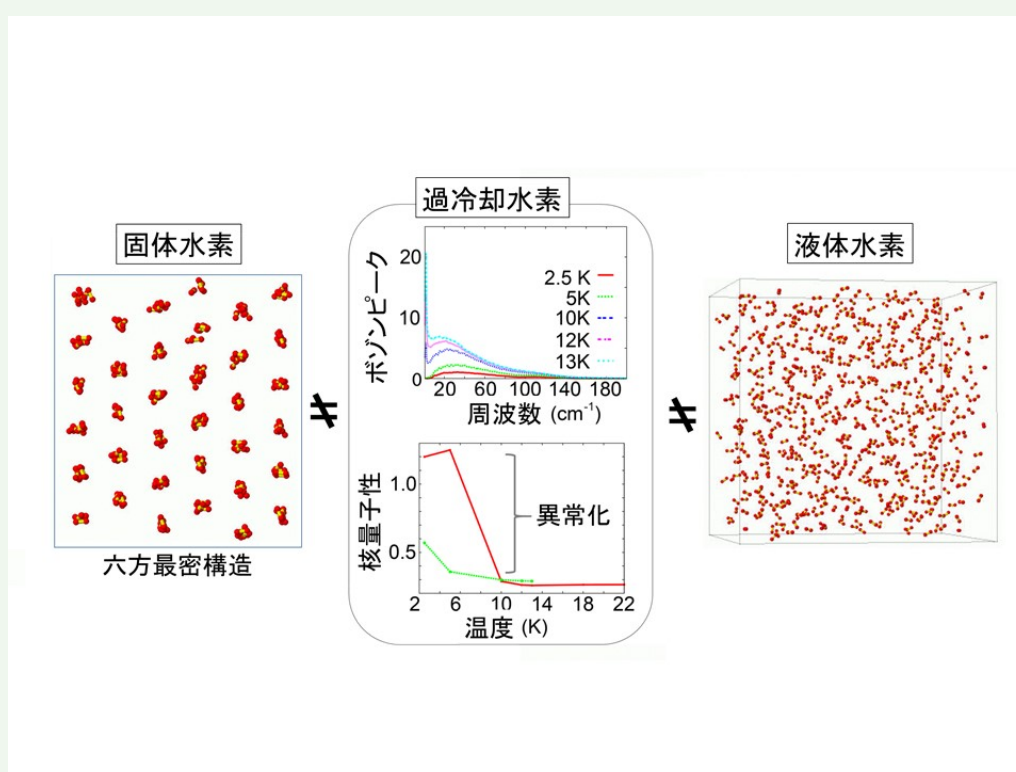


# 核量子性を取り入れた量子分子動力学法の開発と 諸量子凝縮相における未知物性の発見・解明

講師 金賢得 (京都大理学研究科・助教)  
 日時 平成 28 年 6 月 29 日 (水) 午後 4 時 30 分  
 場所 自然科学 5 号館 2 講



## 概要

水素の核量子性は、極低温におけるブロードな動径分布関数や速い拡散などの輸送係数に決定的な影響を与え、固体まで含めた相図全体を大きく変化させる。実際、これまで Centroid 分子動力学法や Ring-Polymer 分子動力学法など経路積分に基づく半量子分子動力学法によって、水や液体水素の非自明な物性を再現する試みが続けられてきた。講演者はこれまで、核と電子を同時に波束化することで、孤立分子から固体に至るまで適用可能な量子分子動力学法の開発を行ってきた。特に、水素核のゼロ点振動や非局在化といった核量子効果を取り入れることで、水素を含んだ量子凝縮相における非自明な動的挙動や未知物性の発見・解明を行っている。本講演では、手法の概略を紹介するとともに、液体水素・固体水素・過冷却水素での主要な結果をダイジェストで報告する。

問合せ先 数物科学類 計算科学コース 計算分子科学研究室 三浦 伸一  
 後援 金沢大学先魁プロジェクト