グラフェンと h-BN 境界のエネルギー論

Energetics of borders between graphene and h-BN

筑波大学[1]，高度情報科学技術研究機構[2]　○澤畑 恒来[1]，山中 綾香[2]，丸山 実那[1]，岡田 晋[1]

Univ. Tsukuba[1], RIST[2], ○Hisaki Sawahata[1], Ayaka Yamanaka[2], Mina Maruyama[1], Susumu Okada[1]

E-mail: hsawahata@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

グラフェンと h-BN は、共に蜂の巣格子状の構造をもつ原子層物質であり、非常に近い格子定数を持つことから面内で接合したヘテロ構造を形成することが知られている。これまでに、CVD 法により、グラフェン端から h-BN の成長が報告されている。また、境界構造の解析から、h-BN/グラフェンの境界はジグザグ型の境界が支配的であり、さらに BC 結合が選択的に形成されることが明らかにされている。しかしながら、ジグザグ構造を持った BC 境界が選択的に形成されるグラフェンと h-BN からなる面内ヘテロ構造のエネルギー論と成長メカニズムは未だ明らかになっていない。そこで、我々はグラフェンと h-BN のヘテロ構造境界部分のエネルギー論とその成長機構の解明を密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて行った。

本研究では、計算のモデルとしてグラフェンと h-BN からなるヘテロリボンを考え、境界構造のエネルギー論と境界の成長機構について解明した。その結果、境界部分の結合は NC 結合よりも BC 結合の方がエネルギー的に安定であり、境界構造の安定性は BC 結合の安定性と境界部の極性によるエネルギー損失の競合によって、カイラル角境界がもっともエネルギー的に安定となることがわかった。また、成長過程を考慮すると、形成される境界はその系の周囲の環境に強く依存し、水素雰囲気下では、BC 結合から構成されるジグザグ境界が選択的に形成される。

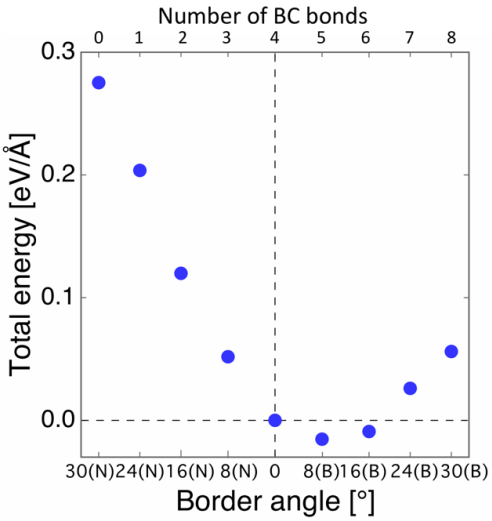

図 1. トータルエネルギーの境界角依存性の図。0 度がアームチェア、30 度がジグザグに対応。0 度より左側が NC 結合境界、右側が BC 結合境界である。

© 2018年 応用物理学会