

分子動力学法によるナノ秒オーダーの SiC 表面上のグラフェン成長シミュレーション — 6 員環の形成

Nano-second Order Molecular Dynamics Simulations for Graphene Growth Mechanism on SiC Surface - Formation of Six Membered Rings

高本 聡¹, 山崎 隆浩^{2,3}, 奈良 純^{2,3}, 大野 隆央^{2,3}, 金田 千穂子^{3,4}, 泉 聡志¹

1. 東大工, 2. 物材機構, 3. MARCEED, 4. 富士通研究所

S. Takamoto¹, T. Yamasaki^{2,3}, J. Nara^{2,3}, T. Ohno^{2,4}, S. Izumi¹

1. Univ. of Tokyo, 2. NIMS, 3. MARCEED, 4. Fujitsu Lab.

E-mail: takamoto.so@fml.t.u-tokyo.ac.jp

SiC 表面上の Si 熱脱離によるグラフェン成長機構解明のため、原子スケールシミュレーションが行われている。これまで、PHASE/0 [1]を用いた第一原理分子動力学計算に基づき、主にグラフェン成長の初期過程である環構造の形成を中心とした解析が行われてきた[2, 3]。一方、成長初期の均一でない構造から、6 員環を中心とした構造の形成までを再現するには、時間・空間スケールともに大きな系を対象とする必要があった。そこで本研究では、新規に開発した Si-C 系の電荷移動型ポテンシャルを用い、古典分子動力学(MD)法によって長時間のシミュレーションを行った。

本研究では、4H-SiC(0001)テラス面に(11-2n)のファセットを露出させた系(最大 12000 原子)を用意し、2500 K で MD を行った。Si の脱離については、1 原子を除去したときの系のエネルギーの変化量を各原子の安定性の指標とし、不安定と判定した Si 原子を除去することでモデル化を行った。Fig. 1 (a) に 3.2 ns の MD を行った結果を示す。環構造が表面を覆っている一方、ラフネスが大きく、5, 6, 7 員環の混在した構造となっている。ここから 12.8 ns の間、3000 K でアニールを行った。結果を Fig. 1 (b) に示す。アニールによって 5, 7 員環は次第に減少していく様子が見られた。また C 原子が均一にならされていき、全体的にフラットな構造へと変化していった。結果として、ファセット面上では 2 層、テラス面上では 1 層からなるグラフェンが形成された。

[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/>

[2] 今泉, 他, 第 77 回応物秋季 13p-P5-20 (2016).

[3] 奈良, 他, 第 77 回応物秋季 13p-P5-32 (2016).

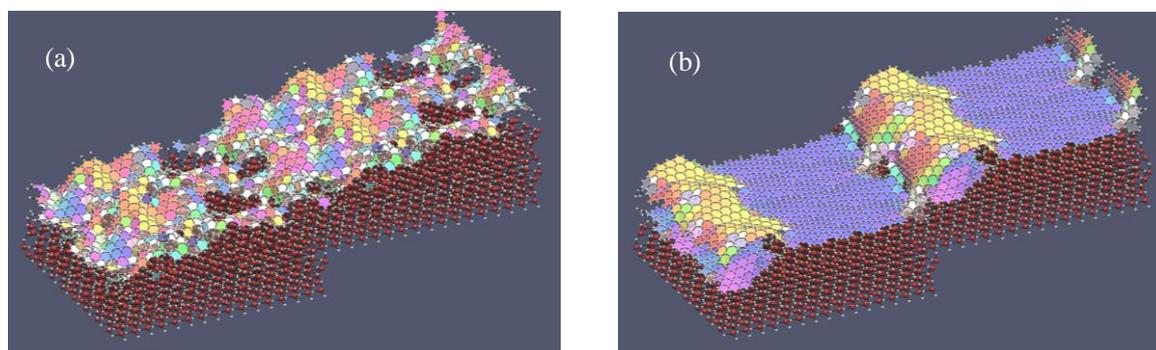


Fig. 1 Overhead view of the C-cluster. 6 membered C rings are colored according to the orientation. (a): Snapshot at 3.2 ns. (b): Final structure.