

## 平成 23 年度国際インターンシップ派遣報告書

派遣学生：永島 浩樹

所 属：工学研究科 ナノメカニクス専攻

指導教官：徳増 崇 准教授

研究課題：An Evaluation of Thermodynamic Properties of Liquid Hydrogen using Centroid Molecular Dynamics Method

派遣期間：2011/11/14～2012/02/11 (89 日間)

派遣機関：シカゴ大学 (The University of Chicago)

受入教員：Prof. Gregory A Voth

2011 年 11 月 14 日から 2012 年 2 月 11 日の計 89 日の間、アメリカのシカゴにあるシカゴ大学を訪問し、Gregory Voth 教授の指導の下研究活動を行いました。

シカゴはミシガン湖の南西岸に位置し、アメリカではニューヨーク、ロサンゼルスに次ぐ大都市です。緯度は日本の函館と同じくらいで、私の滞在期間中は寒さが大変厳しかったです。シカゴ大学は、ダウントウンから南に車で 20 分ぐらいの所にあります。以前は、シカゴの南側は大変治安が悪かったらしいのですが、近年ではシカゴ大学警察の巡回などもあり、シカゴ大学周辺はダウントウンと変わらないくらい治安は良かったです。私は、the International house at University of Chicago に滞在していたため、世界中の人と交流を持つことができました。週末にはピザパーティーやダンスパーティーなどもあり、研究以外でもシカゴでの生活を十分に満喫する事が出来ました。

Voth 教授のグループは、シカゴ大学の化学科に所属しており、ポスドクが約 20 人、Ph.D の学生が約 10 人もいるグループで、分子シミュレーションの分野では世界有数のグループです。私の滞在期間中でもポスドクの人の数は増えたり減ったりしていたため、正確な人数は把握できませんでした。研究テーマは主に燃料電池内のプロトン輸送の数値解析や、生態分子内の電荷の輸送現象の解析、粗視化モデルの開発などを行っています。その中でも私は、経路積分セントロイド分子動力学(CMD)法を用いた量子分子シミュレーション手法について学んできました。水素は分子量が小さいため、低温においてド・ブロイの熱的波長が位置の不確定性が大きくなります。この影響は液体の様な多体系では顕著に表れるため、液体水素の熱流動解析には量子力学的な手法を用いる必要があります。問題はこの量子効果をどのように再現するかなのですが、CMD 法は Voth 教授によって考案された手法で、多体量子系の時間発展を数値的に再現する事ができます。この手法を用いる事で、分子レベルでの液体水素の熱流動特性解析が可能になります。シカゴ大学では、CMD 法を用いた量子分子シミュレーションプログラムの作成と、CMD 法より得られた流体構造の解析と圧力の計算を行ってきました。どちらの結果も古典的手法とは違う傾向を示しており、実験値とも良い一致を示しました。今後はこのプログラムを用いて、より詳細な液体水素

の熱物性評価を行う事で、量子効果が液体水素の熱流動特性に及ぼす影響とそのメカニズムについての解析を行っていききたいと思います。

三カ月間という短い期間でしたが、世界トップクラスの研究者と机を並べて研究し、議論を交わし、色々な話をできた事は、日本では得難い貴重な体験となりました。科学技術分野の中心であるアメリカでこのような体験をできた事は大変良い刺激となり、研究に対するモチベーションの向上につながりました。これからはこの経験を生かして、自分の研究を発展させていききたいと思います。最後になりますが、貴重な経験の機会を与えてくださった GCOE の皆様、徳増先生、Voth 教授と研究室のメンバーに厚く感謝致します。



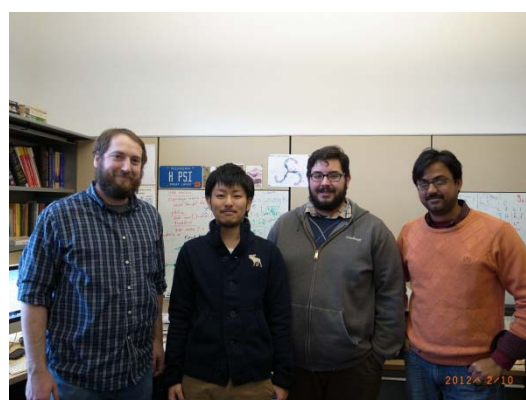
シカゴ大学化学科の建物



滞在した International house



研究会での発表の様子



研究室のメンバー