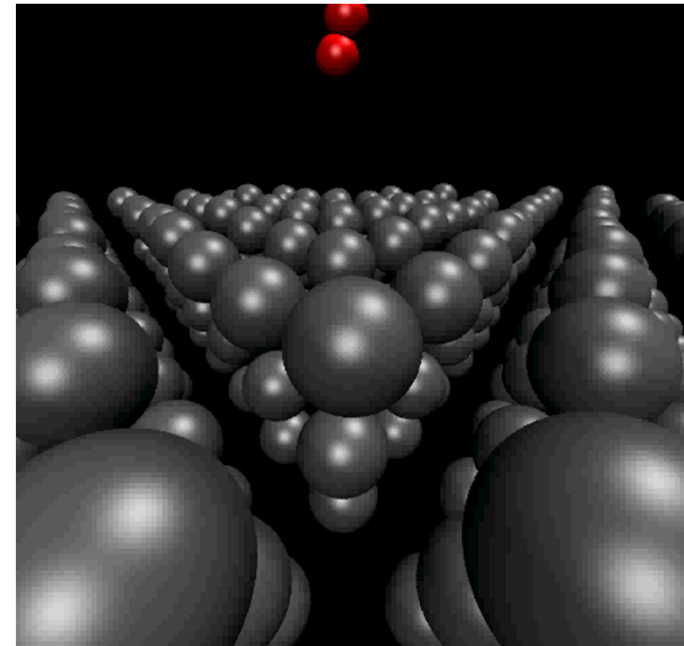
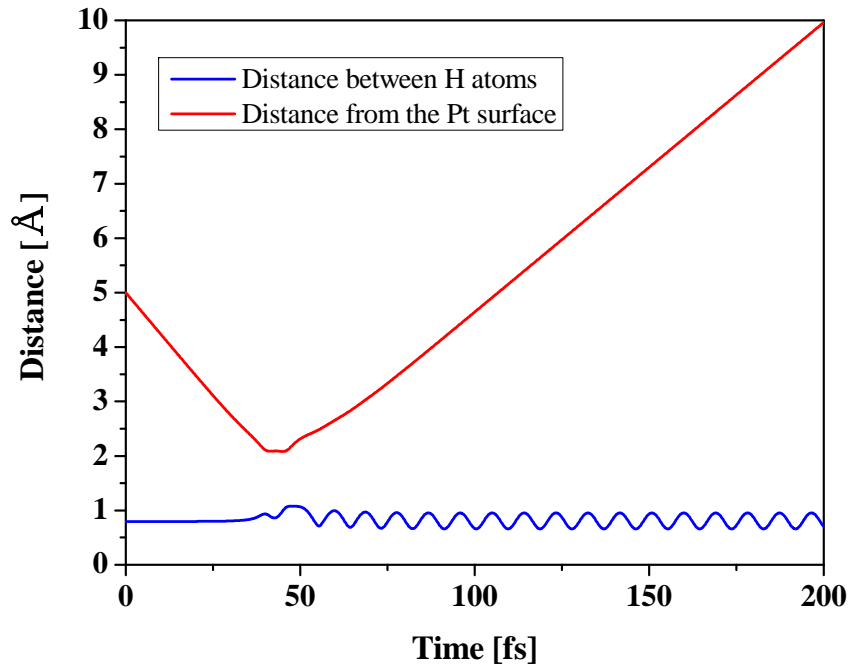


H₂分子の挙動の時間変化(非解離)

Non-dissociation case



解離障壁を乗り越えて化学吸着層に到達



化学吸着層においてPt表面に衝突し、跳ね返って表面から離脱

静的な解析: 化学吸着層に到達しているので、『解離した』と判断される

動的な解析: 化学吸着層に到達してもH原子間距離が大きくなり
Pt表面から離脱したケースは『解離していない』と判断できる



動的効果を考慮することで、実現象を正しく模擬することができる