

SiC 表面分解法によるグラフェン成長の分子動力学シミュレーション

Growth of Graphene from Surface Decomposition of SiC

by Molecular Dynamics Simulation

三重大院工¹, 九大応力研² ○ 井口綾佑¹, 河村貴宏¹, 鈴木泰之¹, 井上仁人², 寒川義裕², 柿本浩一²
 Mie Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.² ○ Ryosuke Iguchi¹, Takahiro Kawamura¹, Yasuyuki Suzuki¹,
 Masato Inoue², Yoshihiro Kangawa², Koichi Kakimoto²
 E-mail: 412m102@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】 グラフェンは、蜂の巣のような六員環構造を持つ炭素で構成されたシート状の物質である。グラフェンの電子状態は質量ゼロの相対論的粒子の分散の形をとっており、欠陥がなければ最大で $250,000\text{cm}^2/\text{Vs}$ を超える極めて高い電子移動度を持つため、次世代半導体材料として期待されている。グラフェンの製造法の一つである SiC 表面分解法は、SiC 結晶を真空中で加熱することにより、Si 原子のみが選択的に昇華し、残存した C 原子が自己組織的にグラフェンを形成する手法である。高品質で大面積なグラフェンの作製には、グラフェン形成過程の理解が必要不可欠だが、その詳細はいまだ明らかではない。

【計算方法】 本研究では、古典分子動力学法を用いて、SiC 表面分解法によるグラフェンの成長シミュレーションを行った。原子間力の計算には Brenner ポテンシャルを用い、パラメータとして C-C 間には Brenner の potential II[1], C-Si および Si-Si 間には Gao らのパラメータ [2] をそれぞれ使用した。6H-SiC の表面から Si 原子を一定時間毎に取り去ることで Si 原子の蒸発を再現し、その際の残存原子の挙動を観察した。

【結果】 図 1 は、6H-SiC(0001) 基板を用いた場合のシミュレーション結果である。基板温度が高温の方が、基板のグラフェン被覆率が高くなり、結晶性が良くなることが確認された。基板温度が低温の場合は、基板の被覆率は低い。これは C 原子が 3 次元構造を形成しているためである。この結果から、C 原子の再配列には十分な熱エネルギーが必要であると考えられる。しかし、2500K を超えると基板の欠陥が増加するため、グラフェンと SiC 界面構造の制御が困難になると考えられる。6H-SiC(0001) 基板上においても同様のシミュレーションを行った。この条件下では、2000K を超えると基板の欠陥が増加することに加え、2500K まで温度を上げても結晶性の良いグラフェンは得られなかったため、6H-SiC(0001) はグラフェン成長には不向きであると考えられる。

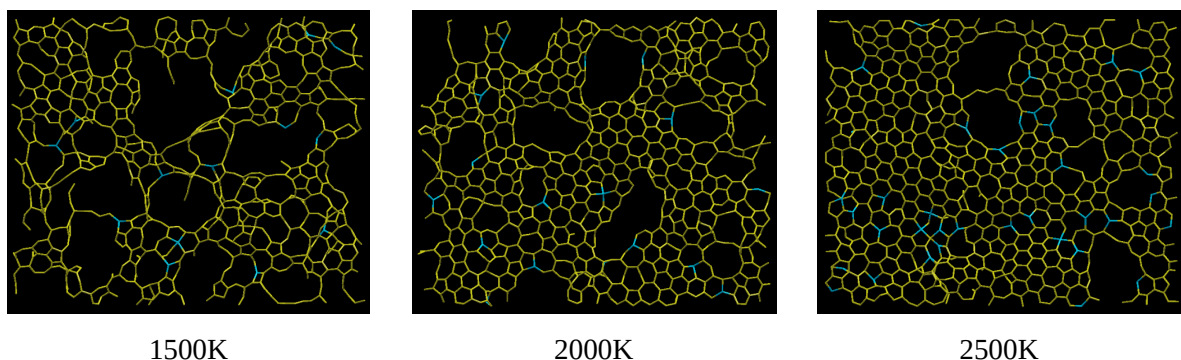


図 1. c 軸方向から観察したグラフェン。黄色は C 原子、水色は Si 原子をそれぞれ表している。

[1] D. W. Brenner, *Phys. Rev. B*, **42**, 42 (1990).

[2] Fei Gao and William J. Weber, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, **109**, 504 (2002)