

「気液界面の構造に対するsum frequency generationスペクトルの非経験的理論解析」

講演者氏名	森田明弘
所属	京都大学大学院理学研究科
講演タイトル	「気液界面の構造に対するsum frequency generationスペクトルの非経験的理論解析」
講演概略	<p>近年盛んになりつつある不均質大気化学研究の基礎として重要な大気圧下での表面構造をプローブするには、SFGは特に有力である。</p> <p>本研究では分子軌道法と分子動力学シミュレーションを用いてSFGスペクトルの非経験的シミュレーションを行う方法を開発し、それを気液界面の構造に応用した。その際に行った大規模なベクトル並列計算の性能についてもふれる。</p>