

## 平成 24 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 Thermal Conductivity of Liquid Hydrogen using Quantum Molecular Dynamics Method

派遣期間：2012/9/25～2012/11/11 ( 48 日間)

派遣機関：コロンビア大学 (Columbia University)

受入教員：Prof. David Reichman

2012 年 9 月 25 日から 2012 年 11 月 11 日の計 48 日の間、アメリカのニューヨークにあるコロンビア大学を訪問し、David Reichman 教授の指導の下研究活動を行った。

ニューヨークはアメリカの東海岸に位置し、アメリカ最大の都市である。コロンビア大学は、セントラルパークの北西に位置し、タイムズスクエアから地下鉄で 15 分ほどという大変便の良い大学であった。私の滞在期間中は、アメリカ大統領選挙もあり、友人とともにテレビで討論会を見たり、選挙について話したりし、アメリカ人の政治に対する意識の高さを感じる事が出来た。また、10 月末には、大型台風サンディが上陸し、数日間全ての交通機関が止まり、コロンビア大学も一週間休講するという事態になり、ニューヨークの自然災害に対する弱さを目の当たりにした。滞在したアパートは、セントラルパークの北東に位置し、この地域は黒人が多い地域であったが、身の危険を感じる事は一度もなく、逆に近所のスーパーやお店の店員さんはとても陽気な人が多く、ニューヨークでの滞在を満喫する事が出来た。

Reichman 教授のグループは、コロンビア大学の化学科に所属しており、ポスドクが 5 人、Ph.D の学生が 4 人というメンバー構成であった。メンバーの人達は様々な国から来ており、とても国際的なグループであった。Reichman 教授のグループは、主に量子系を対象とした分子シミュレーションを行っており、特に、ソフトマテリアル、ガラス系、ナノスケールにおける電荷とエネルギーの輸送に関する理論的研究とシミュレーションを行っている。その中でも私は、量子効果の影響が表れる液体の熱伝導率の計算を行った。具体的には、経路積分セントロイド分子動力学(CMD)法、リングポリマー分子動力学(RPMD)法、最大エントロピー(MET)法を用いて、液体水素の熱伝導率を計算できるプログラムの作成を行った。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長くなり、位置の不確実性が大きくなる。この影響を把握する事は、理学的にも工学的にも重要な問題であるが、理論的難しさから、この様な系を対象とした熱伝導率の計算は行われておらず、量子効果が液体水素の熱伝導率に与える影響は、まだ明らかにされていない。Reichman 教授はこれまで、上述の方法を用いて様々な量子系を対象とした計算を行っており、いくつかの理論

的手法を提案しており、特に MET 法について実績を残している先生である。そこで私は、CMD 法と RPMD 法を用いた熱伝導率計算プログラムの作成と、MET 法について学んできた。今後はこのプログラムを用いて、液体水素の熱伝導率の計算を行う事で、量子効果が液体水素の熱輸送特性に与える影響とそのメカニズムについての解析を行っていく予定である。

一ヶ月半という短い期間ではあったが、様々な国の研究者と机を並べて研究し、議論を交わした事は、日本では得難い貴重な体験となった。また、慣れない海外での生活は大変ではあったが、その分多くの友人ができて、今回の滞在は公私ともにとっても有意義なものとなった。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くとともに、将来今回できた友人と共同研究が出来るように、研究者としても成長していきたいと思う。今回このような貴重な経験を得る事が出来たのは、本プログラムのおかげであり、ここに記して感謝の意を表す。特に GCOE 事務局の皆様、徳増先生、Reichman 教授と研究室のメンバーに厚く感謝する。



化学科の建物



コロンビア大学の様子



Reichman 先生と研究室のメンバー