

SiC ステップ表面上の Si 熱脱離グラフェン成長の 第一原理シミュレーション

高度情報¹, 物材機構², 東大生研³, 高効率電デバ⁴ °小野裕己^{1,4}, 山崎隆浩^{2,4}, 大野隆央^{2,3,4}

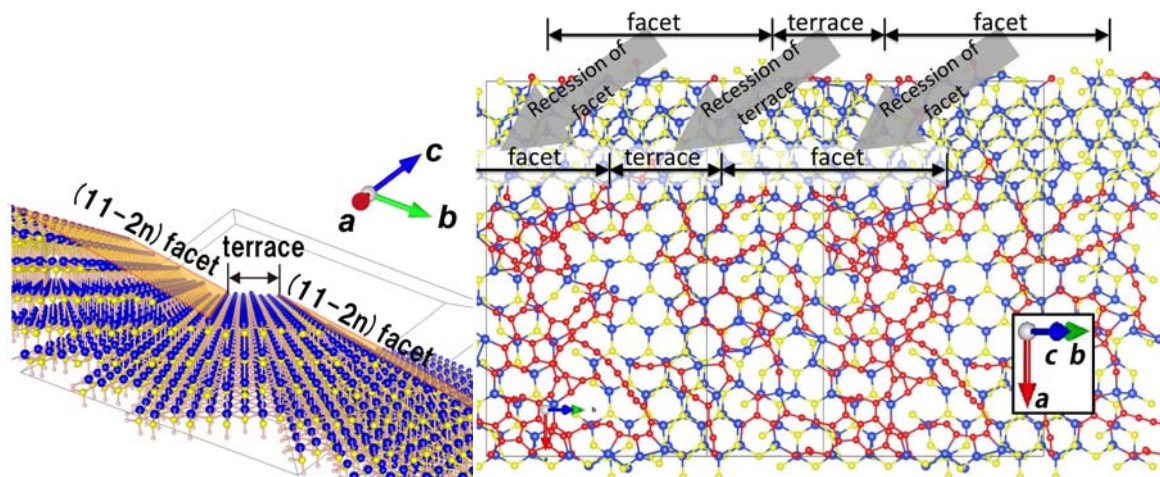
First-Principles Simulations for Graphene Growth

Induced by Si sublimation from Stepped SiC Surface

RIST¹, NIMS², IIS, Univ. of Tokyo³, MARCCED⁴ °Y. Ono^{1,4}, T. Yamasaki^{2,4}, T. Ohno^{2,3,4}

E-mail:y.ono@rist.or.jp

高品質なグラフェンが生産できる手法のひとつとして SiC 表面上の熱処理による表面再構成が挙げられるが、表面のステップ近傍での個別原子レベルでの詳細な配置やメカニズム特定には至っていない。そこで本研究ではこの SiC 表面をとりあげ、そこでの成長メカニズムを PHASE [1] を用いた第一原理分子動力学シミュレーションによって解析した。4H-SiC(0001)テラス面に(11-2n)のファセットを露出させた約 1000 原子から成る基板を考え、ここから Si を抜いて計算を開始した。ファセット全面（ただし幅は左下図のユニットセル枠の奥行（a 軸方向）に対して $1/3(=10.6\text{\AA})$ または $2/3(=21.2\text{\AA})$ ）にわたり深さ方向に 1 層分 Si を脱離した構造をつくり、高温を約 1ps 保持したあと急冷し構造緩和する。この手続きを深さ方向 3 層分まで繰り返し、形成される炭素鎖あるいは炭素員環の構造を解析した。結果、手続きが進むに従い右下図のようにグラフェンの前駆的な六員環、五員環などが形成された。C 員環構造は下地の SiC 六員環構造と同位相で重なっているものが多く見られ、arm-chair 端をステップの登り方向（つまり右下図において左方向）に向ける傾向が強かった。C 員環構造はファセット部に多く形成され、下部テラスに近い部分には C 原子の鎖状構造が形成される傾向が見られた。当日はこの動きについて詳細な議論を行う。なお本研究は文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくりの補助を受け実施された。



The initial structure (left) and the top view of the snap shot taken from the MD (right). The blue (yellow) circles indicate the Si (C) atoms of SiC, while the red circles indicate the C atoms with C-C bonds. Number of newly made C-C bonds is regarded on the facet area. The gray arrows express the recession of the facet and the terrace induced by the Si sublimation.

[1] 文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤ソフトウェアの研究開発」で開発されたものをもとに開発継続しているソフトウェアである。 <https://azuma.nims.go.jp/>からダウンロード可能。