

分子動力学シミュレーションによる 水分子の配向相関

大分大学 理工学部 氏名 岩下 拓哉

目的 液体の物性である粘性，特に水の粘性の微視的起源を明らかにすること。

内容 水分子の配向モーメントの時間相関関数を計算し，Self and Collective correlation を直接比較する。

結果 Collective part のほうがSelf partより早く緩和することがわかり，およそその緩和時間は10 ps程度であった。また，およそ指数関数的減衰を示した。

利用した計算機

VCC

ノード時間

5700ノード時間

使用したソフト

LAMMPS

並列化

60並列

