

DFT-MDによる水の界面物性の記述

大阪大学大学院基礎工学研究科 大戸達彦

目的 どのような汎関数が、水の界面物性をよりよく記述できるかを明らかにする

内容 多数の汎関数を用いて水/空気界面のDFT-MDシミュレーションを行い、和周波発生分光スペクトルを計算・比較した

結果 ハイブリッド汎関数revPBE0-D3(0)が、界面のOH結合の性質や和周波発生分光スペクトルをよく記述することが明らかにした

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

OCTOPUS

300000時間
190GB
384並列

