

電子照射されたグラフェンナノリボンの熱伝導特性の分子動力学解析

Molecular Dynamics Study of Thermal Conduction properties of Electron-Irradiated Graphene Nanoribbon

大阪府大院工 ○都築奏, 宮下侑也, 川田博昭, 平井義彦, 安田雅昭

Osaka Prefecture Univ., °S. Tsuzuki, Y. Miyashita, H. Kawata, Y. Hirai and M. Yasuda

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

はじめに

材料とデバイスの熱マネジメントの関心が高まり、ナノ材料の熱伝導率などの特性が活発に研究されている。電子線照射は照射エネルギーと照射面積を高精度に制御できるため、原子レベルでの材料の構造制御技術の1つになると期待されている。本研究では、電子ビーム加工と改質により材料の熱特性を制御する技術の基礎的知見を獲得するため、電子ビーム照射がグラフェンナノリボンの熱特性に及ぼす影響を分子動力学法により解析した。

シミュレーションモデル

Fig.1は解析に使用したシミュレーションモデルである。Fig.1(a)のように両端を固定したグラフェンナノリボンの中央の領域に一定の時間間隔で電子線照射効果を導入しながら、グラフェンナノリボン中の炭素原子の挙動を分子動力学法により計算した。電子照射効果は弾性衝突断面積を用いて入射電子から炭素原子にエネルギーを確率的に移行することにより再現した。加速電圧は200kVに設定した。電子照射されたグラフェンナノリボンの構造に対し、Fig.1(b)のように両端に温度差のある熱浴を導入して熱流束を導出し、熱伝導率の変化を解析した。

シミュレーション結果

熱伝導率は熱流束に比例することから欠陥のないグラフェンと欠陥グラフェンの熱流束を比較し規格化された熱伝導率を導出した。Fig.2は規格化された熱伝導率と照射領域の欠陥率の解析結果である。欠陥率が大きくなるにつれ規格化された熱伝導率は低下し、図中に構造を示した欠陥率15%のナノリボンでは、欠陥なしの場合と比較し約40%以下の熱伝導率になった。

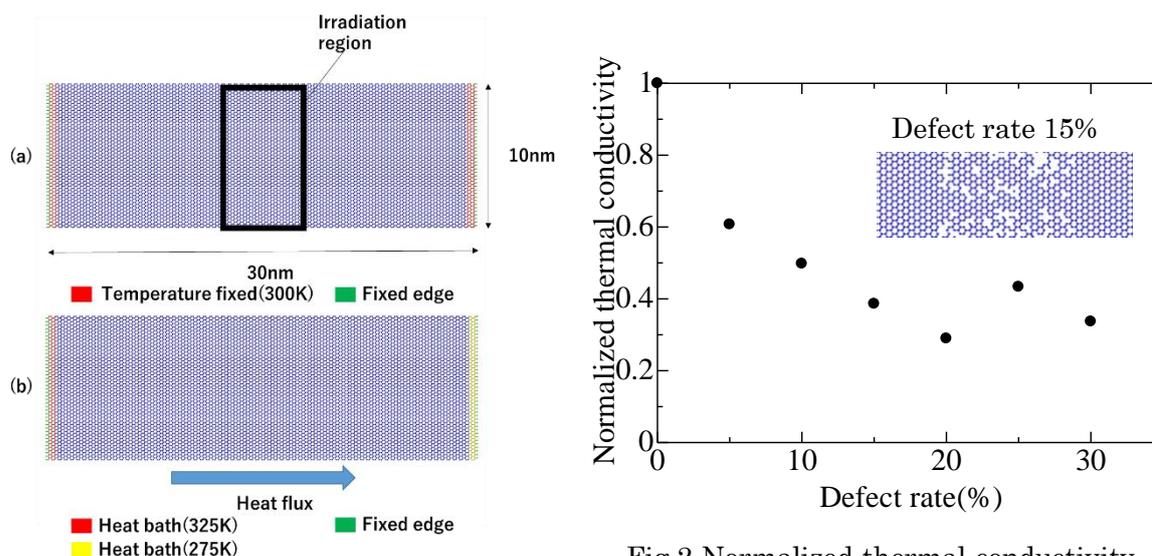


Fig.1 Schematic diagrams of the simulation models.

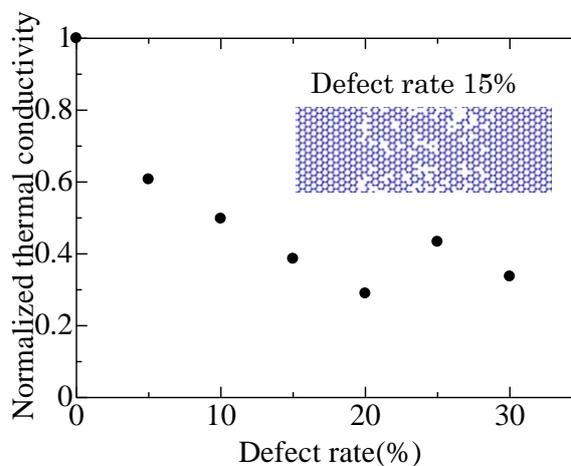


Fig.2 Normalized thermal conductivity of defective graphene as a function of defect rate.