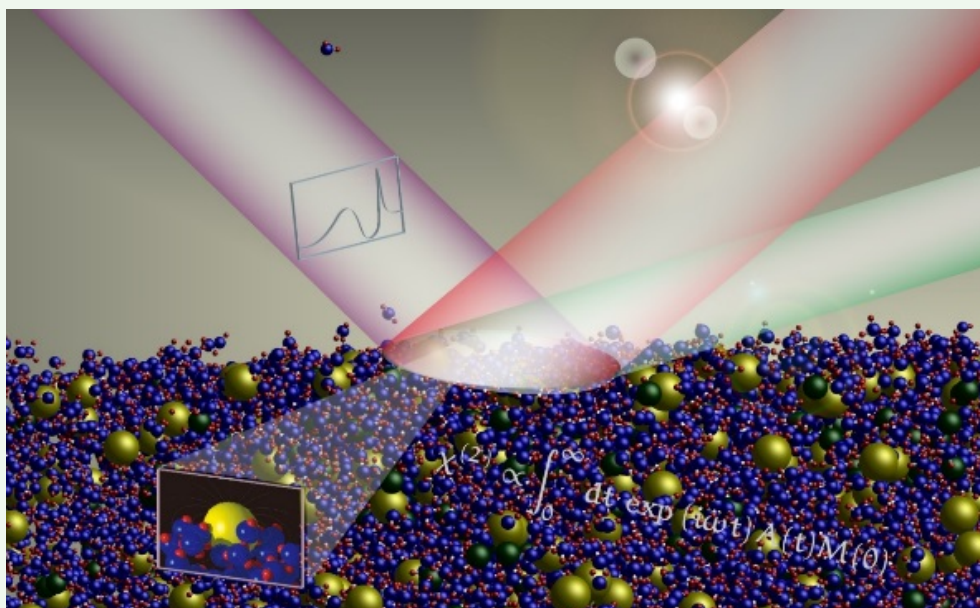


液体界面の構造、分光の分子動力学研究

講師 石山達也 (富山大院理工・准教授)
日時 平成27年6月3日(水) 午後4時30分
場所 自然科学5号館 2講



概要

液体界面は、理工学的に重要な問題が多くある一方、バルクとは異なる性質を示すことや、厚さが分子数層程度の領域を実験的にプローブする手段が限られるため未解明な点が多い。分子シミュレーションは、界面の分子構造や熱力学的特性などを研究する強力な手法のひとつである。界面を扱う分子シミュレーションでは、わずかな分子モデルの違いにより結果が定性的に変わる問題がいくつか報告されている。例えば、水溶液界面でのイオン分布などの界面構造を考える場合、そこでの不均質環境に起因して生じる電子分極効果を適切に取り入れる必要があることがわかってきている。しかし、シミュレーションから得られる結果が妥当なものかを検証するためには、実験によるサポートが不可欠である。近年、界面敏感な実験として発展した振動分光法(和周波発生分光法)が広く行われるようになった。実験では界面特有のスペクトルが得られるが、その解釈にはしばしば曖昧さが伴う。これは、実験では界面での複数の構造に起因するスペクトルの成分が全て重なった結果として全体の1つのスペクトルが観測され、そのスペクトルを一意的に分解することが難しいからである。上記の問題に対し、我々は分子シミュレーションにより界面構造とともに振動スペクトルを第一原理的に計算することにより様々な界面構造の問題を明らかにしてきた。本講演では、最近の我々の研究の進展と共に、界面での分子ダイナミクスを扱う新しい方法の紹介などを行う。

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