

# グラフェンへのドーピング効果 –エネルギー論・電子特性–

東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻

氏名 藤本 義隆

**目的** 密度汎関数理論に基づいた第一原理電子構造計算により、グラフェンへの窒素ドーピングにおける安定性や電子特性の解明を行なう。

**内容** カーボン単層シートであるグラフェンは電気的キャリア移動度が極めて高いなどの優れた電子特性を有することから、それを高性能デバイスへ応用することが期待されている。特に論理演算機能をもった高機能デバイスを作成するには、ドーピングにより電気的キャリアを誘発し、そして厳密に制御することが必要不可欠である。特に、窒素ドーピングした場合での起こり得る欠陥構造と生成過程の解明、また欠陥構造と電子特性との対応関係を明らかにすることが重要である。

**結果** ドーピングにより最も起こり得る窒素欠陥構造は、炭素を窒素で置換された構造Aであることが分かった(図1)。さらに、グラフェン中に存在する原子空孔がグラフェン中にある窒素を順次取り込みながら、最終的に3つの窒素を空孔周りに集めて安定化することが分かった(図2)。

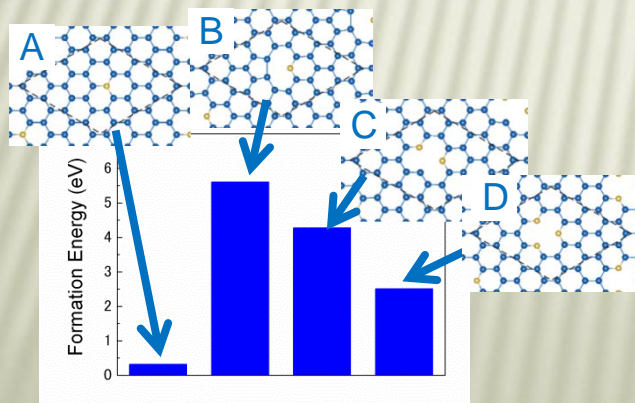


図1. グラフェン中の窒素欠陥構造とエネルギーダイアグラム

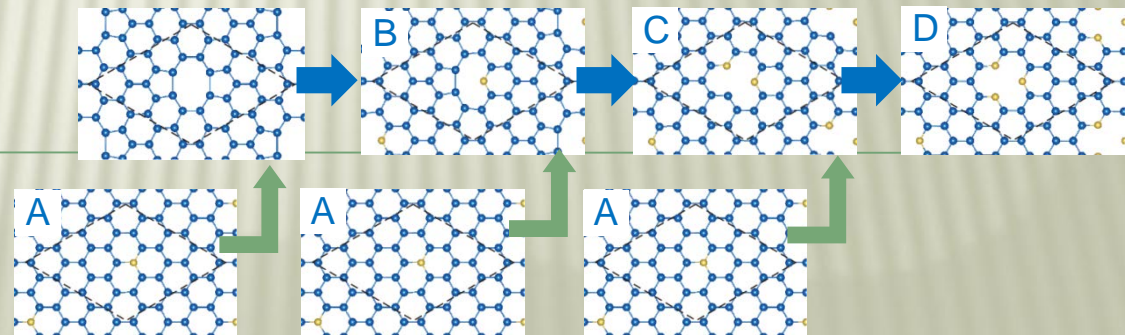


図2. グラフェン中の原子空孔から三量体窒素欠陥構造への生成過程