

## 18a-PA3-33

## 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 (VIII)

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

大阪府大院工 ○山本真也, 朝山良樹, 安田雅昭, 川田博昭, 平井義彦

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

E-mail: yasuda@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、荷電粒子ビーム照射は構造制御技術の一つとして期待されている。今回、グラフェンへの電子ビーム照射の分子シミュレーションを行い、電子衝突と熱処理による構造変化をポテンシャルエネルギーの変化より検討した。

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。

解析結果

電子ビーム照射により単層グラフェンに形成される様々な欠陥についてポテンシャルエネルギーの変化を解析し、欠陥生成エネルギーと欠陥修復エネルギーを求めた。Fig.1 は結果の一例であり、200keV の電子衝突により原子の叩き出し欠陥が生成される前後のポテンシャルエネルギーの変化を示している。これらは欠陥の生成や安定性を議論するための基礎的なデータとなる。また、熱処理による欠陥の構造変化についても解析を行った。Fig.2 は原子空孔をもつグラフェンを 1500K に加熱したときの構造変化を示したものである。単一の空孔は 5-5 欠陥、あるいは 5-9 欠陥へと移行し、二つの欠陥は交互に形を変えながらグラフェン中を移動し、最終的にはエッジ部に達して単一の 5 員環となって構造変化を止めた。講演では他の欠陥構造についても生成・修復と構造変化を報告する。

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。

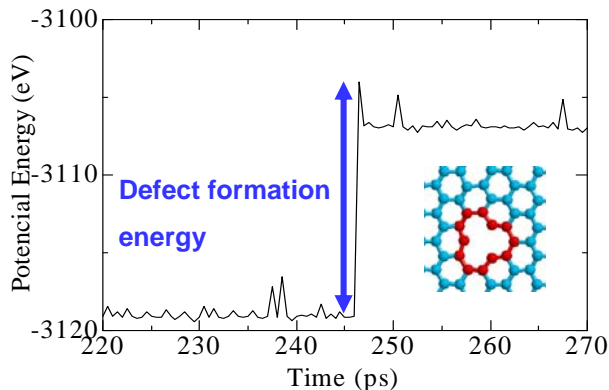


Fig.1 Variation of potential energy of graphene by knock-on defect formation.

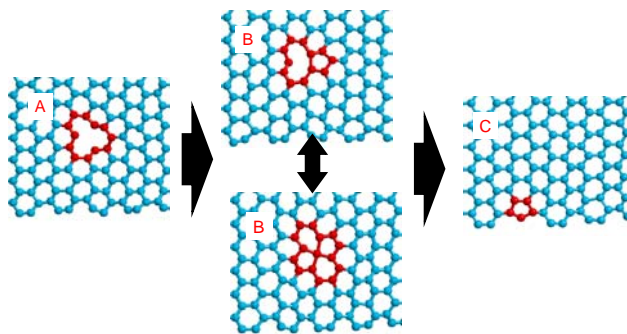


Fig.2 Transformation of mono-vacancy by annealing.