

令和 4 年 6 月 3 日現在

機関番号：53203

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2021

課題番号：19K05192

研究課題名（和文）化学反応場における二次元材料を対象とした荷電粒子プロセスシミュレータの開発

研究課題名（英文）Development of charged particles process simulator for two-dimensional materials in a chemical reaction field

研究代表者

多田 和広（TADA, KAZUHIRO）

富山高等専門学校・その他部局等・准教授

研究者番号：90579731

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：これまで開発した電子線照射の分子シミュレーションをイオンビームに拡張し、二次元MoS₂のグラフェン被膜による荷電粒子ビームからの保護効果について、被膜条件を変え、バリア性能を決める要因について調べた。被膜条件として、二次元MoS₂の片面もしくは両面をグラフェンで被膜することとした。結果として、試料膜に垂直に電子線を照射する条件では、照射源から遠い側の面を被膜した場合に試料の電子線損傷に対する保護性能がある一方、照射源から近い側の面の被膜には保護性能は全く見られないことが分かった。また、電子線の照射角度を変えることによっても、保護性能に有意な差が出ることが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により開発されたプロセスシミュレーターは、実験だけでは確立が難しい、グラフェンや二次元MoS₂などの二次元材料の形状加工を実現するプロセス条件の確立に向けた基礎的知見を提示しており、今後二次元材料を用いた集積回路等の電子デバイスの開発における要素技術となりえる。

研究成果の概要（英文）：Extending the molecular simulation of electron irradiation to ion beams, we investigated the barrier performance of graphene coating on two-dimensional MoS₂ to protect it from charged particle beams under different coating conditions. The filming conditions were that one or both sides of the two-dimensional MoS₂ were coated with graphene. As a result, it was found that under the condition of electron beam irradiation perpendicular to the sample film, the film on the side far from the irradiation source has a protective effect against electron beam damage to the sample, while the film on the side near the irradiation source shows no protective effect at all. It was also found that changing the irradiation angle of the electron beam also produced significant differences in protective performance.

研究分野：分子シミュレーション

キーワード：分子動力学 二次元材料 表面物理 加工プロセス

1. 研究開始当初の背景

グラフェンや二硫化モリブデン (MoS_2) を始めとする二次元材料は、その際立った物理的、機械的及び電気的特性から、近年実験及び理論研究者双方の大きな注目を浴びている。特に、それらの材料を用いた次世代トランジスタやナノ電気機械システム (NEMS) の作製およびキャラクタリゼーションに関する多くの研究報告がなされてきている。その作製においては、荷電粒子を用いた加工が広く用いられているが、その過程で誘起される複雑な物理現象は十分には理解されておらず、そのプロセス条件は未だ確立されているとは言えない。また、励起プロセスによるものと考えられる興味深い構造変化が実験結果が報告されており、それらを再現・解析できるシミュレーションの開発が待たれる。

2. 研究の目的

本研究は、これまで開発した電子線照射の分子シミュレーションをイオンビームへと開発を拡張し、二次元材料に対して荷電粒子ビームが誘起する多彩で複雑な物理現象の機構解明のための理論解析と、二次元材料を制御性良く加工・改質するためのプロセス条件探索を行い、荷電粒子ビームと二次元材料の相互作用およびその応用技術についての科学的基礎を構築することを目的とする。

3. 研究の方法

二次元材料の分子内結合および分子間結合、さらには二次元材料を構成する原子と照射イオンとの相互作用すべてを同時に扱うことができる力場とそのパラメータの調査および決定を行った。パラメータの提供にあたっては、米国の力場開発当事者の協力を得た。イオンビーム照射の計算モデルについては、これまでの電子線照射のモデルをイオンに拡張する形で、照射過程にモンテカルロ法を用いた分子動力学計算モデルを用いて、計算プログラムを開発した。続いて、(1) グラフェンへの希ガスイオンビームの照射計算を実行し、グラフェン構造の変形過程について解析を行い、グラフェン自身の被膜によるバリア効果の検討を行った。また、(2) 二次元 MoS_2 への電子線照射解析を行い、グラフェン被膜による照射に対するバリア性能評価を行った。

4. 研究成果

(1) グラフェンへの希ガスイオンビーム照射計算とグラフェン被膜によるバリア効果の検討

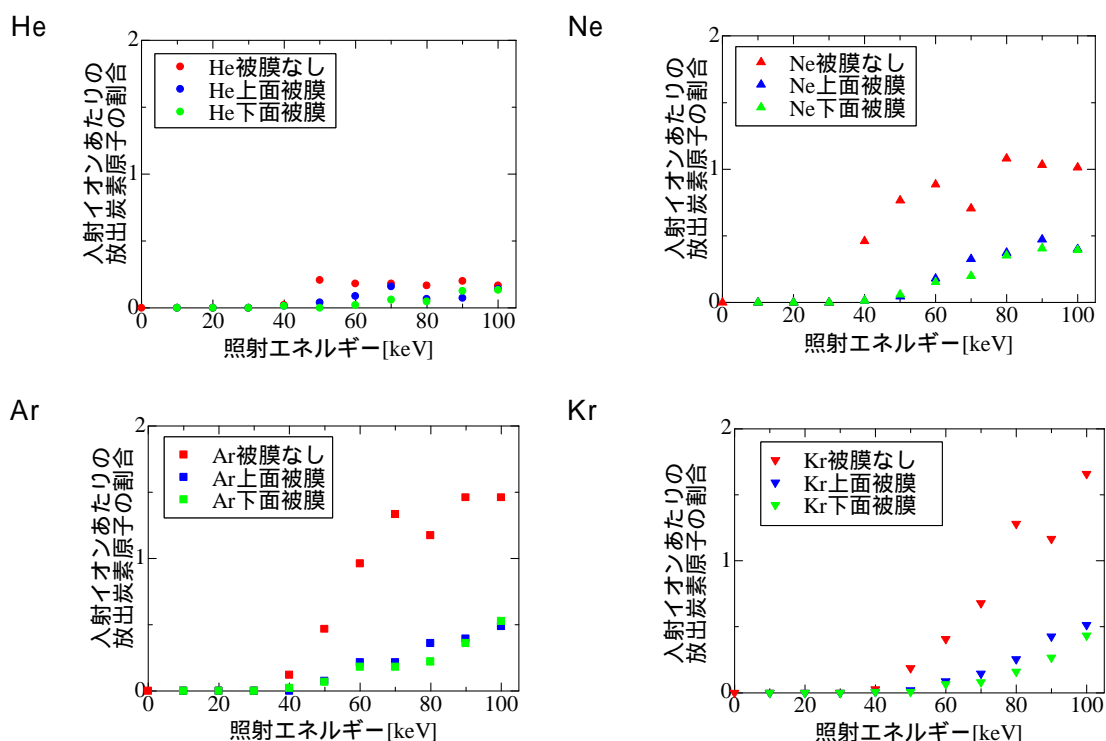


図1 各希ガスイオンにおける照射エネルギーと入射イオンあたりの放出炭素原子数の割合

図1は各希ガスイオンにおける照射エネルギーと入射イオンあたりの放出炭素原子数の割合を表している。Heイオンは被膜条件に関わらず叩き出される炭素原子の割合が低いことがわかる。これは、照射イオンの半径が小さくグラフェンとの衝突が起きにくく、叩き出される炭素原子の

割合が低くなったと考えられる。Ne、Ar、Kr イオンは被膜なしより被膜ありの方が、叩き出される炭素原子の割合が低く、被膜によるグラフェンの保護効果を確認することが出来た。単層より二層の方が、イオンが衝突した場合に衝突した面とそれ以外の面でエネルギーの分散が発生するため、叩き出される炭素原子の割合が低くなったと考えられる。上下面をそれぞれ被膜した場合を比較すると、上面被膜は下面被膜より多く叩き出されることが分かる。上面被膜は照射時の運動量が上面から下面に移行し、下面の原子が叩き出されやすくなったと考えられる。下面被膜は、上面のグラフェンがイオンから受けた運動量を下面が受け取るため、上面の原子は叩き出されにくくなっていると考えられる。

(2) 二次元 MoS₂ への電子線照射解析とグラフェン被膜によるバリア効果の検討

図 2 は二次元 MoS₂ の被膜状態を示している。図 3 は照射電子数に対する叩き出される MoS₂ 原子数の割合のエネルギー依存性を表している。照射エネルギーを大きくするほど叩き出される原子の割合も大きくなること分かる。さらにどの照射エネルギーでも上層に被膜があるよりも、下層に被膜がある時の方が MoS₂ に影響がないことが分かる。このことより下層被膜の保護効果にエネルギー依存性が小さいことが分かる。下層被膜で照射エネルギーが 200keV の時 MoS₂ の叩き出しが起きていないことが分かる。このことから下層被膜で照射エネルギーが低い時は長時間の保護が期待できる。

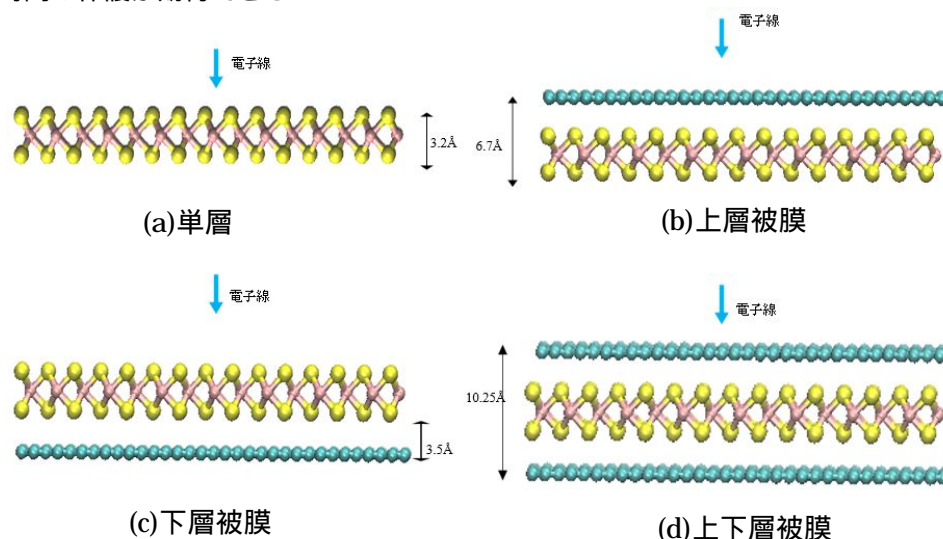


図 2 二次元 MoS₂ の被膜状態

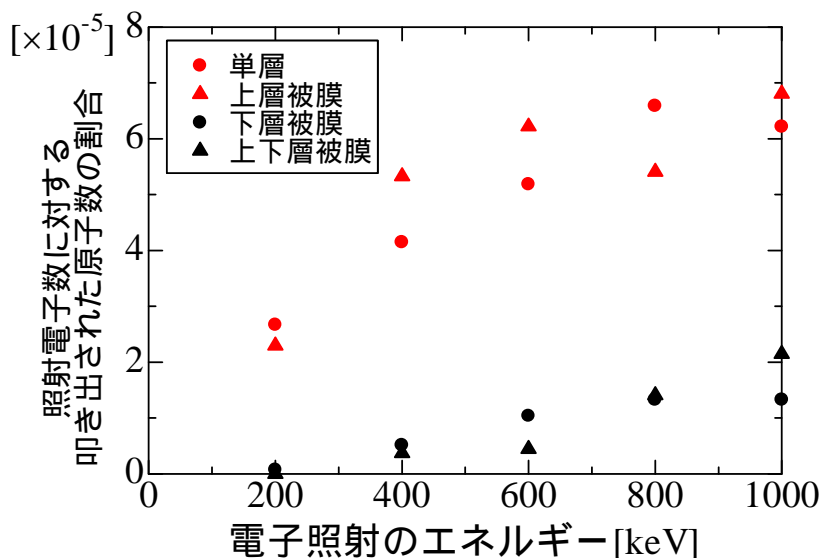


図 3 照射電子数に対する叩き出される MoS₂ 原子数の割合

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 向川 慶汰, 河原 功弥, 多田 和広
2. 発表標題 有機ナノ薄膜のせん断挙動に関する分子シミュレーション
3. 学会等名 2020年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Keita Hibi, Kazuhiro Tada
2. 発表標題 Molecular dynamics study of structural changes in silica glass under electron irradiation
3. 学会等名 12th Int. Symp. on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '19 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuhiro Tada, Kento Nakada, Keita Hibi
2. 発表標題 Molecular dynamics study on shielding effect of graphene for protecting 2D materials under electron irradiation
3. 学会等名 12th Int. Symp. on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '19 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田和広、日比慧太、安田雅昭
2. 発表標題 電子ビーム照射下におけるシリカガラスの構造変化解析
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田和広、仲田健人、安田雅昭
2. 発表標題 電子ビーム照射下における二次元MoS2の構造変化解析
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田和広、仲田健人、安田雅昭
2. 発表標題 電子線照射下における二次元MoS2のグラフェンによる遮蔽効果に関する分子動力学解析
3. 学会等名 2019年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田和広、日比替太、安田雅昭
2. 発表標題 電子ビーム照射下におけるシリカガラスの構造変化解析
3. 学会等名 2019年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	平井 義彦 (HIRAI YOSHIHIKO) (50285300)	大阪府立大学・工学(系)研究科(研究院)・教授 (24403)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------