

窒素ドーピンググラフェンの構造安定性の系統的評価

Systematic evaluation of the structural stability of N-doped graphene

電通大院情報理工, [○](M1)千葉 紗彩, 中村 淳

Dep. of Engineering Science, The Univ. of Electro-Communications (UEC-Tokyo)

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

グラフェンは炭素原子が六員環構造をとった二次元物質であり、様々な特異的な性質により次世代ナノデバイス用材料として期待されている。グラフェンの電子状態制御を目的としてヘテロ元素のドーピングが行われている。窒素ドーピンググラフェンでは、窒素の配列の仕方により、電子状態が大きく異なる。構造的には、孤立した二つの窒素原子、あるいは、二次元面内の等方的な窒素原子ドーピングでは、窒素原子がパラ配置に存在するときに特異的に安定となることが報告されている[1]。一方、グラフェン表面上に吸着する酸素原子やヒドロキシル基は二次元的に等方的に配列する[2]場合に比べて、一次元的な配列をとることでより安定化することが報告されている[3,4]。本研究では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により、一次元的なパラ配置窒素配列（ネットワーク）が窒素ドーピンググラフェンの構造安定性に及ぼす影響を系統的に明らかにすることを目的とする。

Figs.1(a)、1(b)は一次元的な窒素ネットワークモデルを示す。図中の n はネットワーク配列の周期 n を示し、 n を変化することで窒素濃度を変化させた。二次元面内に等方的に窒素をドーピングしたときには、電子状態が金属的となるモデルと半導体的となり安定化するモデルが存在し、窒素濃度が高いほど窒素ドーピンググラフェンの生成エネルギーは大きくなることが知られていた[1]。一次元的な配列をとる場合には、生成エネルギーは窒素濃度に対して単調には変化せず、窒素濃度が13%で生成エネルギーが最小となることがわかった。講演では、一次元ネットワークの配置と安定性について系統的に調査した結果を報告する。

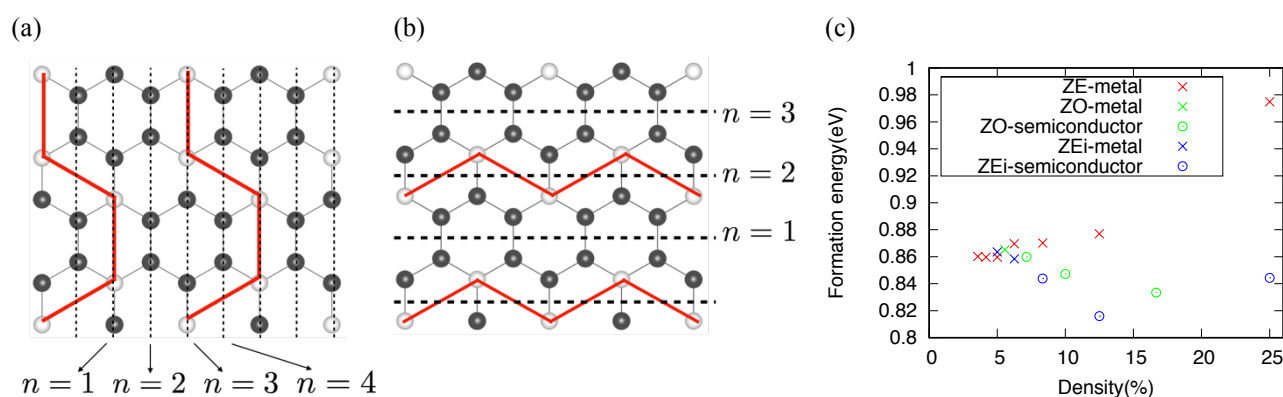


Fig.1 1D networks of N: (a)array A and (b)array Z. (c)Formation energy as a function of the density of N in graphene. Thick solid red lines in Figs. 1(a) and 1(b) show the 1D networks of N.

- [1] T. Umeki, A. Akira, A. Ichikawa, and J. Nakamura, J. Phys. Chem. C **119**, 6288 (2015).
- [2] J. Ito, J. Nakamura, and A. Natori, J. Appl. Phys. **103**, 113712 (2008).
- [3] J. Yan, L. Xian, and M. Y. Chou, Phys. Rev. Lett. **103**, 086802 (2009).
- [4] H. C. Schniepp *et al.*, J. Phys. Chem. B **110**, 8535 (2006).