

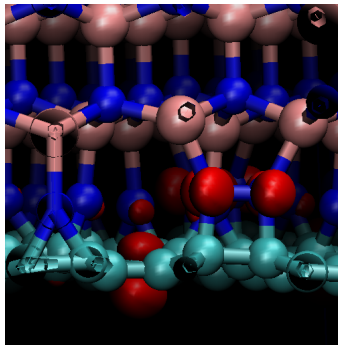
窒化物半導体との界面におけるグラフェンの構造相転移

Structural phase transition of graphene at the interface formed with nitrides

合田 義弘¹、常行 真司^{1,2}Y. Gohda¹ and S. Tsuneyuki^{1,2}東京大学理学系研究科物理学専攻¹、東京大学物性研究所²Department of Physics, The University of Tokyo, Tokyo 113-0033 ¹ISSP, The University of Tokyo, Kashiwa 277-8581 ²

グラフェンは基礎的興味のみならず、ナノエレクトロニクスにおける応用においても期待されている。グラファイト基盤上にGaNをパルスレーザー堆積法により成長させた実験が最近報告されており[1]、グラファイト/GaN界面からグラフェン/GaN界面を力学的引きはがしやレーザー照射[2]等により得る事は可能であると考えられる。グラファイトあるいはグラフェンとGaNの界面に対して第一原理計算は既に報告されているものの[3]、グラフェン/GaN界面としては1x1周期しか考慮されていない。そこで、本研究では様々な周期構造を第一原理計算により検討し、再安定構造を予測した[4]。

第一原理計算はOpenMXコード[5]を用い、密度汎関数理論の一般化密度勾配近似によるPBE汎関数により行った。グラフェンは2次元物質であるため、その上におけるGaNの成長に伴いGaNの格子定数に応じて引っ張りの応力を受ける。この状況はグラファイトにおいても、グラファイト層間の相互作用が弱いため同様である[3]。本研究による検討の結果、グラフェン/GaN界面においてはこの引っ張り応力によりグラフェンのC-C結合が一部切断され、C-N-C結合が形成される事が分かった[4]。この圧力誘起構造相転移はグラフェン/AlN界面では起こらない事も分かった。また、これら両界面の電子基底状態はスピン分極するものの、GaN/MgB₂界面[6]と異なり強磁性は安定化しないと結論づけられた。



図：グラフェン/窒化物半導体界面の構造とスピン密度分布の例

[1] J. Ohta and H. Fujioka, unpublished.

[2] Y. Miyamoto, H. Zhang, and D. Tomanek, Phys. Rev. Lett. **104**, 208302 (2010).[3] A. Ishii, T. Tatani, H. Asano, and K. Nakada, Phys. Status Solidi C **7**, 347 (2010); A. Ishii, T. Tatani, and K. Nakada, *ibid.* **8**, 1585 (2011).[4] Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Appl. Phys. Lett. **100**, 053111 (2012).[5] T. Ozaki, Phys. Rev. B. **67**, 155108 (2003); <http://www.openmx-square.org/>[6] Y. Gohda and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Lett. **106**, 047201 (2011).