

SiC(0001) Si 面上エピタキシャル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 graphene growth on SiC(0001) Si face

NTT 物性基礎研¹, 徳島大² °影島博之¹, 日比野浩樹¹, 山口浩司¹, 永瀬雅夫²

NTT Basic Research Labs.¹, Univ. of Tokushima² °Hiroyuki Kageshima¹, Hiroki Hibino¹,

Hiroshi Yamaguchi¹, Masao Nagase²

E-mail: kageshima.hiroyuki@lab.ntt.co.jp

SiC 熱昇華法によって作成されるエピタキシャルグラフェンは高い品質を持っているが、さらに品質を高めたり、あるいは任意の厚さのグラフェンを制御性良く得るためには、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[1-3]。特に[11-20]ステップの役割に注目すると、ステップであるにもかかわらず、安定で反応に不活性であり、ステップ端から Si が脱離しづらく、ステップ端に C が凝集しにくかった。そして、ステップ端から C が脱離することによるステップの不安定化の可否が第 0 層グラフェン成長時の表面形状を決定しており、グラフェン成長モードは温度と Si 分圧で制御可能である。さらに、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させれば、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。

しかし、これまでの検討では[11-20]ステップ以外のステップは無視して議論してきた。そこで今回は残る主要なステップである C-[1-100]ステップと Si-[1-100]ステップを取り上げ、どのような役割を果たすのか、[11-20]ステップと同様な検討を行った[4]。検討には、C-[1-100]シングルステップと Si-[1-100]シングルステップを一つずつ持った $2 \times 4\sqrt{3}$ トレンチモデルを用いた (図 1)。

計算の結果、Si 脱離については、C-[1-100]ステップも Si-[1-100]ステップも[11-20]ステップと同様にステップから起こりにくかった。一方、C 吸着については、ステップへ吸着できないかがステップによって異なった。また、これらのステップからも、まず C 脱離が起これば、それに続いて Si がステップ端から脱離可能となった。このため、C-[1-100]ステップと Si-[1-100]ステップにおいても、その後退の可否は Si 分圧や温度に依存することになる。

ここまで計算した 3 つのステップの中では C-[1-100]ステップが最も安定であるので、ステップの後退による表面の平滑化においては、従来考えていた[11-20]ステップではなく、C-[1-100]ステップを不安定化する条件がポイントとなる。このため、ステップが後退して表面の平滑化が起こるための閾値は、Si 分圧が 1×10^{-8} Torr の場合で、従来の 1170°C から 1120°C へ 50°C ほど低くなることになった。しかし、この違いはこれまでの実験結果の解釈を変えるほどのものではない。従って、高品質グラフェンを成長するには、従来の主張と同様、十分高い Si 分圧の下で十分高温でグラフェンを成長するのが良い、と結論できる。

*) 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 年秋季第 74 回応用物理学会学術講演会、17a-B1-8
- 4) H. Kageshima et al, Phys. Rev. B 88 (2013) 235405.

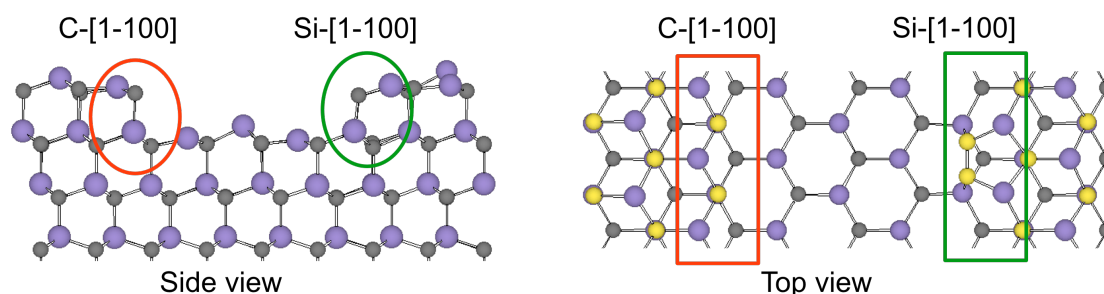


図 1. [1-100]ステップの役割の検討に用いたモデルの原子構造。