

浸透圧調整物質の界面和周波発生分光の 第一原理シミュレーション

大阪大学大学院基礎工学研究科 氏名 大戸 達彦

- 目的 トリメチルアミンオキサイド (TMAO) 水溶液・
空気界面の和周波発生分光スペクトルを計算する
- 内容 これまで決定されていなかった、界面における
TMAOの配向を界面選択的な分光スペクトルによっ
て決定する
- 結果 TMAO 4 分子・水80分子からなる系の第一原理分子
動力学トラジェクトリを124ps集め、C-H伸縮振動
領域の和周波発生分光スペクトルを計算できた

| | |
|---------|---------|
| 利用した計算機 | VCC |
| ノード時間 | 17500時間 |
| 使用メモリ | 60GB |
| 並列化 | 20ノード並列 |

