

SiC(0001) 面上第 1 層グラフェン成長初期過程とステップの役割

Initial stage of 1st graphene layer growth on SiC(0001) and role of step

NTT 物性基礎研¹, 徳島大² °影島博之¹, 日比野浩樹¹, 山口浩司¹, 永瀬雅夫²NTT Basic Research Labs.¹, Univ. of Tokushima² °Hiroyuki Kageshima¹, Hiroki Hibino¹,Hiroshi Yamaguchi¹, Masao Nagase²

E-mail: kageshima.hiroyuki@lab.ntt.co.jp

SiC 熱昇華法によって作成されるエピタキシャルグラフェンは、量子ホール効果を示すなど高い品質を持っていることが明らかになっている。さらに品質を高めたり、あるいは任意の厚さのグラフェンを制御性良く得るためには、グラフェンの成長機構の解明が重要である。我々はこれまで、第一原理計算を中心とした理論的手法により、SiC(0001)面上での成長機構を検討してきた[1-7]。特に[11-20]ステップは、ステップであるにもかかわらず、安定で反応に不活性であり、ステップ端から Si が脱離しづらく、ステップ端に C が凝集しにくかった。そして、ステップ端から C が脱離することによるステップの不安定化の可否が、0 層グラフェン成長時の表面形状を決定していること、温度と Si 分圧によってグラフェン成長モードを制御可能であること、が明らかになった。

今回は、成長が進んで表面が第 0 層グラフェンで覆われた状況を考え、1 層グラフェン成長初期過程におけるステップの役割について検討を行った。

検討には、[11-20]シングルスステップを二つ持ったトレンチモデルを用い、この片方のステップに着目した。1 層目グラフェンの成長状況を再現するため、表面がグラフェン 1 層で覆われたモデル (図 1 の IV) を用意した。比較のために表面がグラフェンで覆われていない 0 層目グラフェンの成長状況に対応する三つのモデル (図 1 の I, II, III) の結果も示す。計算結果によると、1 層目成長の際には、テラス上からよりもステップ端から Si が脱離しやすくなり (図 2)、またステップ端に C が吸着しやすくなることが明らかになった。これは、0 層目成長の際とは Si 脱離も C 吸着も真逆の結果である。このような結果になった理由としては、表面を覆うグラフェンにより、表面に存在する Si のダングリングボンドが終端されたため、テラスの Si 脱離に対する安定性が増し、またテラスの C 吸着に対する反応性が抑制されたためと考えられる。

本結果は、1 層グラフェン成長において、温度や Si 分圧にかかわらずステップから Si が脱離してステップフローを起こすこと、C の被覆率によらずステップ端が C 凝集サイトになること、を意味している。従って、平滑な表面に 0 層グラフェンを成長しさえすれば、その後は平滑で均質なグラフェンを成長させることが出来るものと期待される。

*) 本研究の一部は科研費(22310062, 22310086)の補助を得て行われた。

- 1) H. Kageshima et al, Appl. Phys. Express 2 (2009) 065502.
- 2) H. Kageshima et al, Materials Science Forum 645-648 (2010) 597.
- 3) H. Kageshima et al, Appl. Phys. Express 3 (2010) 115103.
- 4) H. Kageshima et al, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 095601.
- 5) H. Kageshima et al, SSDM2011, KM-6-3.
- 6) H. Kageshima et al, ISSS-6, 14amB-1-2.
- 7) H. Kageshima et al, ICPS2012, 61.45.

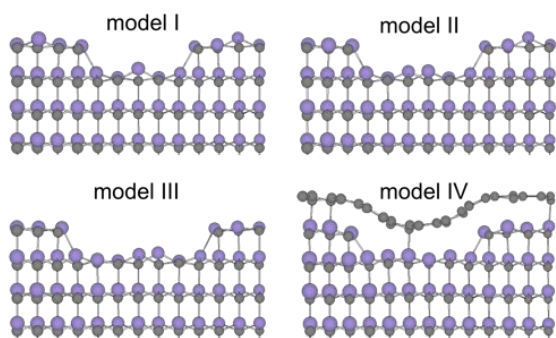


図 1. 検討に用いたモデルの原子構造。

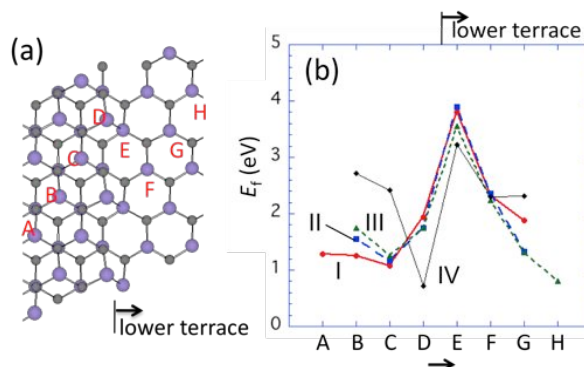


図 2. Si 原子を 1 つ取り除くサイトの位置(a)と、その時の形成エネルギーのモデル依存性(b)。