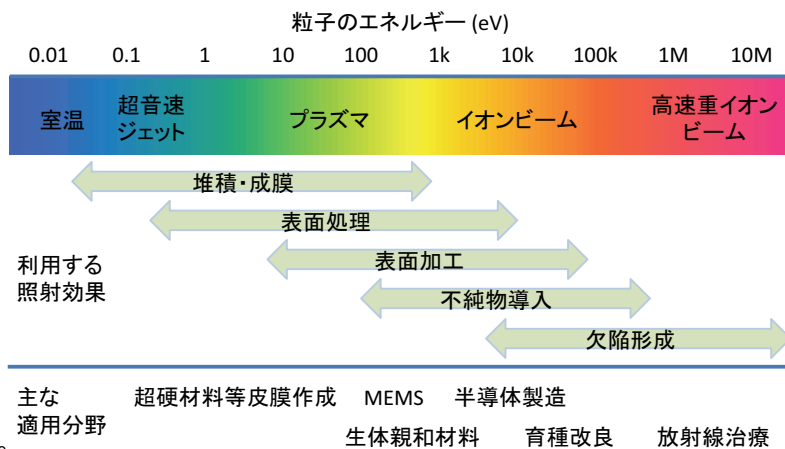


原子衝突による材料科学のための大規模シミュレーション基盤



背景

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いる。特に、利用するエネルギー領域の拡大、そして単原子や分子に変わる巨大原子集団(クラスター)の利用は、従来にはない照射効果を示すことから、ナノ精度表面加工、高精度材料分析をはじめとするさまざまな加工、計測技術分野に新しい応用をもたらすものとして期待されている。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。



対象とする物理・工学現象

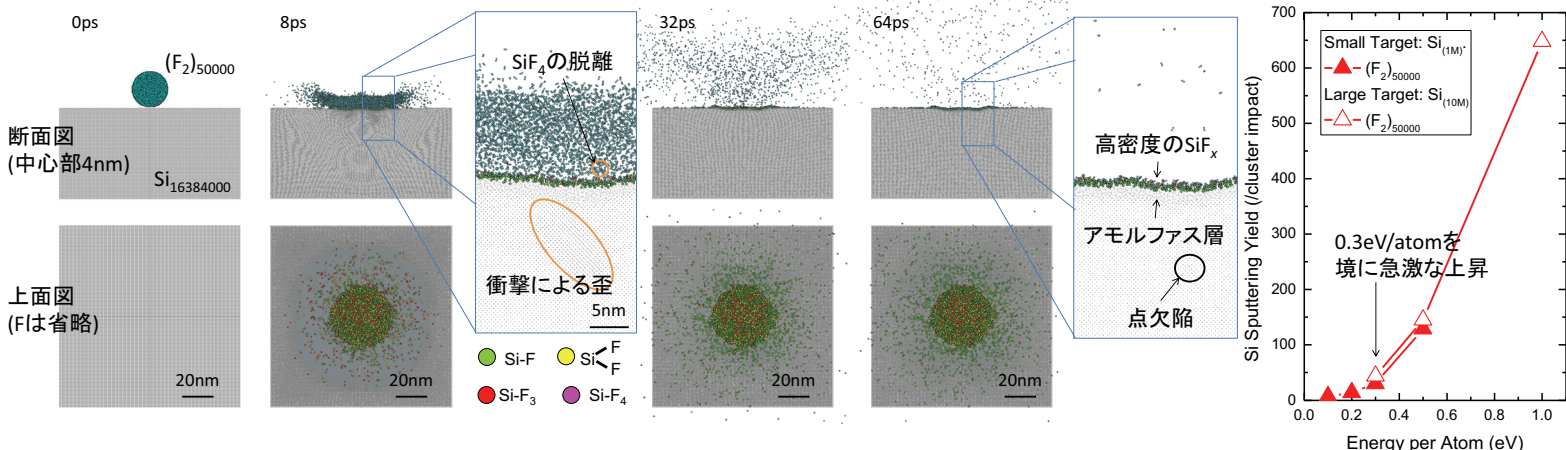
原子衝突によるエネルギーの付与と散逸過程
繰り返し衝突による複合、蓄積効果
種々の実験結果との直接比較

計算機シミュレーション上の課題

大規模原子衝突シミュレーション
原子衝突現象に特化したシミュレーション手法
原子座標データに対する高速、大容量、高可搬性データ処理

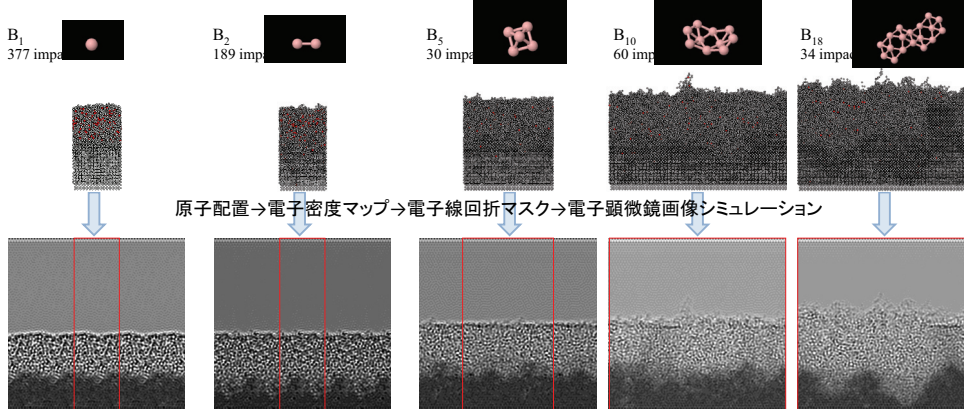
実施例: 高エネルギー原子衝突現象

超音速巨大フッ素クラスターの衝突 $[(F_2)_{50000}, 1\text{eV/atom} (100\text{keV}) \rightarrow \text{Si}_{16384000}]$



実施例: 繰り返し衝突による複合・蓄積効果, 実験結果との直接比較

ホウ素イオン注入のシミュレーション $[B_n 500\text{eV/atom} \rightarrow \text{Si}, 2 \times 10^{14} \text{ B atom/cm}^2 \text{相当}]$



実験による電子顕微鏡画像, ホウ素深さ分布
500eV/atom, $1 \times 10^{15} \text{ B atom/cm}^2$ 相当

