van der Waals 基板上の二次元窒化ガリウムの安定構造と電子状態

Stable structures and electronic states of two-dimensional gallium nitride on van der Waals substrates

工学院大学 [1]、産総研 CD-FMat[2]，産総研 MathAM-OIL[3] ○ 屋山巴 [1]，Anh Khoa Augustin Lu[3]，森下徹也 [2,3]，中西毅 [2,3]

Kogakuin Univ. [1], AIST CD-FMat. [2], AIST MathAM-OIL. [3], ○Tomoe Yayama[1], Anh Khoa Augustin Lu[3], Tetsuya Morishita[2,3], Takeshi Nakanishi[2,3]

E-mail: yayama.tomoe@cc.kogakuin.ac.jp

二次元窒化ガリウム(2D-GaN)は理論的にその存在が予測されてきたが[1-4]、近年実験において多層 GaN ナノシートの作製が可能になったことで [5]、現実的なナノ材料候補としてさらなる注目を集めている。これまでの理論研究は、基板のない独立な 2D-GaN に関する報告のみであった。本研究では、実験において 2D-GaN のエピタキシャル成長用基板として期待できる、van der Waals (vdW) 基板に着目し、この上に生成した 2 層タイプの 2D-GaN の構造と電子状態を調べた。vdW 基板は c 面 GaN 基板上にグラフェンを配置したものである。

本研究では、パッケージソフトウェア VASP を用いて、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を実施した。3×3、4×4 の異なる周期を持つセルを用いて計算を行った。一般化勾配近似(GGA)に基づく Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)らによる交換汎関数を用い、射影演算子補強波法 (PAW)に基づく擬ポテンシャルを使用した。k 点サンプリングは、3×3×1 のメッシュ点を用いた。平面波基底のカットオフエネルギーは 800eV とした。GaN 基板の背面にある窒素原子は仮想水素で終端している。

図 1 は構造最適化によって得られた準安定構造の一例である。vdW 基板上の 2D-GaN の安定性を調べたところ、基板なしの場合に安定である複数の構造[1,2]が、基板ありの場合にも安定に存在することがわかった。一方で、基板なしの場合に準安定であった 2D-GaN の平坦ハニカム構造はもはや準安定ではなく、新たな準安定構造へ変化することがわかった。すなわち、vdW 基板を用いることで、基板との強い結合を持たない 2D-GaN を形成できる可能性が示された。同時に、基板が生じるポテンシャルが、2D-GaN の構造に無視できない影響を及ぼすことも明らかとなった。

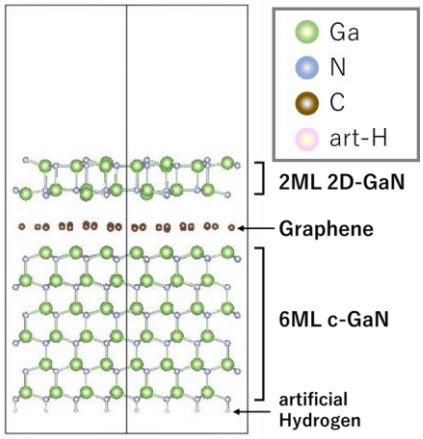

Fig. 1. A meta-stable structure of 2D-GaN on vdW-substrate.

【参考文献】[1] T. Yayama et al., Jpn. J. Appl. Phys **58** (2019) SCCB35. [2]. A. K. A. Lu et al., J. Phys. Chem. C **123** (2019) 1939-1947. [3] A. Onen et al., Phys. Rev. B **93** (2016) 085431. [4] Y. Gao and S. Okada, Jpn. J. Appl. Phys., **56** (2017) 065201. [5] Z. Y. A. Balushi et.al, *Nature Materials*, **15** (2016) 1166-1173.