

第一原理計算による III-V 族化合物-グラフェン超格子の構造および電子状態解析 Computational prediction for stable structures of graphene van der Waals superlattices composed of group-III-V compounds

三重大院工, ○秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Takahiro Kawamura, Tomonori Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】近年、グラフェン等のハニカム構造を持つ二次元原子層膜が特異な物性を持つ新材料として注目されている。さらに、これら二次元原子層膜で構成される van der Waals (vdW) ヘテロ構造もバルク状態では得られない特異な機能を持たせる系として注目されている[1]。一方、新たな二次元原子層膜として、III 族窒化物において分子線エピタキシャル成長法によって Ag(111) 基板上に Hex 構造の AlN [2] が作製されており、他の III 族窒化物でも第一原理計算によりその形成可能性が示唆されている[3]。さらに、他の III-V 族および II-VI 族化合物半導体においては 10 原子層以下の膜厚において 2 層ハニカム (DLHC) 構造の形成が提案されている[4]。これまでに我々は、III-V 族および II-VI 族化合物における二次元原子層物質の構造安定性を決定し、DLHC 構造の安定性は化合物のイオン性に関係することを明らかにした[5]。本研究では、新たな vdW ヘテロ構造の材料探索として、III-V 族化合物とグラフェン(および h-BN) とのヘテロ構造の形成可能性の検討および新規物性探索を行う。具体的には、密度汎関数計算にもとづき III-V 族化合物 (AlAs, AlSb, GaAs, GaSb, InP, InAs) とグラフェン(および h-BN) との超格子の安定構造の決定と電子状態の解析を行う。

【結果および考察】 Fig. 1 は 2 分子層からなる AlAs とグラフェンで構成される超格子 (G/AlAs) の構造および電子局在関数 (Electron localization function, ELF) の断面図を示したものである。Fig. 1(a) に示す AlAs がバルク状態での安定構造である閃亜鉛鉱 (ZB) 構造をとる場合は、グラフェンと Al 原子との間に化学結合が形成され二次元原子層とはならないのに対し、Fig. 1(b) に示す DLHC 構造においては化学結合は形成せず vdW 結合が形成していることが考えられる。また、DLHC 構造での超格子の全エネルギーは Fig. 1(a) の ZB 構造の超格子に比べて 0.91 eV/unit cell 低

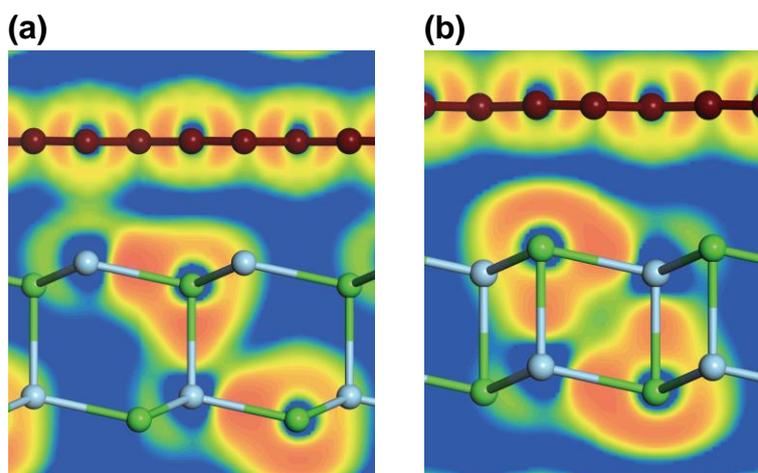


Fig. 1 Calculated geometries and contour plots of electron localization function (ELF) for superlattices consisting of graphene and AlAs (G/AlAs) with (a) ZB and (b) DLHC structures obtained by GGA calculations with spin-orbit interactions. Contour values of ELF are ranging from blue (0.1) and red (1.0). Blue, green, brown circles denote Al, As, and C atoms, respectively.

くなり、結合エネルギーも -0.45 eV/unit cell となりグラフェンのそれと同程度となる。さらに他の III-V 族化合物においても同様の傾向が見られ、グラフェン (h-BN) と III-V 族化合物で構成される超格子では III-V 族化合物として DLHC 構造をとる超格子がエネルギー的に安定で、フォノン分散の評価から動力学的にも安定であることが解る。また、これら超格子のバンド構造を評価すると、対称性の低下によりグラフェンのディラックコーンが消失してエネルギーギャップが生じ、GaAs および InAs においては DLHC 構造に起因してバンド反転も起きる。以上の結果は、III-V 族化合物による新たな vdW ヘテロ構造の実現可能性を示唆している。

【参考文献】 [1] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, *Nature* **499**, 419 (2013). [2] P. Tsipas *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 251605 (2013). [3] C. L. Freeman *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 066102 (2006). [4] M. C. Lucking *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **120**, 086101 (2018). [5] T. Akiyama *et al.*, *Appl. Phys. Express* **12**, 125501 (2019).