

酸化鉄表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 関谷 暢

目的 酸化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、想定される酸化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 酸化鉄表面で硫化物が吸着・分解する過程に関する知見を得た。

利用した計算機
ノード時間

OCUTOPUS、SQUID
11394時間（OCTOPUS）、10337時間（SQUID）