

## グラフェンの電子線加熱と熱伝導の分子動力学解析

### A Molecular Dynamics Study of Electron-Beam Heating and Thermal Transportation in Graphene

大阪府大院工 ○上野泰幸, 川田博昭, 平井義彦, 安田雅昭

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

E-mail: yasuda@pe.osakafu-u.ac.jp

#### はじめに

ナノ材料の特性解析や加工は電子顕微鏡観察下で行われることも多く、電子線照射による温度上昇が得られる特性や構造に影響を及ぼすことが想定される。また、近年関心が高まっている材料の熱マネジメントの研究においても、電子線加熱は材料の局所的な熱特性評価法として有効な手法となることが期待される。本研究では、電子線照射効果を組み込んだ分子動力学法を用いて、グラフェンの電子線照射による局所的な熱発生とその熱伝導特性を解析した。

#### シミュレーションモデル

一定の時間間隔で電子線照射効果を導入しながら、グラフェン中の炭素原子の挙動を分子動力学法により計算した。電子線照射効果は衝突断面積を用いた二体衝突モデルにより確率的に導入した[1]。原子間ポテンシャルにはTersoff-Brennerポテンシャルを用いた。

#### シミュレーション結果

結果の一例を示す。Fig.1は解析に使用したシミュレーションモデルである。両端を固定したグラフェンナノリボンの左側の領域（緑色）に電子線を照射し、右側の赤枠に囲まれた領域の温度変化を求めた。中央の領域に欠陥（monovacancy）をランダムに導入し、熱伝導の欠陥依存性を解析した。Fig.2は測定領域の温度の時間変化の解析結果である。電子照射の加速電圧は30kVである。時間とともに照射領域で発生した熱が伝わり測定領域の温度が上昇している。電子衝突が確率過程であることによる統計変動のため、温度にバラツキは見られるが、欠陥が増加するに伴いグラフェンの熱伝導性が低下するため、測定領域の温度上昇は小さくなっている。

参考文献 [1] M. Yasuda et al., Phys. Rev. B **75**, 205406 (2007).

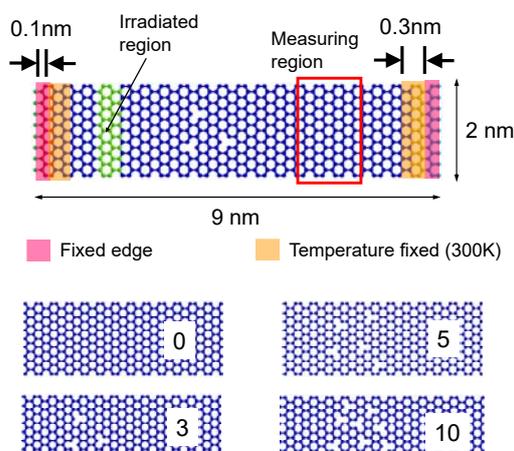


Fig.1 Configuration of thermal transport simulation in electron irradiated graphene with monovacancy defects.

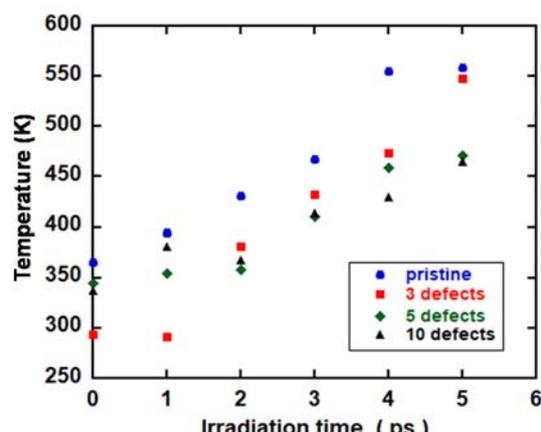


Fig.2 Temperature of defective graphene as a function of electron irradiation time.