

Graphitic層状物質上のレーザー水分解のシミュレーション

産業技術総合研究所ナノシステム研究部門 宮本 良之

- 目的** グラフェンなどの2次元材料の特性を生かしたレーザー化学の探索
- 内容** グラフェン、hBN、 gC_3N_4 の層状物質上へ水分子を乗せた場合のレーザー分解を調べた
- 結果** これら層状物質上に水分子がある場合には水蒸気上の水より低いパワーでレーザー水分解が促進されることがわかった。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
ベクトル化率
並列化

SX-ACE

おおよそ3万時間
55.2GB(4nodes)
99.1%
16並列(最大)

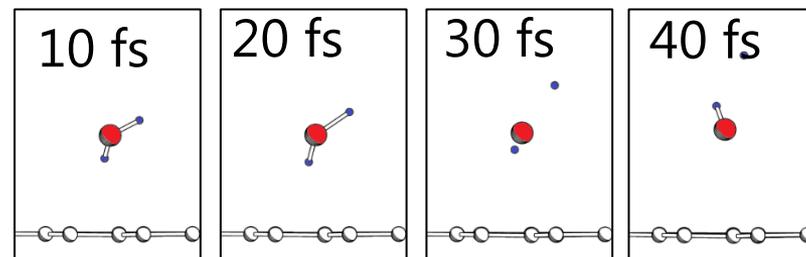


図 (パルス幅10fsのレーザーによりgraphene上で分解する水分子) その他、hBN上、 gC_3N_4 上の結果もあり。