

ナノカーボン材料の電子ビーム加工の分子シミュレーション (VII)

A Molecular Dynamics Simulation of Electron-Beam Fabrication of Carbon Nanomaterials (VII)

大阪府大院工 ○朝山良樹, 安田雅昭, 川田博昭, 平井義彦

Osaka Prefecture Univ. °Y. Asayama, M. Yasuda, H. Kawata and Y. Hirai

E-mail: Asayama-5@pe.osakafu-u.ac.jp

はじめに

ナノカーボン材料はその高い機械的強度や移動度によってナノデバイスへの応用が期待されている。それらの特性は構造に依存することが知られており、電子ビーム照射はその構造を制御することが出来る技術の一つである。本研究では、電子ビーム照射によるグラフェン加工の分子シミュレーションを行い、その際の構造変化を解析した。

シミュレーションモデル

入射電子の炭素原子への衝突は衝突断面積を用いた二体衝突モデルにより擬似衝突として導入した。電子の衝突断面積にはMottの衝突断面積を用いた。電子ビーム照射下の炭素原子の挙動は分子動力学法により計算した。原子間ポテンシャルは近距離力にはTersoff-Brennerポテンシャルを、遠距離力にはLenard-Jonesポテンシャルを用いた。

解析条件

構造変化解析の一例として、単層グラフェンに電子ビーム照射を行なった場合を示す。Fig.1 は解析で用いたグラフェンの分子モデルである。一辺 5.5nm の単層グラフェンに対し、それぞれ四端および両端から 0.3nm まで固定した。Fig.1 の桃色網掛け部分に 200keV の電子を 20 electrons/ps の衝突レートで照射し、その分子挙動を解析した。その間の温度は 1500K とした。

解析結果

Fig.2 に解析結果を示す。どちらの固定条件でも電子照射によって炭素原子が叩き出され空孔が形成されているが、四端固定では大きな空孔が目立つのに対し、両端固定では比較的空孔が小さい。これは固定されていない上下端から炭素原子が供給されることで空孔が消滅したためと考えられる。発表では、その他の加工例におけるグラフェンの構造変化についても報告を行う。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 (課題番号 25249052) の助成を受けて行われた。

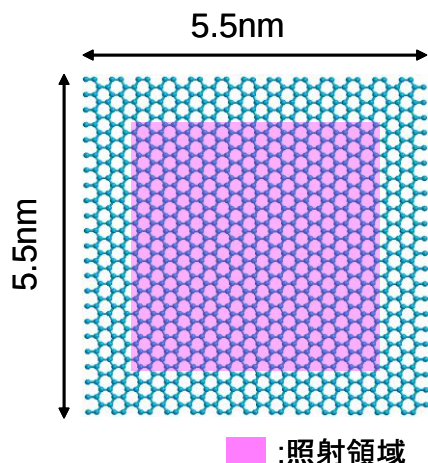


Fig. 1 Configuration of simulation.

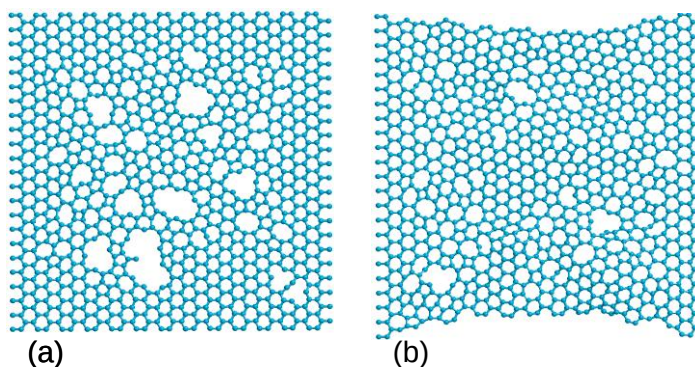


Fig. 2 Results. (a) Four and (b) two ends are fixed.