

令和 7 年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

ミスト化学気相成長法の反応機構解析

Analysis of the reaction mechanism in mist chemical deposition

京都大学 工学研究科 材料化学専攻 応用固体化学研究室 若松 岳

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、量子化学計算ソフト Gamess を用いてミスト化学気相成長法の反応機構解析の解析を行うことを目的とした。調和溶媒和モデル(HSM)を用いてミスト中(水溶液中)における化学種の自由エネルギーを計算した。さらに、気相状態における自由エネルギーを計算した。上記で得られた結果を用いてミストおよび気相状態における反応物のモル分率および分圧を導出する予定である。