

2025年度第13回 数理物質系学際セミナー (全14回)

2026年3月2日(月)
11:35開始 (35分間)

筑波大学
総合研究棟B棟112号室
(zoomハイブリッド配信あり)

参加費無料

数理物質系および関連
センターの構成員（学生
含む）は申し込み不要
です。

そのほかの方は、事前申
し込みが必要です。



事前申し込み用URL



講演者：八木 清 教授（化学域）

量子化学計算と分子動力学計算の融合が拓く高分子シミュレーションの未来



近年の計算機性能と理論的手法の向上により、分子系に対するシミュレーション研究が盛んになっている。我々のグループでは、電子Schrödinger方程式に基づき分子の電子状態を求める量子化学(QM)計算と、分子の運動と時間発展を記述する分子動力学(MD)計算において、新しい理論や計算手法を開発している。開発した方法を用いて、生命科学や環境・エネルギー問題に資する分子系に対する計算を展開している。本講演では、高分子材料、特にアニオン交換膜(AEM)に対する研究成果を紹介する。AEMは、OH-などのアニオン種を透過する電解質膜で、燃料電池や水電解応用が期待されている材料である。その化学構造は、剛直な主鎖と柔らかなアルキル側鎖で構成され、さらにアルキル基の先端についたカチオンが水分子とともにミクロ相分離を誘発し、アニオン種の伝導経路を形成している。すなわち、AEMの伝導性能向上には、分子レベルの相互作用に対する理解が必要不可欠である。最近、我々はAEMの全原子モデルを作成し、MD計算を実行することで、AEM内アニオン種の動態を調べた[ACS Appl. Polym. Mater. 7, 13971-13981 (2025)]。その内容を紹介とともに、さらなる進展について発表する。

今年度からは、ランチョンセミナー形式で開催します。軽食を取りながら、リラックスした雰囲気で研究交流を図ることを目指しています。お茶やソフトドリンクをご用意していますので、お弁当などはご自身でご持参ください。研究内容に限らず、ちょっとした話題でも構いません。気軽に参加できるオープンな雰囲気を大切にしていますので、どうぞお気軽に立ち寄りください。

