

界面での分子の挙動解析

大阪大学大学院 工学研究科 NTN次世代協働研究所 古林 卓嗣

目的 鉄表面での硫化物の挙動を明らかにする。

内容 第一原理計算パッケージを利用し、想定される鉄表面上の硫化物構造のエネルギーを計算し、反応経路探索を行った。

結果 鉄表面で硫化鉄が分解し硫化鉄が生成される過程に関する知見を得た。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ

OCUTOPUS、SQUID

14830時間 (OCTOPUS) 、5688時間 (SQUID)
10 GB