

有機無機複合膜向け 分子動力学技術

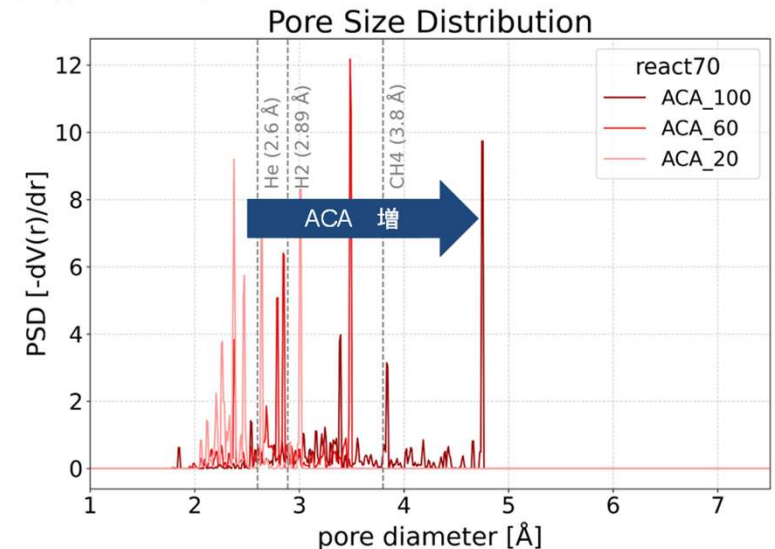
神戸大学大学院 科学技術イノベーション研究科 川口 博

目的 有機無機複合膜を題材とし、AIを活用することで従来の分子動力学（MD）より高速かつ高精度なMDシミュレーションを可能とする技術を開発する。

内容 有機無機膜材料に対する第一原理分子動力学シミュレーションを行い、データセットを取得した。

結果 有機物（ACA）残存率によって膜の細孔サイズの調整が可能であることを示した。

利用した計算機	SQUID 汎用GPUノード群
ノード時間	1,500 時間
使用メモリ	50 GB
並列化	8ノード 並列



有機無機複合膜細孔径分布：
ACA残存率を増やすことにより
細孔サイズの調整が可能