

SiC 表面上の Si 熱脱離グラフェン成長機構に関する第一原理分子動力学シミュレーション – 炭素鎖から二次元的構造の形成過程

First-Principles Molecular Dynamics Simulations for Graphene Growth Mechanism on SiC Surface after Si Sublimation – Growth Process of 2D-structures from C-chains

○小野裕己^{1,4}, 山崎隆浩^{2,4}, 奈良純^{2,4}, 大野隆央^{2,3,4}

1.高度情報、2.物材機構、3.東大生研、4.MARCEED

○Y.Ono^{1,4}, T. Yamasaki^{2,4}, J. Nara^{2,4}, T. Ohno^{2,3,4}

1.RIST, 2.NIMS, 3. IIS, Univ. of Tokyo, 4. MARCEED

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

我々は Si 熱脱離によって SiC 表面上にグラフェンが得られる成長機構について、理論的解析を行っている。前回、PHASE/0 [1]を用いた大規模な第一原理分子動力学(MD)シミュレーションに基づき、次の成長機構モデルを提案した[2]。(i) Si 脱離後に残った C 原子は炭素鎖構造をつくるが、これは環構造を形成したり壊れたりしている。(ii)表面 Si 原子、特に(0001)テラス表面の Si 原子は形成された環構造を安定化する。(iii)(0001)テラスと(11-2n)ファセットの境界近傍では臨界核サイズを超えた重合環構造に炭素鎖が吸収されグラフェン状構造に成長していく。今回、さらに、より実験に近い温度の範囲 (1500K~2000K) でいくつか条件を変えた 1,000~2,000 原子規模の長時間 MD を行ったところ、やはり炭素鎖から二次元的構造が成長する様子が共通して観察された。Fig.1 は 2000K で 15ps の MD を行った後の表面構造である。テラス上にはグラフェン状のものが形成されているが、(11-2n)ファセット上では立体的な形状をとっている。ファセット表面 Si は小数環構造との整合性が悪くまた動きやすく、ピン留め効果が小さいためである。別のシミュレーションでは、ファセット上にキャップ状のものが形成される様子も見られた。なお本研究は HPCI 戦略プログラム (分野 4) の支援を受けて行い、計算には京計算機を使用した。

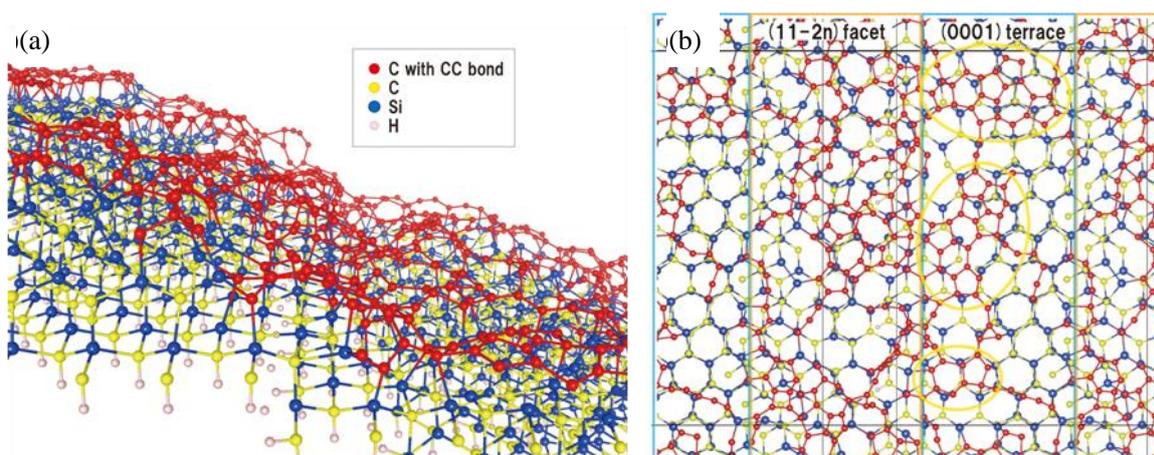


Fig.1 (a) Bird's eye view and (b) top view of the last structure in a MD simulation at 2000K. Planer 2-dimensional C-rings regions are indicated by yellow ovals.

[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。 <https://azuma.nims.go.jp/>からダウンロード可能。

[2] 山崎、小野、奈良、大野、応用物理学会 2015 年秋 16a-PA2-20.