

グラフェン物性制御へ

「炭素―酸素結合」を解明

理研

理化学研究所Kim表面科学研究所の鄭載勲国際特別研究員らの研究グループは、グラフェンの物性制御に向け、新しい「炭素―酸素結合」の構造を解明した。体系的なグラフェン表面の化学修飾が可能になり、グラフェンを利用した次世代電子デバイス開発に寄与できるとしている。

炭素原子1層の厚さで網状の物質であるグラフ

フェンは、優れた物理的・電子的性質を持つている。グラフェンを利用した高機能電子デバイスを作製するためには、グラフェンの電子的性質の制御が重要。ほとんど電気抵抗がないグラフェンに半導体の電子的性質であるバンドギャップ（電子が存在できないエネルギー帯）を持たせ、電流の流れを制御する方法の開発が待たれていた。

研究チームは、密度汎関数理論という高精度の理論計算を行い、銅など

の金属電極にグラフェンが接触した場合について、酸化反応の反応性、生成物の構造安定性および電子物性の詳細を調べた。その結果、接触しているグラフェンを酸化させると、酸素原子1つがグラフェン炭素原子1つと結合している「エノラート構造」が、酸素原子がグラフェン表面の炭素原子2つと結合しているエポキシ構造よりも、安定に生成されることを明らかにした。

エノラートの高い化学

活性によって新たな官能基の導入が容易になり、体系的で高効率の化学修飾が可能になると考えられる。これにより、多様な官能基の修飾によるグラフェンの電気伝導性の制御ができる。グラフェンを用いた次世代電子デバイスの開発につながるとしている。