

レーザーを利用した酸化グラフェン還元 のシミュレーション

TASCグラフェン事業部 宮本 良之

目的 高品質グラフェンによる電子部品製造技術へレーザー利用の還元プロセスの有用性を検証する

内容 強電界短パルスレーザーの波形と強度を想定した電子・格子ダイナミクスのシミュレーションを行う

結果 レーザー波形を圧縮したシミュレーションを行った結果効率の良い還元反応とグラフェンへの低ダメージを確認した。

利用した計算機	SX-ACE
ノード時間	2657時間
使用メモリ	80GB/(9 nodes)
ベクトル化率	99.1%
並列化	36並列(最大)

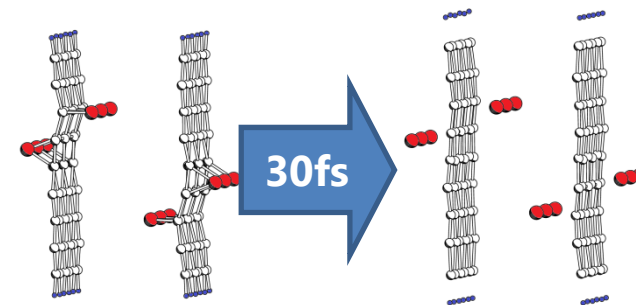


図 (pulse照射後の還元シミュレーション途中経過)