

一、功能與用途

負責人：莊曜遠 助理教授(分機 7459)

當個人電腦的處理能力日漸增加(包括中央處理器的速度變快、記憶體空間變大和硬碟空間的增加),利用個人電腦叢集(PC cluster)來模擬以往超級電腦才可以計算的化學反應系統已經是件可行的事。本實驗室成立的目的是主要在利用個人電腦叢集系統模擬應用化學中所面臨到的化學反應。我們的研究領域包括：
(1) 利用計算化學程式及化學動力學方法討論基礎化學反應機制與計算其反應速率、(2) 開發新的水溶液反應速率的理論模型及演算法和(3) 建構新一代全時平行運算的個人電腦叢集系統。

二、主要儀器設備

個人電腦叢集系統

