

金属微粒子の加熱によるナノポア形成の現象論的モデル

Phenomenological Model of Nanopore Formation by Annealing Metal Nanoparticles

阪大産研¹, 神大院海事科学², 甲南大理工³ ○須藤 孝一¹, 高坂良史², 内藤宗幸³

Osaka Univ.¹, Kobe Univ.², Konan Univ.³, °Koichi Sudoh¹, Yoshihito Kohsaka², Muneyuki Naito³

E-mail: sudoh@sanken.osaka-u.ac.jp

直径がナノメートルオーダーの細孔（ナノポア）が形成された固体基板は、電極材料、センサー、モールドなど幅広い応用が期待される。最近、Vreede ら[1]は SiO_2 基板上的金微粒子を 1050°C で加熱すると、金微粒子が基板中に沈降し、基板表面にナノポアが形成されることを明らかにし、新しいナノポア形成技術として注目されている。内藤ら[2]は、モンテカルロシミュレーションにより、微粒子の触媒作用による基板原子の蒸発が、ナノポア形成において重要な役割を果たしていることを明らかにしているが、金属微粒子の加熱によって起こるナノポア形成のメカニズムはまだ十分に理解されていない。今回、我々は、金属微粒子の加熱によるナノポア形成を説明する単純な現象論的モデルを提案し、ナノポア形成過程のシミュレーションを行ったので報告する。

我々のモデルでは、表面・界面拡散による構造変化と微粒子の触媒作用による基板原子の蒸発を考慮する。微粒子表面、基板表面、および基板／微粒子界面は、それぞれ Mullins 方程式[3]に従って時間発展するものとする。金属微粒子の触媒作用を取り込むために、基板表面の時間発展方程式にだけ、三重点からの距離とともに指数関数的に減衰する蒸発項を加えた。三重点では、表面・界面張力が均衡すること、拡散流が均衡すること、基板原子の化学ポテンシャルが一致することを仮定し、それらを微分方程式の境界条件として用いた。図1は、我々が提案するモデルによる2次元の場合の数値計算結果である。微粒子が基板内部へと沈降し、十分な時間が経過すると基板に穴が形成される。この結果は、実験で観察されているナノポア形成過程をよく再現しており、我々の提案する現象論的モデルの妥当性を示唆している。当日は、モデルのパラメータに依存した構造変化の違いや、数値計算の結果から分かるナノポア形成のメカニズムについて述べる。

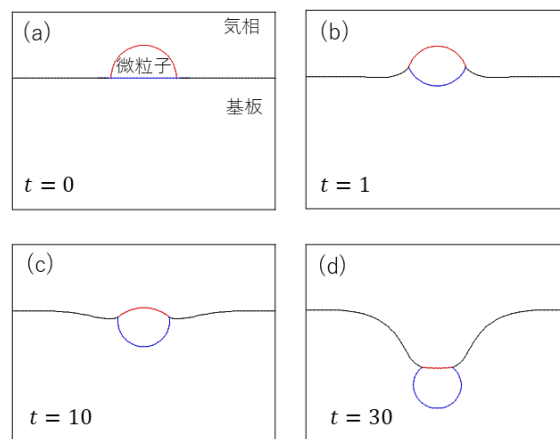


図1. ナノポア形成の数値計算結果

【参考文献】

- [1] L. J. de Vreede et al., Nano Lett., 15 (2015) 727.
- [2] M. Naito et al., 第70回応用物理学会春季学術講演会 17p-PB05-5
- [3] W. W. Mullins, J. Appl. Phys., 28 (1957) 333.