

電界下における CO_x 吸着グラフェンのエネルギー論と電子構造Energetics and electronic structure of graphene adsorbing CO_x under an external electric field筑波大数理¹, (DC)松原 愛帆¹, 岡田 晋¹Tsukuba Univ.¹, (DC)Manaho Matsubara¹, Susumu Okada¹

E-mail: mmatsubara@comas.frsc.ac.jp

グラフェンはその特異な幾何構造と電子状態から高い伝導特性や機械的強度を有することから、種々のデバイスへの応用が期待されている。とりわけ、異種物質や外場といった外部擾乱に対して敏感な電子構造は、これらの外部擾乱を取り込むことによる、さらなる物性や機能性のデザインを可能にする。よってグラフェンは新奇デバイス創出の可能性を秘めており、例えばグラフェン表面への分子吸着現象を用いたガスセンサー応用などが期待されている。本研究では、グラフェン表面への CO_2 分子と CO 分子の吸着現象に対して、吸着構造と電子構造に対する外部電界の影響について、有効遮蔽媒質法と分散力補正を取り込んだ密度汎関数理論を用いて明らかにした[1]。計算では、 CO もしくは CO_2 分子が 4×4 グラフェンに吸着したトップゲート型の FET 構造を考え、分子吸着グラフェン複合系に対して電界の印加を行った。

計算の結果、 CO_x 分子のグラフェン上での安定位置は外部電界を大きくすると共にグラフェンに近づき、よりタイトに束縛されることがわかった (図1)。これは、ゲートにより注入された電荷はグラフェンに蓄積され、同時に CO_x 分子に分極を誘起することに起因する (図2)。また、吸着分子の安定配向は印加電界に強く依存することが明らかになった。すなわち、吸着分子は電界非印加時ではグラフェンに平行な配向が安定であるのに対し、電界を強くすることで徐々に垂直な配向が安定となる (図3)。これらの結果は、外部電界による CO_x 分子のグラフェンへの吸着現象が制御可能であること示したものである。

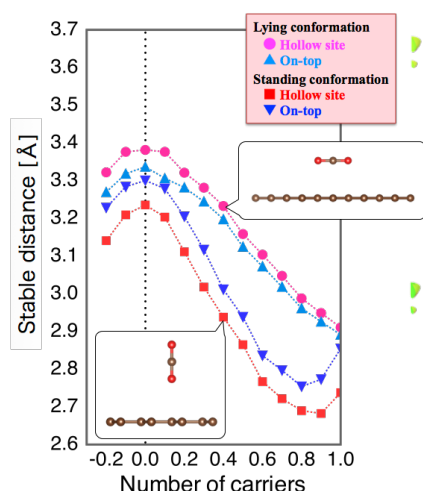
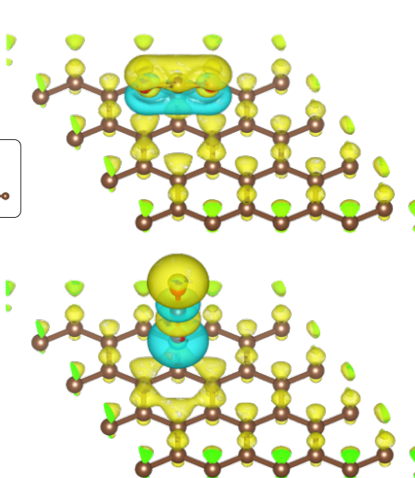
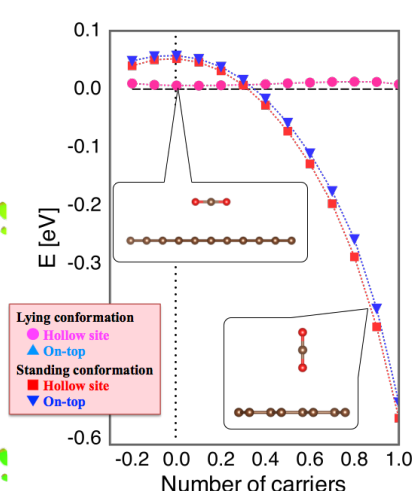
[1] M. Matsubara, S. Okada, J. Appl. Phys. **123**, 174302 (2018).図1 電荷注入量に対する CO_2 分子の安定距離の推移

図2 0.2e 注入時の電子 (黄色)、ホール (青色) 分布

図3 電荷注入量に対する CO_2 分子の配向依存性