

CVD における hBN/グラフェン積層ヘテロ構造成長の起源

Origin of vertical hBN/Graphene Heterostructures Growth in CVD

島根大¹, NTT 物性基礎研², 関西学院大³ °影島 博之¹, Shengnan Wang², 日比野 浩樹^{2,3}

Shimane Univ.¹, NTT Basic Research Labs.², Kwansei Gakuin Univ.³

°Hiroyuki Kageshima¹, Shengnan Wang², Hiroki Hibino^{2,3}

E-mail: kageshima@riko.shimane-u.ac.jp

グラフェンは単層では 0 ギャップ半導体で多層にすると金属となり、絶縁性である hBN はグラフェンの良い基板やゲート誘電膜となる。このため、これらのヘテロ構造を自由自在に作ることができれば、応用に様々な可能性をもたらすこともできる。最近、我々は hBN/グラフェンの縦型ヘテロ構造と横型ヘテロ構造の CVD 成長による作り分けに成功した[1]。Cu 基板を用い、まず C 源を導入して一層グラフェンを形成、次に BN 源を導入してグラフェンと hBN が同一面内でつながった一層横型ヘテロ構造を形成した。そして、さらに再び C 源を導入して hBN の下に一層グラフェンを形成、縦型 hBN/グラフェンヘテロ構造も形成した。我々はまた、このような成長方向の作り分けが実現できた仕組みを明らかにするために、第一原理計算を用いた検討も行ってきた。まず、島のエッジの形状から、成長方向選択性制御の起源が先に成長した島のエッジの H 終端の有無にあることを提案した[2]。前回の応用物理学会では、C モノマーの吸着に関する計算結果に基づいてこの提案の是非を議論をした[3]。今回は、C ダイマーの吸着に関しての追加検討結果に基づいてこの提案の是非を議論する。

検討には図 1 に示す表面モデルを用いた。図 2 に C ダイマーの吸着エネルギーの位置依存性を示したが、縦軸は 2 つの C モノマーが Cu 最外層と Cu 二層目の間のサブサーフェス(SS) にばらばらにある時を基準に示してある。

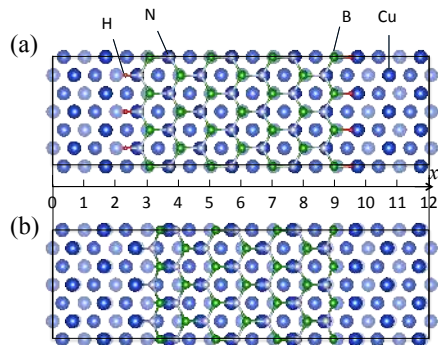


図 1. 計算に用いた表面モデルの上面図。(a) エッジが H 終端された hBN ナノリボン(hBNNR)で Cu 表面が部分的に覆われた場合、(b)エッジが H 終端されていない hBNNR で部分的に覆われた場合。x 座標は図 2 の横軸に対応し、C ダイマーの中心の位置を指し示す。

hBNNR のエッジが H 終端されていない場合 (図 2 bare)、C ダイマーは hBNNR のエッジに安定に吸着するため、hBN と一続きの一枚のシート状のグラフェンに成長していくことが想定される。一方、hBNNR のエッジが H 終端されている場合 (図 2 H)、C ダイマーは hBNNR で覆われていない部分が安定であるため、グラフェンは hBN 島の外で核生成すると考えられる。新しくできたグラフェン核のエッジがそのまま H 終端されなければ、丸まって Cu 表面で終端されているため、グラフェンは hBN の下に潜り込み、縦方向に積層した構造に成長していくことが想定される。これらのことから、積層ヘテロ構造ができたのは、hBN 島のエッジが H 終端されていたためと、結論できる。

本研究の一部は、自然科学研究機構計算科学研究センターを利用した。また本研究は科研費 (20H05670, 21H01768)の支援を受けている。

[1] R. Makino, et al., Appl. Phys. Express **13**, 065007 (2020).

[2] H. Kageshima, et al., e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. **18**, 70 (2020).

[3] 影島、他、応物学会 2021 年春季講演大会、17a-Z31-1。

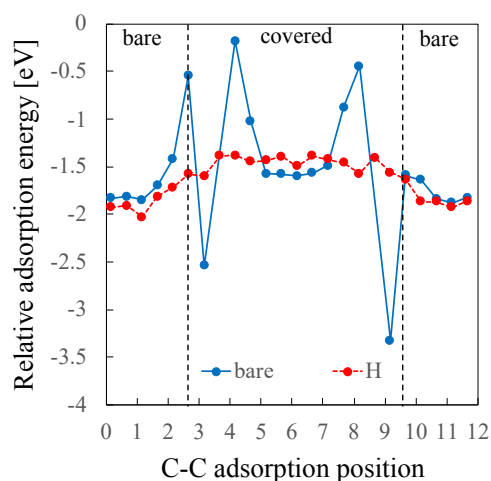


図 2. hBNNR で部分的に覆われた Cu 表面への C ダイマー吸着における吸着エネルギーの位置依存性。bare は hBNNR のエッジが H 終端されていない場合、H はエッジが H 終端されている場合。縦の点線は hBNNR のエッジの位置を示し、covered が hBNNR で覆われた部分、bare が hBNNR で覆われていない部分への吸着である。