

CVD 法で成長させた単層 h-BN の LEED による構造解析

LEED structure analysis of monolayer h-BN grown by CVD

¹NTT 物性基礎研, ²九大 °日比野 浩樹¹, Carlo M. Orofeo¹, 影島 博之¹, 鈴木 哲¹, 水野 清義²¹NTT Basic Research Labs. and ²Kyushu Univ. °H. Hibino¹, C. M. Orofeo¹, H. Kageshima¹, S. Suzuki¹, and S. Mizuno²

E-mail: hibino.hiroki@lab.ntt.co.jp

絶縁性の層状物質である六方晶窒化ホウ素(h-BN)は、グラフェンデバイスの誘電体層やトンネルトランジスタのバリア層として注目を集めているが、単結晶の h-BN を大面積に合成することは一般に難しい。我々は、これまで、サファイア上にエピタキシャル成長させた Co 薄膜を基板に、単層の h-BN を化学気相成長(CVD)法で合成できることを報告してきた[1]。しかしながら、得られた単層 h-BN は、B-N 結合の向きが反転した二種類のドメインからなる多結晶体であり、CVD 成長させた h-BN のデバイス応用には、B-N 結合の向きの制御が求められる。そこで、我々は、この目的への第一歩として、エピタキシャル金属薄膜上に CVD 成長させた単層 h-BN が、基板上にどう配置されているかを、低エネルギー電子線回折(LEED)強度のエネルギー依存性を解析することにより調べたので報告する。

図 1 は、サファイア基板上的ヘテロエピタキシャル Co 薄膜表面に CVD 成長させた単層 h-BN の低エネルギー電子顕微鏡 (LEEM)像である。図 1 は鏡面反射ビームを用いた明視野像で、B-N 結合が反転したドメインが異なる明るさで観察されている。第一原理計算によると、Co(0001)表面上の単層 h-BN には、最安定な構造が二種類存在することが報告されている[2]。それらは、N 原子が最表面の Co 原子の直上にあり、B 原子が表面第二層の Co 原子の直上にある top(N)-hcp(B)モデルと、このモデルの h-BN 層を N 原子を中心に 180°回転させた top(N)-fcc(B)モデルである。図 2 に、図 1 中の○で囲まれた位置で測定した LEED 強度のエネルギー依存性と、top(N)-hcp(B)モデルを用いた動力学計算の結果を比較する。実験結果と計算結果は比較的良く一致しており、図 1 中の明るいドメインが top(N)-hcp(B)構造にあることを示している。一方、図 1 中の暗い領域の LEED 強度は top(N)-fcc(B)モデルで良く再現できることも確認した。図 1 は、ドメイン境界が優先的に三種類の方向をとること示しているが、構造モデルとの対応から、各ドメインのエッジが N 原子で終端されやすいためであることが明らかになった。LEED は金属基板上的 h-BN の構造解析に有効であり、一次の回折ビームの強度比は、h-BN の配向具合の簡便な評価指標として活用可能である。

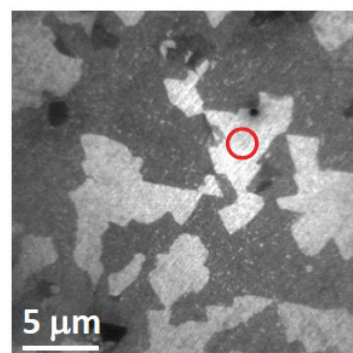
[1] C. M. Orofeo *et al.*, Nano Res. **6**, 335 (2013).[2] N. Joshi and P. Ghosh, Phys. Rev. B **87**, 235440 (2013).

Fig.1: Bright-field LEEM image of monolayer h-BN grown on a heteroepitaxial Co film by CVD. Electron beam energy was 47 eV.

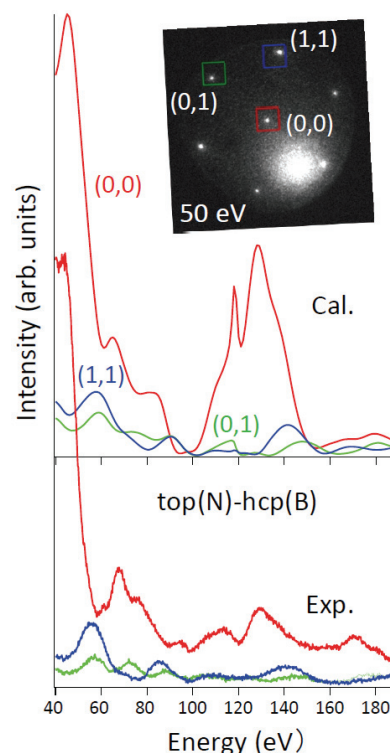


Fig.2: Comparison between experimental and calculated LEED I-V curves of monolayer h-BN on Co(0001).