

遷移金属上グラフェンのポテンシャルエネルギー表面の基板依存性

Substrate Dependence of Potential-Energy Surface of Graphene on Transition-Metals

パナソニック株式会社 テクニカルソリューションセンター, ○豊田健治, 能澤克弥, 松川 望, 吉井重雄

DSC, Panasonic, ○Kenji Toyoda, Katsuya Nozawa, Nozomu Matsukawa and Shigeo Yoshii

E-mail: toyoda.kenji@jp.panasonic.com

背景

グラフェン膜の面積化に向けて、遷移金属を用いた化学気相堆積(CVD)によるグラフェン成長が盛んに研究されている[1-3]。CVD 成長のグラフェンの品質向上のためには、グラフェン/金属界面の性質の理解が重要である。金属上グラフェンの結合エネルギーの分布であるポテンシャルエネルギー表面(PES)は、成長の初期過程に影響を及ぼすと考えられる。本研究では、遷移金属上グラフェンの PES を計算し、異なる基板上における PES を比較した。

計算方法

密度汎関数理論に基づいたプログラム STATE を用いて計算を実行した。グラフェンと金属間の相互作用において、van der Waals (vdW)力が無視できないので、vdW 汎関数を用いた[4]。

遷移金属表面として、Co(0001), Ni(111)と Cu(111)を用いた。図 1 に示すように、スラブモデルで構成された金属表面上にグラフェンを配置した。 Y は金属原子の on top (top)サイトからの炭素原子の距離を、 Z は金属表面からの炭素原子の高さを表す。 D は top, hcp-hollow (hcp), fcc-hollow (fcc)サイトの最隣接間距離である。

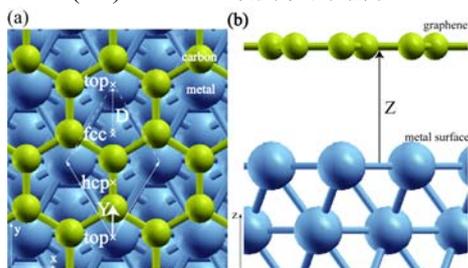


Fig. 1: (a) Top and (b) side views of the atomic structure of a graphene/metal system.

炭素原子 1 個あたりの金属上グラフェンの結合エネルギー(BE)を式(1)に従って計算した。

$$BE(Y, Z) = E^{Gr/M}(Y, Z) - E^{Gr} - E^M \quad (1)$$

ここで、 $E^{Gr/M}$, E^{Gr} と E^M は、それぞれ、金属上グラフェン、孤立グラフェンと清浄な金属表面の系のエネルギーである。 Y を固定した $BE(Y, Z)$ は、 $Z = Z_{eq}$ で最小となり、平衡値 $BE_{eq}(Y)$ をもつ。

結果・考察

図 2 に、Co, Ni と Cu 上における PES の断面である $BE_{eq}(Y)$ を示す。

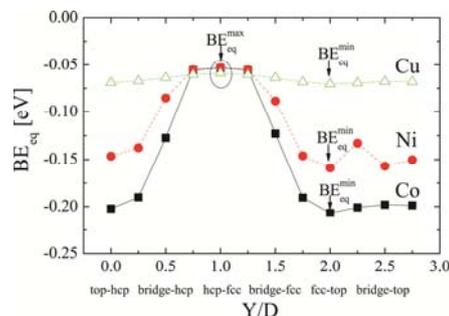


Fig. 2: BE_{eq} as a function of Y for Co, Ni, and Cu.

PES の形状は、基板の種類に大きく依存することが分かった。 $BE_{eq}(Y)$ は、いずれも、 $Y/D = 1.0$ で最大(BE_{eq}^{max})、 $Y/D = 2.0$ で最小(BE_{eq}^{min})となる。 BE_{eq}^{max} は基板依存性がほぼ無く、 BE_{eq}^{min} は基板の種類に大きく依存する。PES の起伏の大きさ($BE_{eq}^{max} - BE_{eq}^{min}$)は、 $Cu < Ni < Co$ の順である。我々は、より詳細な解析により、PES の起伏の基板依存性が金属 d バンドの準位に起因することを見出した。CVD 成長におけるグラフェンの挙動が下地金属との相互作用によって異なることが示唆される。

謝辞

有益な助言および STATE の最新版コードの提供を頂いた森川良忠教授と濱田幾太郎博士に感謝致します。

[1] J. Wintterlin et al, Surf. Sci. **603** (2009) 1841.

[2] M. Batzill, Surf. Sci. Rep. **67** (2012) 83.

[3] S. Yoshii et al, Nano Letters **11** (2011) 2628.

[4] K. Toyoda et al, J. Phys. Chem. C **117** (2013) 8156.