

六方晶窒硼素のグラフェンへのキャリア蓄積に対する電界遮蔽効果

Asymmetric Field Screening of h-BN for Carrier Accumulation in Graphene

筑波大数理, 岡田 晋

Univ. of Tsukuba, Susumu Okada

E-mail: sokada@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

六方晶窒硼素は化学的に不活性で完全に平滑な2次元表面を有することから、グラフェンや遷移金属カルコゲン化合物等の原子層物質の担持基板や絶縁基板として注目を集めている。とりわけ、5eVを超える広いバンドギャップは、高い耐電圧性を示すことが期待される。本研究では、六方晶窒硼素薄膜とグラフェンからなる電界効果トランジスタ構造に着目し、ゲート電界に対するグラフェンへの電荷蓄積現象の微視的機構と六方晶窒硼素薄膜の電界遮蔽能の理論的な知見提示を目的とし、当該系に対する密度汎関数理論に基づく第一原理計算を実施した。計算の結果、六方晶窒硼素とグラフェンのバンドアライメントに起因し、六方晶窒硼素薄膜は電子注入に対して高い遮蔽能を示すのに対して、正孔注入に対しては電子注入に比して脆弱であることを明らかにした。