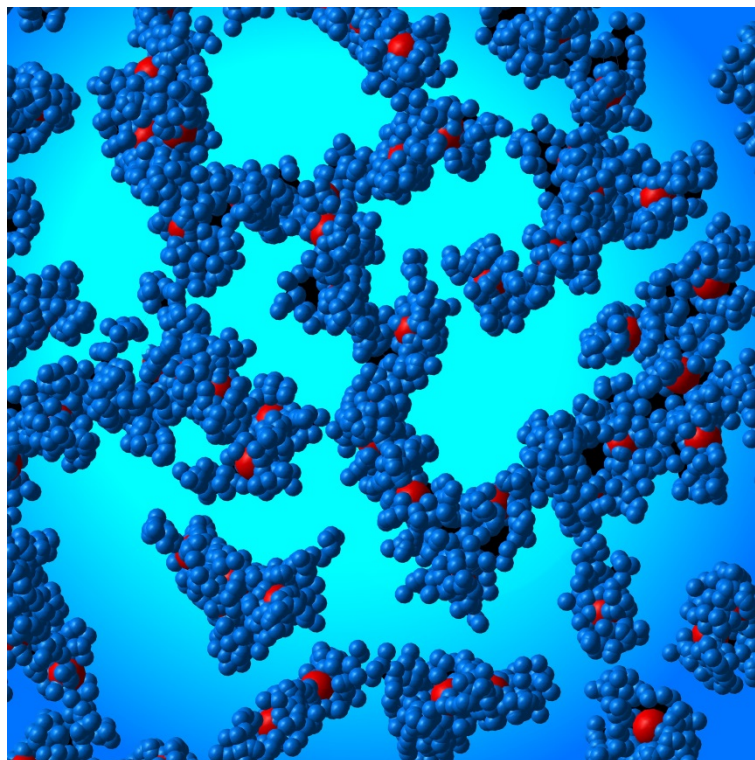


量子分子動力学シミュレーションによる量子多分子凝縮相の動的物性の探究

化学コース 衣川 健一



経路積分セントロイド分子動力学シミュレーションで得られた液体パラ水素中の水素分子の空間分布

水素原子・プロトン・ヘリウム原子のような軽原子を含む低温の物質では原子の核の運動は古典力学では記述できず、波動性・量子性を帯びたものになっている。われわれは量子分子動力学シミュレーションにより、これらの量子多分子系の未踏の物性・現象の解明を進めている。主として経路積分セントロイド分子動力学法を用い、凝縮相の水素、液体ヘリウム4、氷を主な研究対象にしてきている。原子・分子の空間分布・熱力学量のような静的平衡物性以外に、ダイナミクスや輸送係数をも計算し、それら量子多分子系の物性を先験的に解明することが狙いである。また、具体的な系に対する計算の応用のみならず、計算手法の理論的拡張も図っている。

キーワード：量子ダイナミクス、分子動力学シミュレーション、量子多分子系、量子液体・固体、経路積分量子化