

プラズマ気相法におけるラジカル反応のシミュレーション

TASCグラフェン事業部 宮本 良之

目的 銅表面上のグラフェンプラズマ気相成長メカニズムを解明する。

内容 メタン分子より発生するラジカル分子を予想し、銅基板との相互作用をシミュレーションで調べた

結果 シミュレーションにてCHラジカルを銅基板に運動エネルギー10eVで衝突させた。C-H結合分解は容易に起きず、さらに複雑な過程の存在が示唆された。

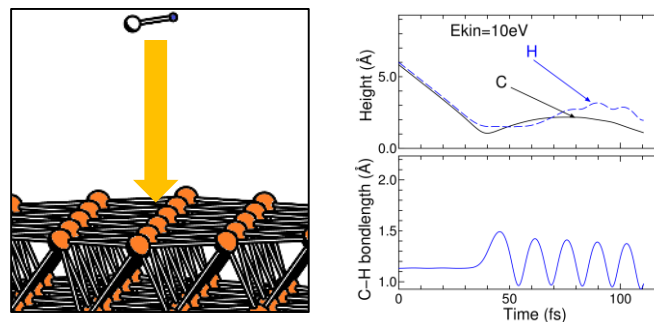
利用した計算機 SX-ACE

ノード時間 83803時間

使用メモリ 30GB

ベクトル化率 99%

並列化 36並列



図(左) : Cu111面に突入するラジカル。
(右) シミュレーションによるC原子とH原子の高さの推移(上)とC-H長の変化(下)