

SiC 表面分解法におけるステップ端からのグラフェン成長シミュレーション

Growth of Graphene from step edge in Surface Decomposition of SiC

by Molecular Dynamics Simulation

三重大院工¹, 九大応力研² ◯土井優太¹, 井口綾佑¹, 河村貴宏¹, 鈴木泰之¹, 寒川義裕², 柿本浩一²Mie Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.² ◯Yuta Doi¹, Ryosuke Iguchi¹, Takahiro Kawamura¹,Yasuyuki Suzuki¹, Yoshihiro Kangawa², Koichi Kakimoto²,

E-mail: 413m134@m.mie-u.ac.jp

[はじめに] 近年、次世代の高性能電子デバイス材料としてグラフェンが注目されている。グラフェンの製造方法の一つである SiC 表面分解法は、SiC 結晶を真空中で加熱し、Si 原子を昇華させることで残った C 原子が自発的にグラフェンを形成する手法である。いまだグラフェンの形成過程の理解が不十分なため、産業応用可能なレベルの高品質で大面積なグラフェン作製には、形成過程の解明は急務となっている。そこで本研究では、古典分子動力学法を用いて、SiC 表面分解法を再現したグラフェン成長のシミュレーションを行った。

[計算方法] ポテンシャル関数には Brenner ポテンシャルを用い、C-C 間には Brenner の potential II [1], C-Si 間および 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 基板に予めステップ構造を作製し、Si 原子をステップ端から順に除外していくことで SiC 表面分解法を再現し、その際の残存原子の挙動を観察した。

[計算結果] 図 1 は、2500K におけるシミュレーション過程を c 軸方向及び m 軸方向から見た結果である。白色が C 原子、緑色が Si 原子を表している。Si 原子の除外により SiC 基板に供給された C 原子は、基板上を拡散することなく、ステップ後退に合わせてステップ端からグラフェンを形成する様子が見られた。1500K, 2000K においても同様のシミュレーションを行った結果、基板温度が低温の方がグラフェンの被覆率が低くなることが確認された。これは熱エネルギー不足により、C 原子が 3 次元構造を形成しているためであると考えられる。

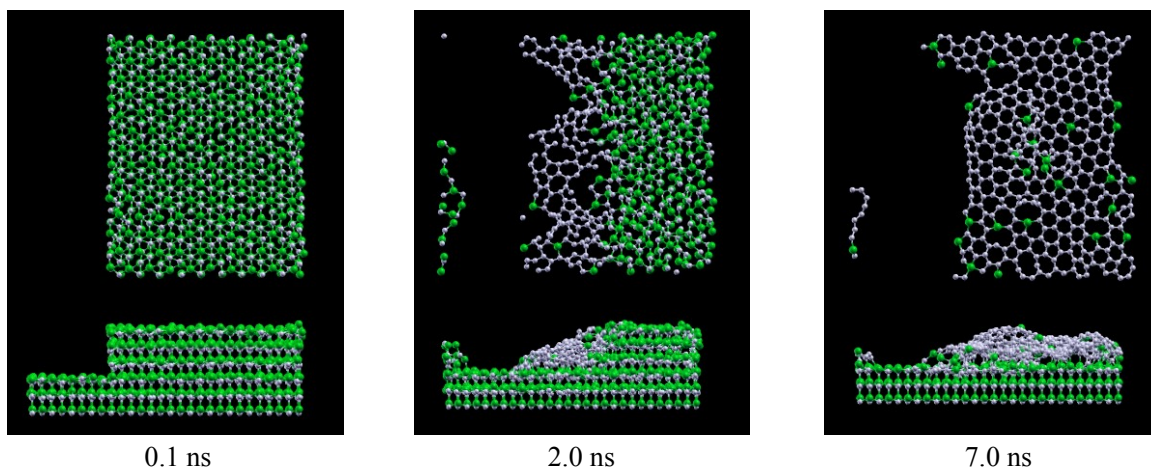


図 1. グラフェン成長の様子。上段は c 軸方向から、下段は m 軸方向から見た図を示す。

[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)