

金属－グラフェン間の edge 接合の電子状態解析

First-Principles Study of Edge-Contact between Graphene and Metal

物材機構 田島暢夫、大野隆央、奈良純

NIMS N. Tajima, T. Ohno, J. Nara

E-mail: OHNO.Takahisa@nims.go.jp

単層グラフェンは高い電子移動度や熱伝導率など優れた特性を有しナノデバイス材料として期待される素材である。しかし金属と接合した時の電気抵抗が高く、電極－グラフェン接合の抵抗低減が実用化に向けた大きな課題となっている。単層グラフェンと金属との接合としてはグラフェンが金属表面に平行に接合する場合（surface 接合）と金属表面に垂直に接合する場合（edge 接合）が考えられるが、edge 接合は surface 接合より低抵抗を示すことが報告されている[1]。また edge 接合は多層グラフェンに対してもグラフェン各層と低抵抗な接合が形成できる接合法と考えられる。Edge 接合系でのデバイス特性を検討する際、その電子状態は重要な情報であるが従来型の surface 接合[2]に比べ edge 接合での電子状態の理解は不十分な状況である。本研究では、金属－グラフェンの edge 接合の電子状態を第一原理計算により解析した。

金属－グラフェン接合系として、fcc-Al 電極に zigzag 型の単層グラフェン（ C_{4n} : n を変化）が edge 接合した系を考慮した。単層グラフェンの両端が Al 電極に edge 接合した系（Al-Gr-Al 構造）と片側を水素終端した系（Al-Gr-H 構造）の電子状態を解析した。計算には第一原理分子動力学プログラム PHASE/0[3]を用いた。

グラフェン長さ $n=4$ の Al-Gr-H 構造（Al-Gr₄-H 構造）を図 1 に示す。Edge 接合部分で Al 原子と C 原子の間に結合長約 2 Å、結合エネルギー約 2 eV の強い結合が形成されている。接合形成前後の電荷密度の差（図 2）からグラフェンと Al の仕事関数の差を調整するため Al 電極からグラフェンに電荷が移動していることがわかる。この電荷移動により、グラフェン内で Al 電極から離れるに従ってポテンシャルが変化すると考えられる。詳細については当日報告する。

本研究は、防衛装備庁が実施する安全保障技術研究推進制度 JPJ004596 の支援を受けたものである。

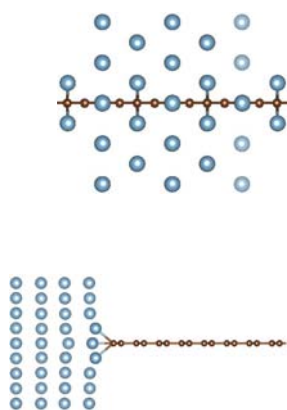


Fig.1 Structures of edge-contact of Al-Graphene (Al-Gr₄-H)

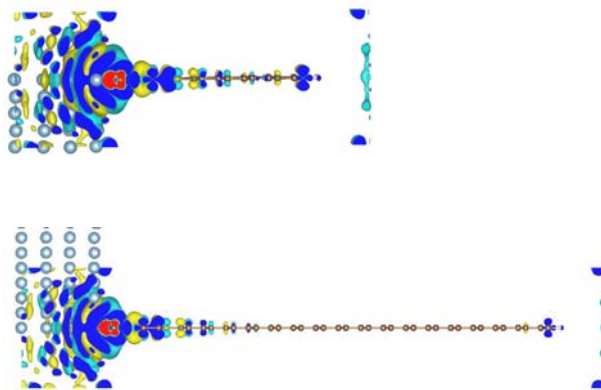


Fig.2 Differential charge density upon edge-contact formation for the Al-Gr₄-H and the Al-Gr₁₀-H system.

[1] L. Wang, et al. Science 342, 614 (2013)

[2] C. Gong, et al. J. Appl. Phys. 108, 123711 (2010).

[3] T. Yamasaki, et al. Computer Physics Communications. 244, 264 (2019).