

Y₂O₃(111) 上グラフェンの安定性についての第一原理解析

First principles analysis on stability of graphene on Y₂O₃ (111)

物材機構¹, 高効率電子デバイス材料コンソーシアム², 東大生産研³

○金子 智昭^{1,2}, 大野 隆央^{1,2,3}

NIMS¹, MARCEED², Tokyo Univ.³ ○Tomoaki Kaneko^{1,2}, Takahisa Ohno^{1,2,3}

E-mail: KANEKO.Tomoaki@nims.go.jp

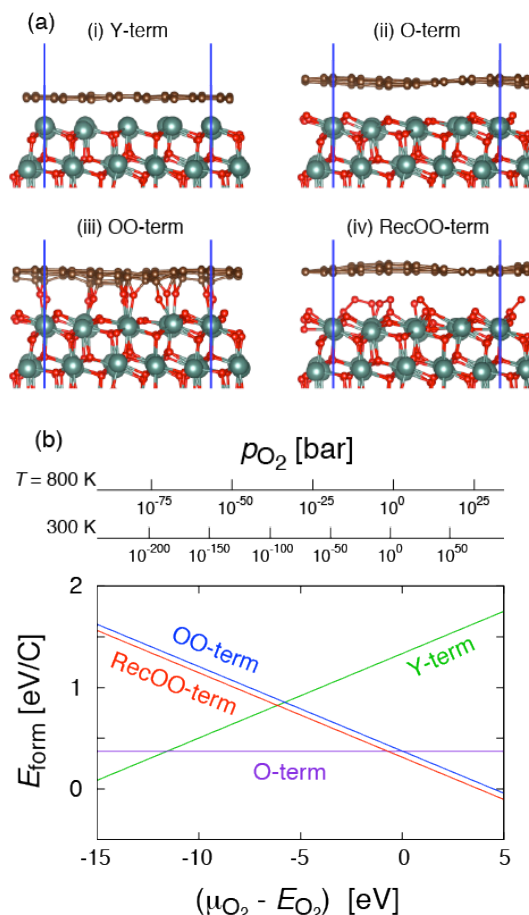
グラフェンデバイスの作成においては良質なトップゲート絶縁膜の形成が重要な課題である。Y₂O₃は Al₂O₃ や HfO₂ 同様に良く用いられる絶縁膜であるが、Y₂O₃ とグラフェンとの吸着構造や電子状態への影響は調べられていない。そこで、本研究では Y₂O₃(111) 上のグラフェンについての安定性の界面構造の依存について第一原理計算を行い、Y₂O₃ ゲート絶縁膜の形成への設計指針の提示を試みた。

図(a)のように Y₂O₃ (111) と 6x6 構造のグラフェンの界面構造を作成し、構造最適化をおこなった。Y₂O₃ (111) 絶縁体的な表面でないので、スラブの両側にグラフェンをつけて計算を行った。HfO₂ の計算に習い、上図のように Y-term, O-term, OO-term の界面を考えた。OO-term 表面は構造最適化により再構成されたので、そのままグラフェンをつけた (OO-term) と構造最適化させてつけた (RecOO-term) を考えた。

グラフェン吸着による電荷密度の変化を解析したところ Y-term, OO-term 界面ではグラフェンは化学結合を形成し吸着しているが、O-term, RecOO-term の場合には弱く吸着していること

が分かった。図(b)に得られた形成エネルギーの酸素化学ポテンシャルの依存を示す。参考のために T= 300K, 800K での対応する酸素分圧を図の上に示した。HfO₂ とは異なり、酸素分圧が高い場合でもグラフェンとは化学結合をしにくい事が分かった。以上より、Y₂O₃ をゲート絶縁膜として用いる場合には、O-term, RecOO-term の界面を得るために酸素分圧を下げない事が望ましい。

謝辞：この研究は HPCI 戦略プログラムの支援 (hp130002, hp140218) を受けておこなわれました。計算には京コンピュータを用いました。



上図：得られた界面構造。緑、赤、茶は、それぞれ Y, O, C 原子を表している。下図：それぞれの形成エネルギー (E_{form}) の酸素化学ポテンシャル依存 (μ_{O_2})。