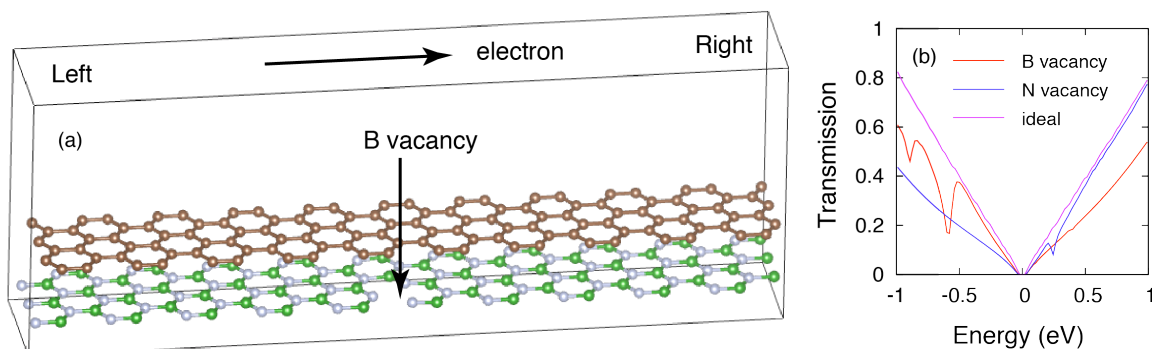


図 : (a) 作成したデバイス構造のユニットセル。伝導計算では、ユニットセルの左右は理想的な積層構造で囲まれている。緑、茶、銀はそれぞれ B, C, N 原子を表す。(b) 得られたトランスミッション。ピンクは理想的な積層構造の場合。

参考文献

[1] C. R. Dean et al., Nat. Nanotechnol. **5**, 722 (2010).

[2] <http://azuma.nims.go.jp>

[3] H. Kondo, J. Nara, H. Kino, and T. Ohno, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 4792 (2008).

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。