

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

