

グラフェンの原子スケール剥離の力分光のシミュレーション

Simulation of Force Spectroscopy of Atomic-Scale Peeling of Graphene

電通大院基盤理工¹ ◯岡本 遼路¹, 佐々木 成朗¹

The Univ. of Electro-Commun.¹, ◯Ryoji Okamoto¹, Naruo Sasaki²

E-mail: ryoji.okamoto@uec.ac.jp

1. はじめに

グラフェンは非常に優れた機械的・電気的特性を有しており、注目されている層状物質のひとつである。グラフェンの機械的特性が顕著に現れる現象として、グラファイト基板表面に吸着したグラフェンシートを引き剥がす剥離現象の研究が理論^[1]と実験^[2]の両方から進められてきた。しかし、これまでの分子力学シミュレーションによる理論的研究では、実験で用いられる原子間力顕微鏡 (AFM) の効果が考慮されておらず、また、剥離されるグラフェンのサイズも実験で用いられるグラフェンに比べて非常に小さいため、シミュレーションの結果と剥離実験の結果の直接的な比較はできなかった。そこで本研究では、AFM 測定と直接比較するため、凝着特性に注目したモデル化を行い、グラフェンの剥離過程のメカニズムを調べた。

2. モデル・計算手法

まず、グラフェンの原子スケール剥離をシンプルなモデルで記述した。引き剥がすグラフェンシートの対称性を利用して、シートから炭素原子のジグザグ鎖を取り出し (Fig.1(a)), それを xz 平面に射影した鎖状構造 (atom-spring model) でモデル化した。一方、計算時間を短縮するため、凝着特性に注目して、グラファイト基板を摩擦のない連続体シートでモデル化した (Fig.1(b))。次に、上述のグラフェン剥離の理論モデル (Fig.1(b)) の一部の原子に、調和ばねを接続して AFM の探針とカンチレバーの効果を導入した (Fig.2)。

3. 結果・考察

まず、過去の理論的研究^[1]で扱われたのと同じグラフェンの剥離を今回のモデルを用いて計算すると、剥離過程のグラフェンの xz 面内の形状と鉛直力曲線を非常によく再現でき、本モデルの妥当性を確認できた (Fig.3)。次に、AFM の効果を導入し、シートサイズの増加にともなう剥離特性の分光データの変化を議論した。

参考文献

[1] N. Sasaki, H. Okamoto, N. Itamura, and K. Miura, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **8**, 105 (2010).

[2] M. Ishikawa, N. Sasaki, and K. Miura et al., Appl. Phys. Exp. **5**, 065102 (2012).

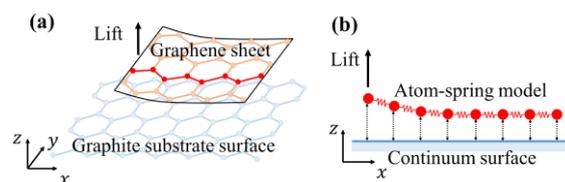


Fig.1: Schematic illustration of the model (a) in the previous simulation and (b) in this study.

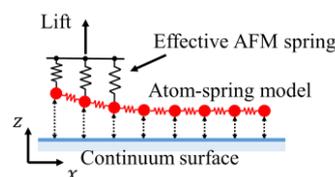


Fig.2: Schematic illustration of the model including effective AFM spring.

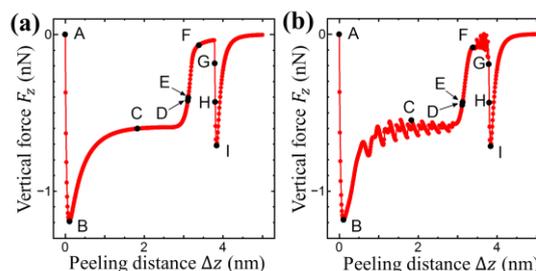


Fig.3: Vertical force-distance curves calculated by using (a) this model and (b) previous simulation.