

二次元原子層材料の電子ビームナノ加工解析

Molecular Dynamics Study of Electron-Beam Fabrication of 2D Materials

○多田 和広¹、中川 力哉¹、鎌仲 章¹、安田 雅昭² (1. 富山高専、2. 大阪府大院工)

○Kazuhiro Tada¹, Rikiya Nakagawa¹, Akira Kamanaka¹, Masaaki Yasuda²

(1. NIT, Toyama Coll., 2. Osaka Pref. Univ.)

E-mail: tada@nc-toyama.ac.jp

はじめに

グラフェンなどの二次元原子層材料が、それが示す様々な特異な性質の為に大きな注目を浴びている。その中、二次元二層シリカは、超薄膜トランジスタのゲート絶縁膜への応用が期待されている。一方、ナノ材料へ適切に電子線を照射することが、所望の特性を有する構造へ変形させる技術になると期待されている。

本研究では、所望の電子線ナノ加工を実現するための基礎的知見を得るため、電子線衝突過程を組み込んだ分子動力学シミュレーションを用いて、電子線照射による二次元二層シリカ等の二次元原子層材料の構造変化を解析し、その加工条件の探索を行った。

シミュレーションモデル

電子衝突過程は遮蔽Rutherfordの衝突断面積に基づくモンテカルロ法により分子シミュレーションに組み込んだ。電子衝突下でのシリカ構成原子の挙動は古典分子動力学法より計算した。原子間ポテンシャルには Tersoff ポテンシャルを用いた。照射レート 30 electrons/ps で解析を行った。

解析結果

Fig.1 は、電子線を 300ns 間照射した後の二次元二層シリカから叩き出された酸素原子数とシリコン原子数の照射エネルギーによる変化をそれぞれ示している。酸素原子は 100keV 程度で叩き出しが起き始め、一方シリコン原子は 200keV 程度から叩き出しが起き始める。また、両原子とも照射エネルギーが大きくなるにつれて叩き出される粒子数は単調に増加している。

Fig.2 は、照射エネルギーが 200keV と 600keV の場合での二次元二層シリカの加工の様子を示している。200keV で照射した場合、酸素が叩き出され、シリコンのみが多く残っているのに対して、600keV で照射した場合、照射領域内の原子がほぼ叩き出され、材料が切断されている。

以上のことは、照射エネルギーの調整により、加工モードを選択できる可能性を示している。

本講演では、その他の二次元原子層材料に関する照射解析についても発表する予定である。

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。

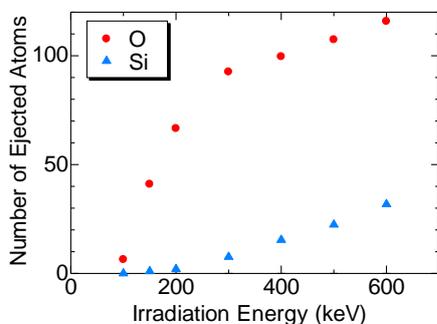


Fig.1. Number of ejected atoms in 2D silica bilayer as a function of irradiation energy after 300 ns electron irradiation.

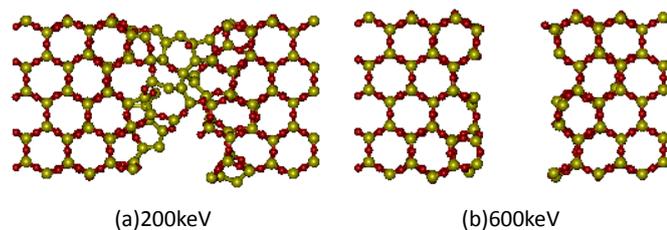


Fig.2. Atomic structures after 600 ns electron irradiation at (A) 200 keV and (B) 600 keV.