## Controlled growth of single-crystalline metal nanowires via thermomigration across a nanoscale junction\* 大阪大学 大学院基礎工学研究科 新里 秀平、尾方成信

目的 温度勾配のあるナノ構造材料における新たなナノワイヤ創製方法を提案 し、そのメカニズムを解析する

本論文中の実験により確認されているナノワイヤ創製の中核メカニズム 内容 であるthermomigrationによるナノワイヤ成長プロセスを解析するため に、基材表面及びその直上にあるネッキング部における原子の拡散プロ セスを分子動力学計算を行った。

結果 分子動力学計算より、ナノワイヤの成長。 プロセスが粒界からの原子侵入によるも のであることが示唆された。また、 粒界面における拡散が引張荷重により 促進されたことから、同論文で行った 実験及びFEM解析により考察された、 引張荷重によるナノワイヤの成長の促進いがいい が裏付けられる結果を得ることができた。

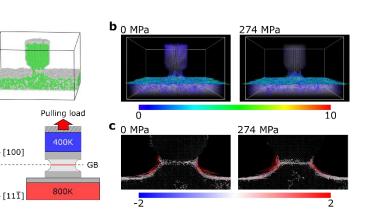


図. 温度勾配下における表面、粒界での 原子拡散プロセスの分子動力学解析

利用した計算機 **OCTOPUS**   $[2\overline{1}1]$