

水の誘電緩和の時空間構造解明

大分大学 理工学部 氏名 岩下 拓哉

目的 水の誘電緩和スペクトルと構造の関係を解明する。

内容 水分子の配向モーメントの時空間相関関数から相関時間と相関距離を調べる。

結果 水分子の配向相関において、空間に関しては約8Åの中距離相関が存在し、時間に関しては、約15psの相関をもつことがわかった。

利用した計算機	VCC
ノード時間	10000ノード時間
使用したソフト	LAMMPS
並列化	60並列

