

SiC(11-20) a 面上エピタキシャルグラフェンの電子状態

Electronic structure of epitaxial graphene on SiC(11-20) a surface

NTT 物性基礎研 °影島博之, 日比野浩樹

NTT Basic Research Labs. °Hiroyuki Kageshima, Hiroki Hibino

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

SiC の昇華法によって得られるグラフェン基板は、大面積であると共に、デバイス作製に転写が不要であるという大きな利点がある。しかし、(0001)Si 面基板上に作製したグラフェンは、多くの電子がドーピングされた状態になっており、そのままではデバイス作製に都合が良くない。その一方、(000-1)C 面基板上に作製したグラフェンは、電子ドーピングされるようなことは生じないが、膜厚の制御性が悪く、一層や二層のグラフェンを得ることができない。これらの問題を解決する一つの可能性として、これらと異なる基板面方位を用いることが考えられる。そこで、(11-20)a 面上のグラフェンについて、第一原理計算に基づいて検討を行った。

SiC(11-20)a 面は、最外層表面に同数の Si と C 原子を持ち、 $5.32\text{\AA} \times 10.05\text{\AA}$ の長方形の単位胞を有している。最表面 Si と C にダングリングボンドは一本ずつあるため、電子状態は 1eV 強のバンドギャップを有し半導体的である。この単位胞の 4×1 倍の周期構造を作ると、ちょうどグラフェンの $5\sqrt{3} \times 4$ 倍の周期構造と整合性が良くなる。この時、グラフェンは、 $-0.1\% \times 2.1\%$ の歪みを有すのみである。そこで、この 4×1 単位胞を用いて構造の最適化計算を行った。

グラフェンシートを一層載せた表面を計算してみると、グラフェンシートは SiC 表面と化学結合を形成し強く結合、バッファ層の様相を示した。電子状態を計算してみると、確かにバンドギャップを有していて、グラフェン特有のディラックコーンは見えず、バッファ層となっていることが確認された。そこで、もう一層グラフェンシートを載せて (図 1)、電子状態を計算してみた。計算された電子状態は、ディラックコーンを確かに有し、またフェルミエネルギーはほぼディラック点に一致した (図 2)。このことから、SiC(11-20)a 面上のグラフェンは、ドーピングされない中性のグラフェンの特徴を示すと考えられることがわかった。

(0001)Si 面上のグラフェンも同様なバッファ層構造を有することが知られているが、こちらではグラフェンは電子ドーピングされる。この違いは、バッファ層構造が金属的か、半導体的か、によって決まっている。(0001)Si 面では、バッファ層界面に Si ダングリングボンド起源の電子状態が現れ、この電子状態をフェルミエネルギーが横切っていて、金属的である。この電子状態はバンドギャップの伝導帯近くに存在し、方やディラック点はバンドギャップ中央付近に現れるため、電子ドーピングされる。一方、(11-20)a 面では、バッファ層界面に Si と C ダングリングボンド起源の二つのバンドが存在するが、フェルミエネルギーは両者の間に存在し、半導体的である。ディラック点はバンドギャップ中央付近に現れるため、フェルミエネルギーはディラック点と一致する。

*) 本研究の一部は科研費(22310062)の補助を得て行われた。

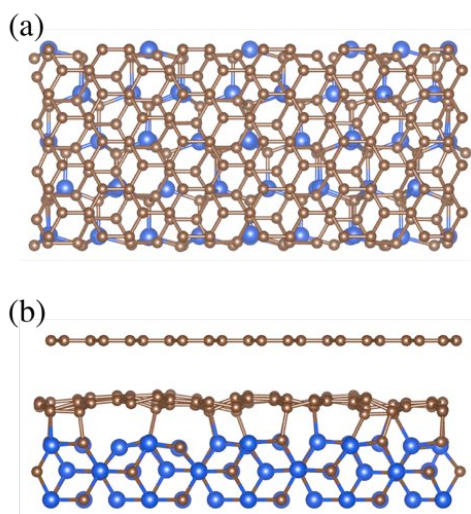


図 1. (11-20)a 面上グラフェンの原子構造。(a)上から見た図、(b)手前から見た図。

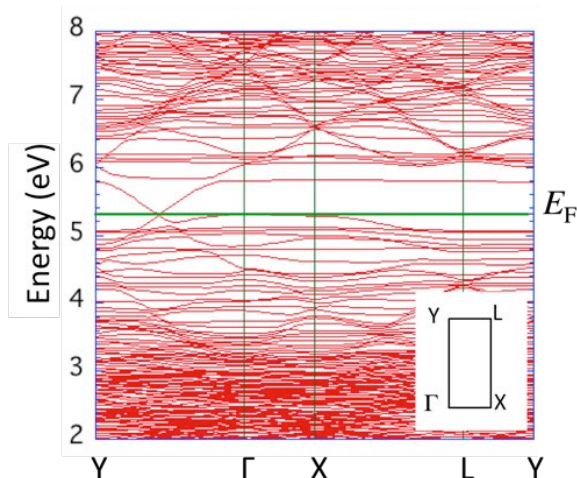


図 2. (11-20)a 面上グラフェンの電子状態。図 1 の原子構造に対応する。