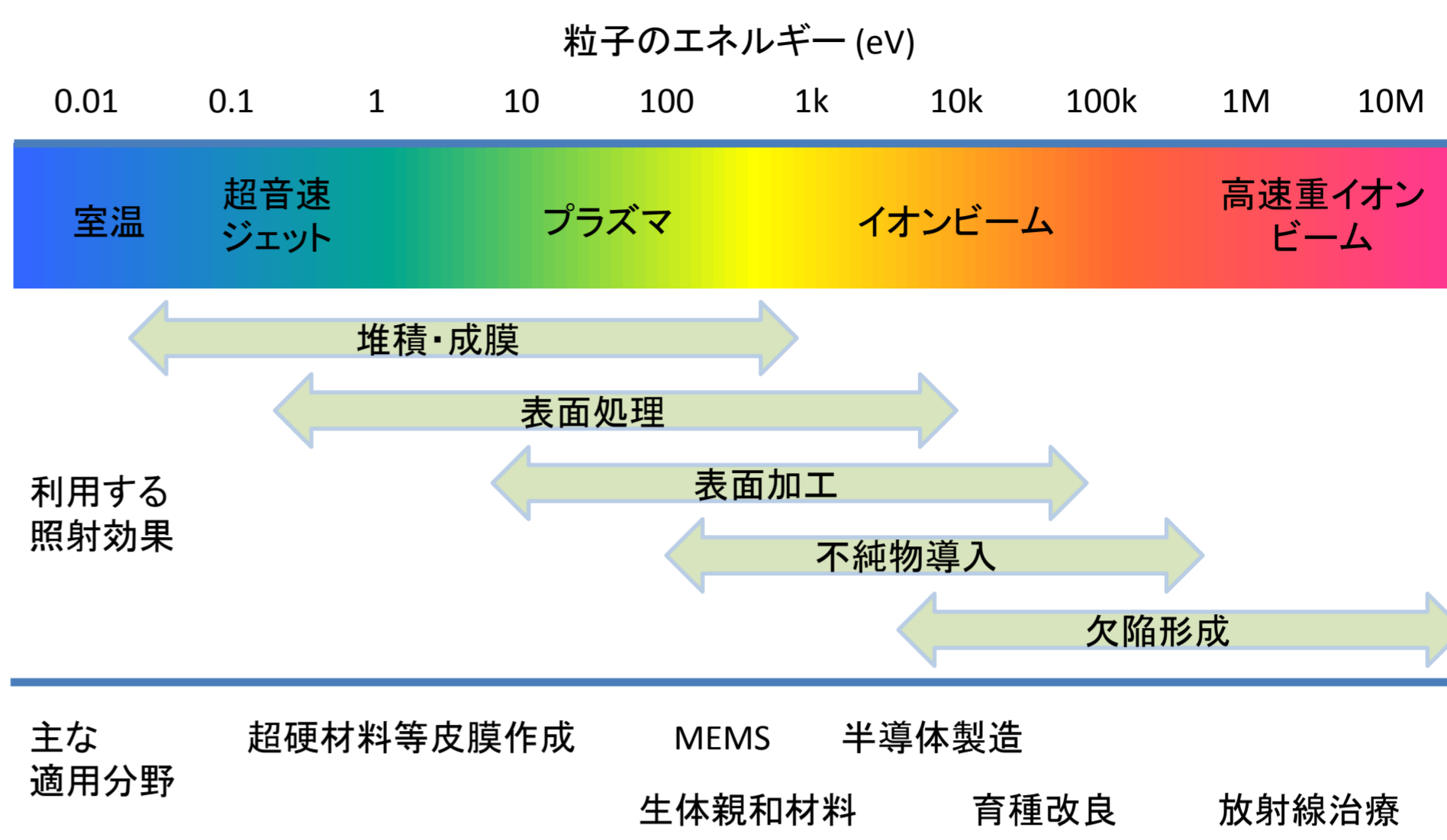


原子衝突による材料科学のための大規模シミュレーション基盤



背景と目的

イオンビーム、プラズマ、超音速ジェット技術は、常温以上の運動エネルギーをもった原子や分子を精密に制御し、標的材料に衝突させる技術である。これらは半導体製造プロセスと筆頭とするナノテクノロジーにおける製造、計測技術に必須の手法である。ナノテクノロジーの発展に伴い、これらの粒子線技術も更なる高度化、多様化が求められるようになってきている。本課題では、エネルギー粒子と固体表面の相互作用の解明と応用に関する知見を得るため、分子動力学シミュレーションをはじめとする大規模原子衝突シミュレーション基盤の確立を目標とする。



共同研究・開発の要点

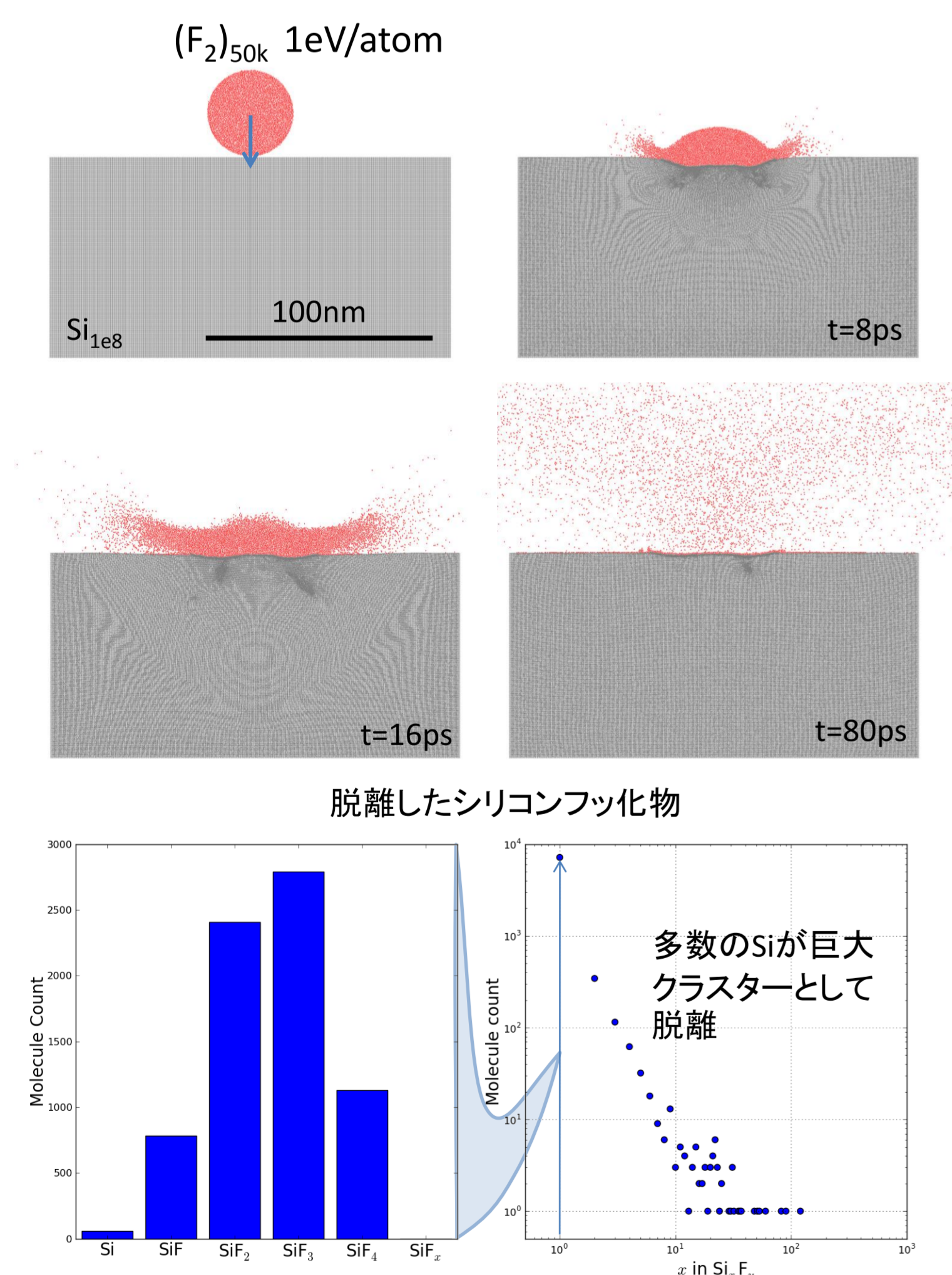
原子衝突現象に適応したシミュレーション手法
大規模シミュレーションデータの分散処理手法

MD・MC・DD間でのマルチフィジクス、マルチスケール連携
実験との連携による新しい物理・工学分野の開拓

実施例

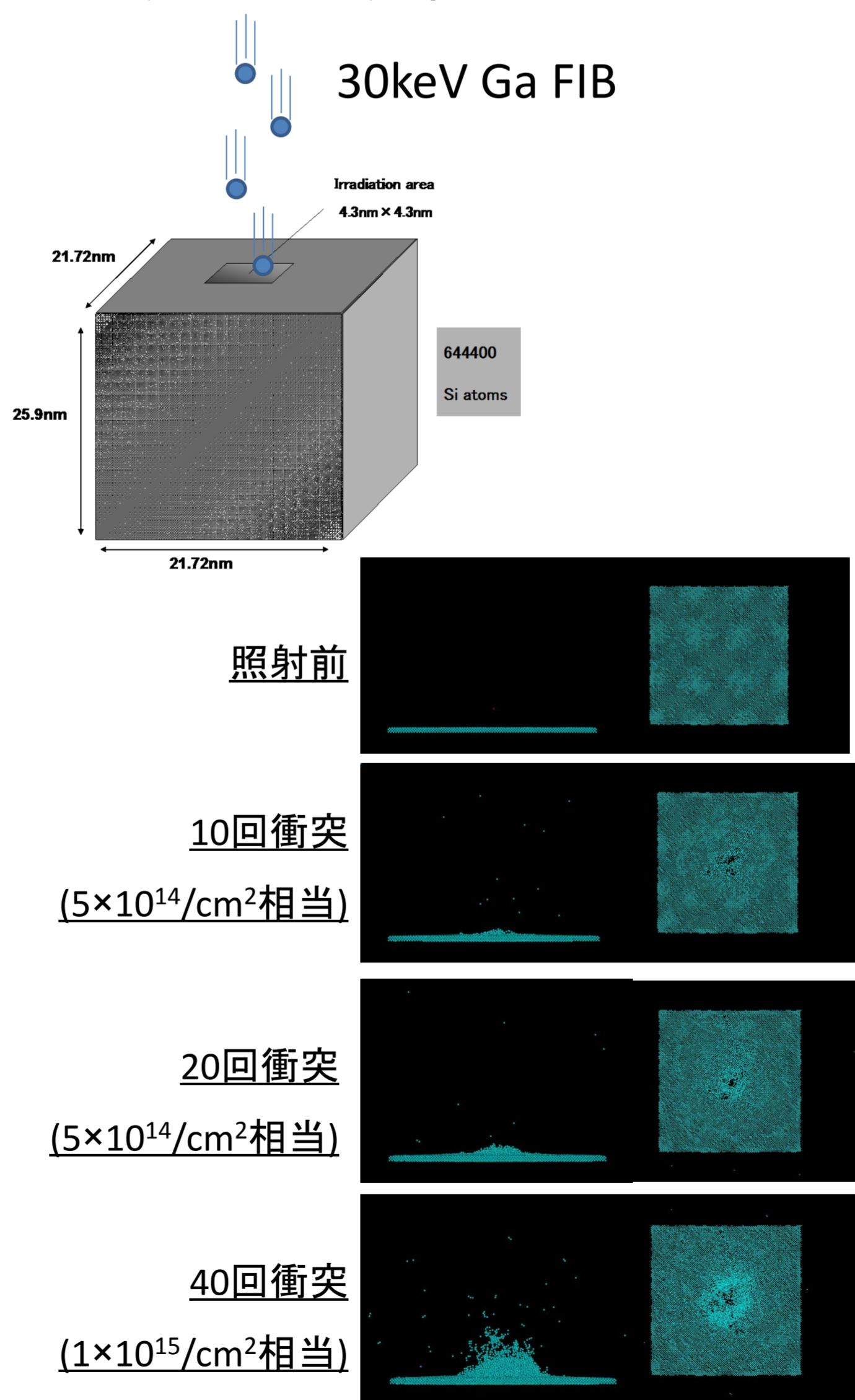
巨大クラスター衝突

巨大原子集団であるクラスターの衝突シミュレーションを実施, 多量の原子座標データから表面反応過程、衝突に伴う統計的性質を導出



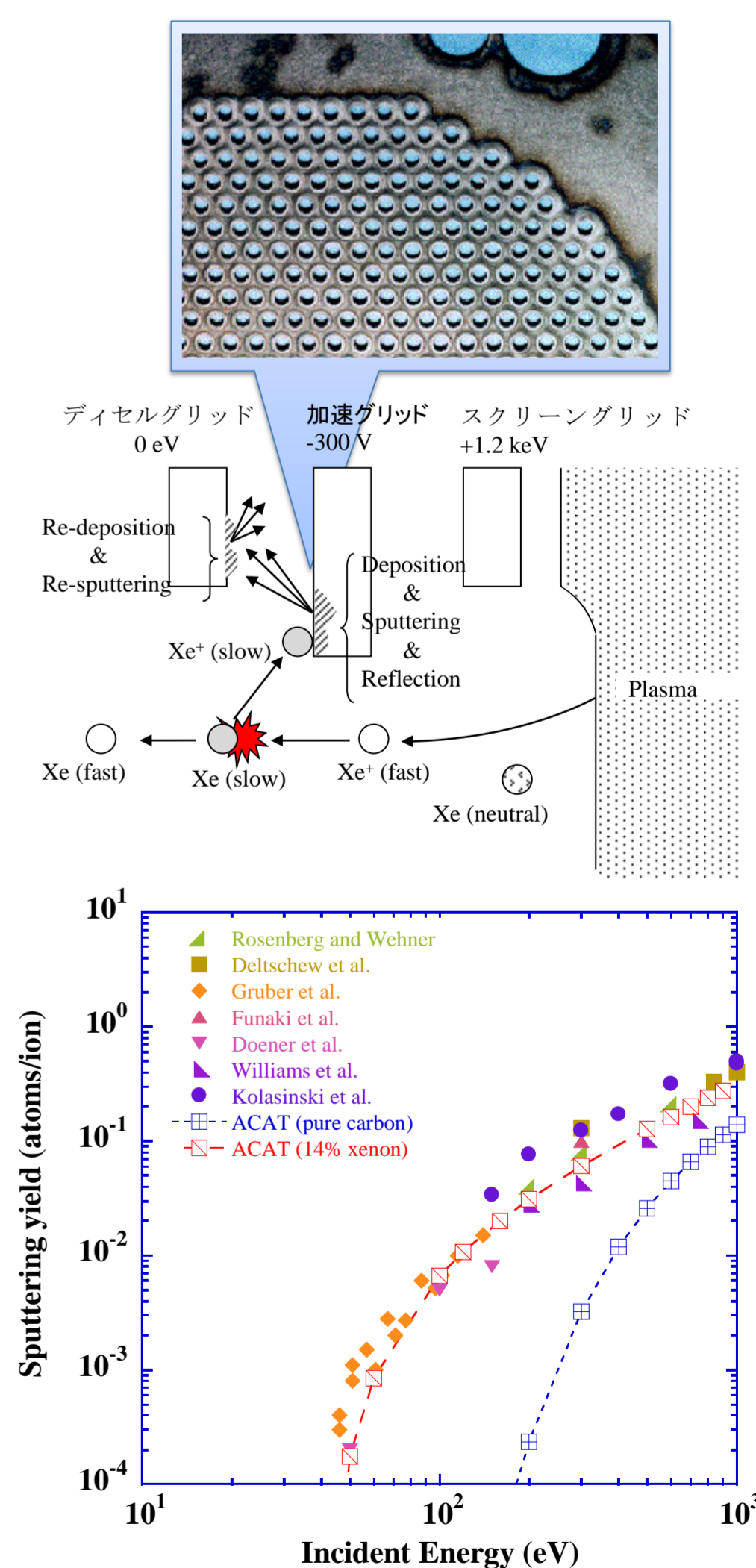
収束イオンビーム(FIB)加工

原子衝突に伴う大規模な原子移動(表面の変形、スパッタリング)のシミュレーション



プラズマ照射ダメージ

Xeイオンエンジン部材の損耗メカニズムのMCシミュレーション(ACAT)。表面にXeが混入することで炭素複合材料が劣化するモデルを提案



巨大座標データの取り扱い

多体効果による反応メカニズム

短時間・高エネルギー付与からの散逸過程

照射効果の蓄積

低頻度現象の捕捉

マルチスケール化