

17a-E11-3

SiC 基板上での初期のグラフェン成長に対する第一原理分子動力学シミュレーション

物材機構^A, 東大生研^B, 小野裕己^{A*}, 奈良純^A, 大野隆央^{A,B}

First-Principles Molecular Dynamics Simulations for Early Stage of Graphene Growth Process on SiC Substrate

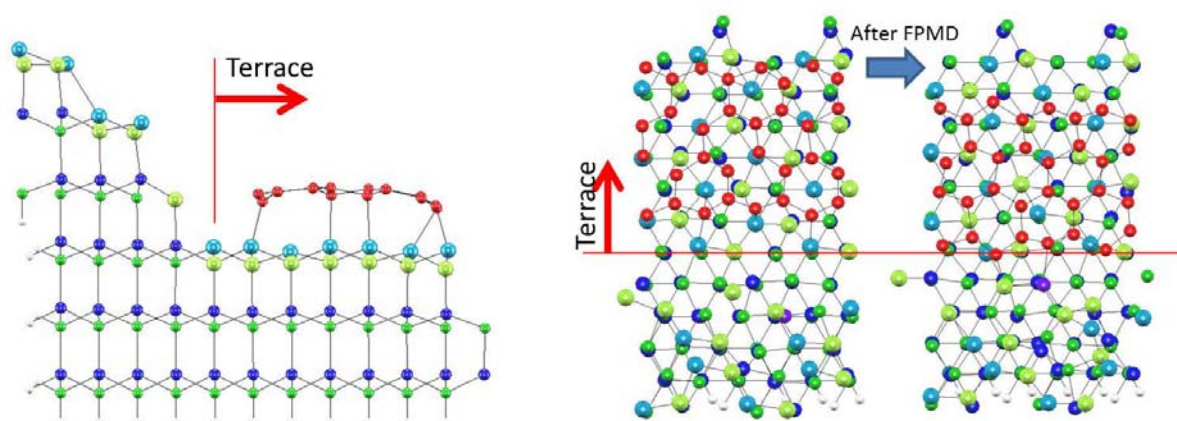
National Institute of Material Science^A, IIS, Univ. of Tokyo^B

Y. Ono^A, J. Nara^A, T. Ohno^{A,B}

E-mail: ONO.Yuki@nims.go.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ている。しかし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 SiC(0001)表面をとりあげ、そこでの成長メカニズムを PHASE (<https://azuma.nims.go.jp/cms/>)を用いた第一原理分子動力学(First Principle Molecular Dynamics: FPMD)シミュレーションによって解析した。SiC(0001)テラス面に(11-2n)の傾斜面を露出させた基板を考え、このテラス上に小さなグラフェン初期構造(下左図の赤)を配置した状態から FPMD を開始した。この系は 240 個ほどの原子から成り、周期的な構造になっている。また SiC 表面の熱破壊を促進させるため、(11-2n)表面からは Si 原子がいくつか取り除かれた初期欠陥がある。FPMD を行った結果、この構造欠陥を起点として C 原子や Si 原子が SiC 基板側から脱離しグラフェン成長のきっかけとなる挙動が確認された。下右図のように、この挙動によってグラフェンの zigzag 端が(11-2n)面側に取り込まれた。それと同時に SiC 表面から脱離した C 原子が新たにグラフェンの sp^2 ネットワークに加わることで、結果的にグラフェンが伸長した。当日は、この動きについて Si 原子や C 原子の結合や脱離の様子を詳細に追った議論を行う。

なお本研究は文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」と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。



本研究で用いた系。青、緑はそれぞれ SiC の Si 原子、C 原子で、赤はグラフェンの C 原子。左図：FPMD 前の初期構造。右図：初期構造を上から見下ろしたイメージ。左側は FPMD 前の、右側は後の構造。FPMD 後にグラフェンがテラス側に移動し、新たな sp^2 結合を作っている。

*現所属 高度情報科学技術研究機構 (RIST)