



量子統計力学的分子動力学シミュレーションの手法による 量子凝縮系の物性の先験的解明および同計算技法の開発

自然科学系・化学領域

衣川 健一

教授

KINUGAWA Kenichi

博士(工学)(京都大学)

■研究キーワード

ヘリウム, 水素, 核量子効果, 低温物性, 量子固体, 量子液体, 経路積分, 分子動力学, シミュレーション, ポリアモルフィズム

■主な所属学会

日本化学会, 日本物理学会, 分子シミュレーション研究会, 分子科学会, アメリカ化学会, アメリカ物理学会

■研究者総覧

<https://koto10.nara-wu.ac.jp/profile/ja.cef243d88a4e6221520e17560c007669.html>



研究者総覧

研究概要

量子凝縮系を対象にした経路積分分子動力学シミュレーションによる研究を行っています。ヘリウム・水素のような質量の小さい原子・分子から成る低温の液体・固体は、原子の波動性(核量子効果)によって、古典的対応状態原理から逸脱した熱力学挙動を示します。中でも、ヘリウム4は、大気圧程度の圧力のもとでは、絶対零度まで凍らず、液体のまま存在しています。ヘリウム4の液相が2つ存在することは、100年前から知られています。大気圧下では、2.2Kの上下の温度で、それぞれ、常流動液体(通常液体, He-I)と超流動液体(超流体, He-II)の状態が存在します。このようなヘリウム4の物性の研究は専ら物理学の独壇場で、化学の分野ではあまり話題にはならなかったようです。その理由は、①原子が核量子効果を帯びていること、②ヘリウム4原子はボーズ統計に従う、ために取り扱いが”難しかった”ことが考えられます。このような液体ヘリウム4・液体水素などの未知の物性を、計算手法を開発しながら、シミュレーションの手法で調べています。

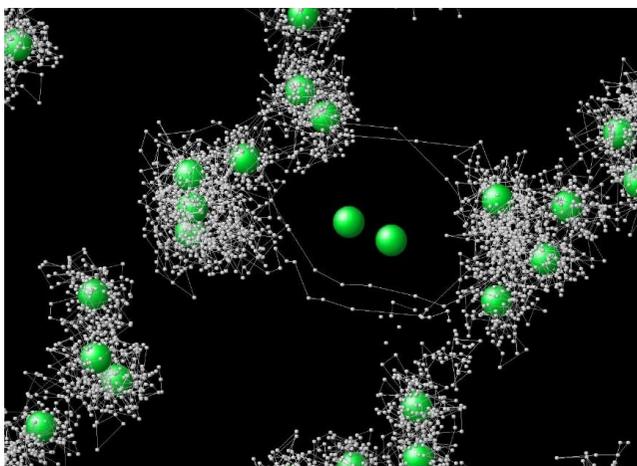


図. ヘリウム4の高圧のガラス状態中に存在する原子トンネリングの配置。

アピールポイント

先駆的な計算科学的手法による量子凝縮系の物性の解明

1. 液体水素の集団運動の先験的解明: 凝縮系の原子の集団運動・時空相関は、実験的には中性子非弾性散乱で調べることができませんが、水素系では軽水素核からの非干渉性散乱が強く出てしまうために、よく見ることはできません。私たちは経路積分セントロイド分子動力学(CMD)シミュレーションによって、1998年に動的構造因子を予言しました。その翌年に、洗練された中性子非弾性散乱実験が欧州で行われ、私たちの予言の通りの結果が報告されました。

2. 液体水素・常流動液体ヘリウム4の輸送係数の解明: 液体水素や常流動液体ヘリウム4のような「量子液体」の動的物性(ダイナミクス)を計算科学的に求めることは、理論化学の上での一大問題でした。私たちはCMDシミュレーションという先端的な手法を発展させ、これらの量子液体の粘性係数、熱伝導率、拡散係数の温度依存性を見積り、実測値とほぼ一致する結果を得ました。計算科学的にこれらの物性を予測するスキームが確立しました。

3. ヘリウム4の液体・ガラスの量子ポリアモルフィズム, 超臨界流体の研究: これら一連のヘリウム4の研究で、ボーズ統計相関のない区別可能なヘリウム4において、2つの異なる液体状態、2つの異なるガラス状態が存在すること(量子ポリアモルフィズム)を発見しました。この成果は、量子液体の挙動に関する従来からの理解を一新するものです。また、ヘリウム4の超臨界流体にも2状態が存在することも明らかにしました。

これらの私たちの研究は、低温物理学、物質科学、量子統計力学などの分野で潜在的な意味を持っています。低温のヘリウム4・水素の挙動を理解することは、極低温工学、超伝導工学、量子コンピューティングの進歩、新材料の開発にも役立つ可能性があります。