

ESM 法を用いた SiC(0001)面上多層グラフェンの仕事関数の計算 Computation on work function of multilayer graphene on SiC(0001) using ESM method

島根大院自然科学 [○](M1) 久保 磨大, Seo Insung, 影島 博之
Shimane Univ. [○]Mahiro Kubo, Insung Seo, Hiroyuki Kageshima
E-mail: n24m203@matsu.shimane-u.ac.jp

グラフェンは、次世代電子デバイスにおける基盤材料として注目されている。品質の良い大面積のグラフェンを作るのに SiC 熱分解法がある。SiC 熱分解法では、SiC(0001) 面の上にグラフェンを形成できる。このためその仕事関数を精密に理解することは、SiC 上グラフェンの物性を理解し、デバイス性能を最適化するために不可欠である。

本研究では、近年開発された ESM (Effective Screening Medium) 法[1, 2]を用いることで、基板とグラフェン界面の影響をより精密に評価することを目的として研究を行った。プログラムパッケージ PHASE/0 [3]を用い、密度汎関数理論を使った第一原理計算を実施した。平面波基底のカットオフは 30 Ry、交換相関汎関数は GGAPBE、擬ポテンシャルは、C については超ソフト型、Si と H についてはノルム保存型、ファンデルワールス力補正は D3 法を用いた。

まず、グラフェン $2 \times 2 / \text{SiC}(0001) \sqrt{3} \times \sqrt{3} R$ 30° スーパーセルモデルを構築し、SiC 表面上にグラフェンは AB 積層した。グラフェン単層から 6 層までを重ねた構造に対して、仕事関数を計算した。スーパースラブリジオメトリを用い、真空層の厚さは約 30 Å、SiC は 4H で、またその厚さは 6 バイレイヤー、裏面は H で終端し、裏面の C 一層だけ位置を固定し構造を最適化した。図 1 (a) は 3 層グラフェンの場合の単位胞を示したものである。ESM 法では単位胞中央に ESM をおき、真空層に加わる電場を補償

している。図 1(b) に 3 層グラフェンの場合のポテンシャルの面内平均の分布を示す。図の矢印の範囲の真空部分の高さを平均し、フェルミエネルギーとの差から、仕事関数を求めた。この平均操作を行わなければ、精度が不確かとなる。また、グラフェンの層間距離に対して仕事関数が敏感であった。

計算結果をまとめたものが図 2 である。比較のために実験結果[4]と先行理論研究による結果[5]も併せて記載した。2 層の時我々の計算結果は 4.32 eV となり、層が増えるにつれて仕事関数は大きくなっていった。4 層目あたりからは緩やかに大きくなって行って、6 層では 4.63 eV となった。先行理論研究と比較すると、2 層の時とても近い値である。また実験結果と傾向はよく一致し、値は若干大きめになったが、実験の精度から考えると十分に実験値を再現できている。つまり、仕事関数を計算する際に ESM 法は有効であることが分かった。

本研究の一部は、東京大学物性研究所スーパーコンピュータを用いて行われた。また、科研費 (21H01768, 21H01394) の支援を一部受けた。

- [1] M. Otani, et al., Phys. Rev. B 73, 115407 (2006).
[2] I. Hamada, et al., Phys. Rev. B 80, 165411(2009).
[3] <https://azuma.nims.go.jp>.
[4] H. Hibino, et al., Phys. Rev. B 79, 125437 (2009).
[5] A. Mattausch, et al., Phys. Rev. Lett. 99, 076802 (2007).

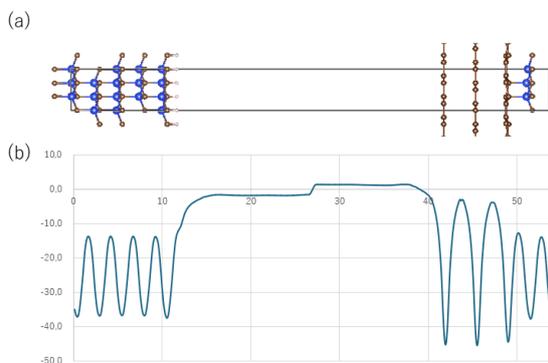


図 1. (a) 計算に用いたモデルの例。グラフェン 3 層の場合。茶色が C 原子、青色が Si 原子、白色が H 原子。(b) ポテンシャルの面内平均の分布の例、(a) の場合。

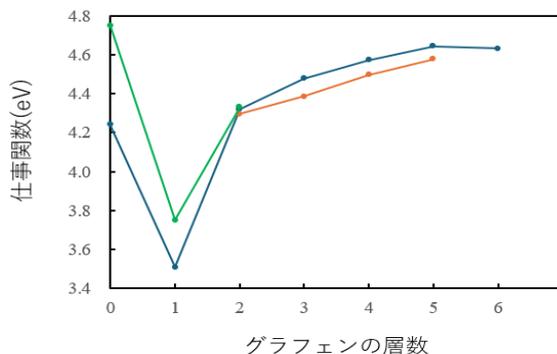


図 2. 仕事関数のグラフェン層数依存性。青丸が本計算結果、赤丸が実験結果[4]、緑丸が先行理論研究による結果[5]。