OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	Monte Carlo Analysis of Carrier Transport in Turbostratic Multilayer Graphene Systems
Author(s)	Mojtahedzadeh, Seyed Ali
Citation	大阪大学, 2026, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/105456
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　　名　（ MOJTAHEDZADEH SEYED ALI　）	
論文題名	Monte Carlo Analysis of Carrier Transport in Turbostratic Multilayer Graphene Systems (乱層積層した多層グラフェンにおけるキャリア輸送のモンテカルロ解析)

論文内容の要旨

本論文は，多層グラフェンシステムにおけるキャリア輸送特性について，理論的および数値的な調査を行ったものであり，以下の6章で構成した．

第1章では，序論として本研究の背景と目的を説明した．はじめに，グラフェンの基本的な特性について言及した．具体的には，グラフェンの構造および，極めて高い電子移動度を有することを述べた．また，グラフェンの輸送特性が基板上の荷電不純物などの外的要因によって制限を受ける問題点についても言及した．この問題の解決策として，乱層積層構造を持つ多層グラフェン（Turbostratic Multilayer Graphene）の導入が提案されていることを述べた．この背景を踏まえ，本研究では，乱層積層した多層グラフェンに対して輸送計算を行い，理論的観点からその有用性を検証し，デバイス設計に資する知見を得ることを目的とした．

第2章では，本研究で採用したシミュレーションの枠組みについて詳述した．具体的には，不純物分布のモデリング，トーマス・フェルミ近似とポアソン方程式を用いた自己無撞着計算，およびグラフェンにおけるキャリア輸送を記述するモンテカルロ法について解説した．

第3章では，乱層グラフェンにおけるキャリア輸送シミュレーションの結果を述べた．特に層数が16層の系における解析から，多層構造の下層（基板側）が効果的な遮蔽機能を示すことが確認された．基板近傍の層では大きなポテンシャル揺らぎが観測されるものの，基板から離れるにつれて揺らぎは減衰し，第16層ではポテンシャルがほぼ平坦化した．これに伴い，上層におけるドリフト速度は回復し，第16層では不純物散乱のない理想的な系の輸送特性（フォノン制限領域）へと漸近することが確認された．さらに，このポテンシャル揺らぎと移動度を関連付ける解析モデルを提示した．

第4章では，幾何学的制限であるエッジ散乱の影響を検討した．グラフェンエッジにおける散乱のランダム性を表すパラメータr を導入し，輸送特性への寄与を検証した．その結果，不純物ポテンシャルが遮蔽された上層においては，エッジ散乱の影響が顕在化することが明らかになった．不純物の影響が取り除かれた領域では，エッジでの拡散的な衝突が移動度を制限する重要な要因となることを示した．しかしながら，多層化による遮蔽効果は依然として有効であり，上層において高い移動度を実現するという優位性は保たれていることを示した．

第5章では，ねじれ2層グラフェン(tBLG)を組み込んだ機能的な積層構造について述べた．tBLGにおける層間相互作用によるフェルミ速度の抑制を，パラメータαを用いて特徴付け，異なるαおよび積層構成を持つ系のポテンシャル分布および輸送特性を計算した．フェルミ速度の減少は状態密度を増加させ，tBLG層の遮蔽機能を向上させた．シミュレーションの結果，適切なαを持つtBLGを基板側に配置することで，通常の乱層構造では第16層で達成されるフォノン制限移動度が，わずか3層で達成可能となることを示した．一方で，過度な速度抑制（小さなα）はtBLG層自体の輸送特性を低下させるため，系全体の移動度が減少することが確認された．本研究では，様々なαおよび層数について計算を行い，最適な積層構造について検討した．

第6章では，本研究の結論を述べた．結論として，基板上の不純物が輸送特性を制限する主要な要因であるものの，多層構造によるポテンシャルの遮蔽によってその影響を効果的に緩和できることを述べた．この遮蔽効果により不純物の影響が抑制された系においては，エッジ散乱などが移動度を制限する重要な要因となることを述べた．さらに，tBLG層を導入することで，系の輸送特性を向上させられることを言及した．本論文では，多層グラフェンの層数，エッジの寄与，および積層構成の調整を検討することにより，高性能な多層グラフェンデバイスの実現へ向けた重要な指針を得たと結論付けた．

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名	（ MOJTAHEDZADEH SEYED ALI ）		
		（職）	氏　名
論文審査担当者	主 査	教授	森　伸也
	副 査	教授	小島　一信
	副 査	教授	大岩　顕
	副 査	教授	森　勇介
	副 査	教授	丸山　美帆子
	副 査	教授	福田　憲二郎
	副 査	教授	片山　竜二
	副 査	教授	近藤　正彦
	副 査	教授	廣瀬　哲也

論文審査の結果の要旨

本論文は、乱層積層した多層グラフェンにおけるキャリア輸送特性を、数値シミュレーションおよび理論モデルにより解析している。系のポテンシャルおよびキャリア分布を、トーマス・フェルミ近似とポアソン方程式を用いた自己無撞着計算により求め、得られた分布を用いてモンテカルロ法により輸送特性を評価している。これらを通じて、基板上の荷電不純物に起因する散乱の影響が、多層構造による遮蔽効果によって抑制されることを解析している。さらに、グラフェンエッジによる散乱の寄与および、ねじれ 2 層グラフェン（tBLG）を導入した機能的積層構造における輸送特性について議論している。これらの検討を通じ、高性能グラフェンデバイスの実現に向けた物理的知見と設計指針を提示している。

主要な成果を以下に示す。

(1) 乱層積層した多層構造による移動度向上の解析： 基板近傍の下層グラフェンが不純物ポテンシャルを効果的に遮蔽し、上層におけるポテンシャル揺らぎが減衰することを示している。この遮蔽効果により、系の上層のキャリア移動度が大幅に向上することを明らかにしている。特に、16 層からなる系の最上層においては、フォノン制限領域に近い高い移動度が実現されることを示している。さらに、系のポテンシャル揺らぎと移動度を定量的に関連付ける理論モデルを構築している。

(2) エッジ散乱の影響評価： 不純物散乱に加えて、グラフェンシートのエッジ散乱が輸送特性に及ぼす影響を解析している。エッジ散乱の影響を表す確率的モデルを導入し、キャリア輸送がエッジによって制限されることを定量的に解析している。不純物の影響が取り除かれた上層グラフェンでは、エッジでの拡散的な衝突が輸送特性を制限する重要な要因であることを示している。さらに、エッジ散乱を考慮した系のキャリア輸送特性を記述する理論モデルを構築している。

(3) tBLG による遮蔽機能の向上： フェルミ速度が抑制された tBLG を基板側に配置することで遮蔽能力が大幅に向上することを示している。これにより、通常の乱層構造で 16 層を要した遮蔽効果が、わずか 3 層からなる積層構成で達成可能であることを示している。様々な tBLG を含む系について輸送特性を示し、系の層数およびフェルミ速度抑制の度合いの観点から最適な構造について議論されている。

以上のように本論文は、多層グラフェンにおける優れたキャリア輸送特性を理論的に解析し、系の層数、エッジ散乱、ならびに多様な積層構造を体系的に検討することで、グラフェンデバイス設計における具体的な指針を確立している。これらの成果は、次世代の高速・高性能電子デバイスの実現に向けて大きく貢献するものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。