

固体表面における有限温度での化学反応シミュレーション

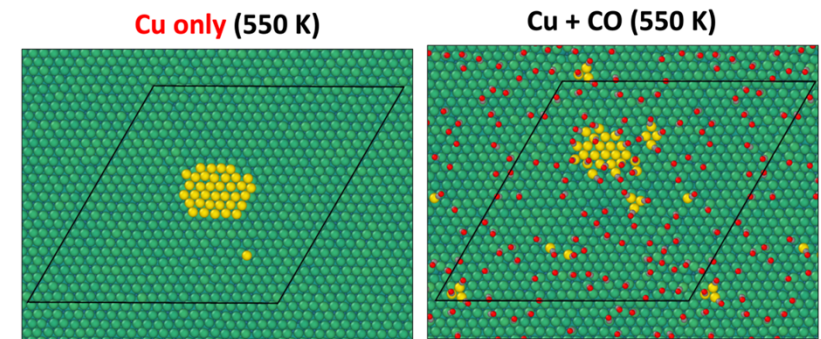
大阪大学 大学院工学研究科 森川 良忠

目的 界面における化学反応は多くの応用分野で重要である。本研究では反応中の固体表面の状態を精度良くシミュレーションすることを目的とする。

内容 DFTの結果を用いて精度の高い機械学習原子間ポテンシャルを作成し、CO雰囲気ガス中のCu表面の構造変化、および、ダイヤモンド表面の構造変化について調べた。

結果 COの雰囲気ガス中でCu表面上に小さなクラスターが多数生成する現象、および、ダイヤモンド表面の劣化の過程を明らかにすることに成功した。

利用した計算機 SQUID GPUノード群
ノード時間 40,000 時間
使用メモリ 30 GB
並列化 1-4ノード 並列



CO雰囲気中でのCu表面上での小さいCuクラスターの形成過程