

DFT-MDによる水の振動モード結合の解明

大阪大学大学院基礎工学研究科 大戸達彦

目的 水の変角振動がどのようにして熱に変換されるかを調べる

内容 バルク水のDFT-MDシミュレーションを行い、速度・速度相関関数を計算することで振動モード間の結合の様子を明らかにした

結果 水の変角振動は分子間では伝わりにくいが、同じ分子の束縛回転振動を励起することで熱に変換されることを明らかにした。

Nature Communications **11**, 5977 (2020).

利用した計算機 OCTOPUS

ノード時間 35000時間

使用メモリ 190GB

並列化 384並列

