第6回燃料電池シミュレーション課題連絡会議事録

場所：大阪大学工学部

日時：2011年10月14日11:00-15:30

参加者：赤木和人、洗平昌晃、池庄司民夫、稲垣耕司、大谷実、杉野修、塚田捷、濱田幾太郎(欠席：資料提供のみ)、真塩徹也、森川良忠

議題

STATE解析結果（NECレポート）をHPへのアップロードに関して（杉野）

マルチカノニカル法に関する文献紹介（洗平）

ESMトラジェクトリーの解析結果紹介（赤木）

* PBE96の傾向（水素結合強度の過大評価）
* 水素結合網の環統計（hydronium ionが7員環に取り込まれやすい、表面付近での少数員環の形成）
* 水素結合網の結合速度
* 多数員環を記述するのに必要なセルサイズ

ESM計算結果と他グループ(Anderson, Norskov)による計算結果の比較（杉野）

* water splitting反応の平衡電位
* Volmer stepの活性化障壁

NDA締結のための内容等の確認（真塩）

次回日程

１２月１日(木)11:00-東大物性研