

SiC(0001) Si 面上第一層目グラフェン成長における [1-100]ステップの役割

Role of [1-100] steps in the first-graphene-layer growth on SiC(0001) Si face
 島根大¹, NTT 物性基礎研², 徳島大³ °影島博之^{1,2}, 日比野浩樹², 山口浩司², 永瀬雅夫³
 Shimane Univ.¹, NTT Basic Research Labs.², Univ. of Tokushima³
 °Hiroyuki Kageshima^{1,2}, Hiroki Hibino²,
 Hiroshi Yamaguchi², Masao Nagase³
 E-mail: kageshima@ecs.shimane-u.ac.jp

エピタキシャルグラフェンは SiC 熱昇華法によって作成され、高い品質を持っていることが示されているが、さらに成長グラフェンの結晶品質の制御性を高めるためには、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[1-5]。そして、特にステップの役割に注目すると、清浄 SiC 表面からの第 0 層グラフェン（バッファ層グラフェン）の成長時は、[11-20]ステップでも C-[1-100]ステップでも Si-[1-100]ステップでも、安定で反応に不活性であることが明らかになった。ステップ端から Si が脱離しづらく、ステップ端に C が凝集しにくいのであった。このようにステップ端が安定では、表面が荒れ、その結果として成長するグラフェンが多結晶になったり、多層になるおそれがある。このようなことを回避する有力な方法として、ステップ端からまず C を脱離させることによってステップの不安定化を進める方法が考えられる。温度と Si 分圧を制御することでステップ端からの C 脱離を促進することが出来、この見方は超高真空中の成長と Ar 雰囲気中の成長における、成長グラフェンの結晶品質の違いを矛盾なく説明することに成功した。

これまでの検討ではまた、表面が既に第 0 層グラフェンで覆われた第 1 層グラフェン成長の初期過程においては、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し、C の被覆率によらずステップ端が C 凝集サイトになる事も示した。しかし、これまでの検討では[11-20]ステップのみ取り扱っており、それ以外のステップがどのように振る舞うかの検討は行っていなかった。そこで今回、C-[1-100]ステップおよび Si-[1-100]ステップについても、下図のようなモデルを用いて、同様の検討を行った。

検討の結果は、従来の[11-20]ステップと同様で、表面が既に第 0 層グラフェンで覆われた第 1 層グラフェン成長の初期過程においては、常にステップ端から Si が脱離しやすく、C の被覆率によらずステップ端が C 凝集サイトになる事がわかった。従って、最初に平滑な表面に第 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。この結果は実験事実と矛盾せず、均一なバッファ層グラフェンの成長が高品質エピタキシャルグラフェンの形成に重要であることを示している。

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

- 1) 影島博之他、2011 年秋季第 72 回応用物理学会学術講演会、1p-ZF-4
- 2) 影島博之他、2012 年秋季第 73 回応用物理学会学術講演会、13p-C1-8
- 3) 影島博之他、2013 年第 74 回応用物理学会秋季学術講演会、17a-B1-8
- 4) 影島博之他、2014 年第 61 回応用物理学会春季学術講演会、18p-E2-2
- 5) H. Kageshima et al, Phys. Rev. B 88 (2013) 235405.

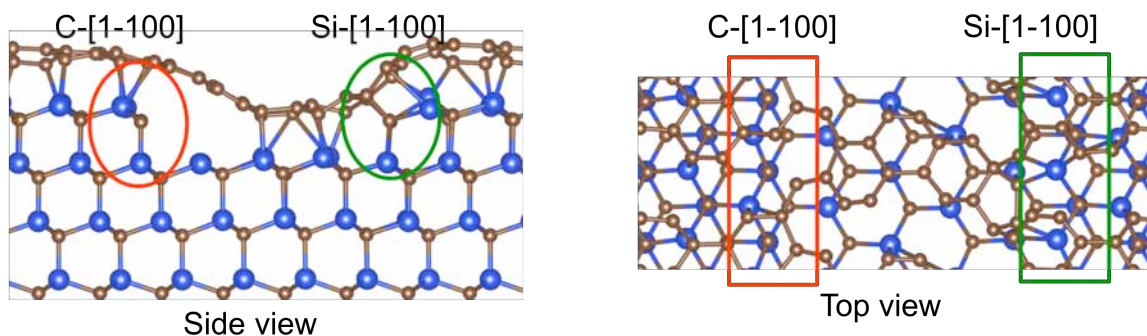


図. 0 層グラフェンで覆われた[1-100]ステップの役割の検討に用いたモデルの原子構造。