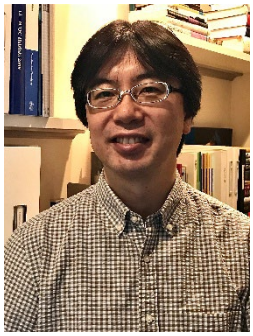
Frontier Chemistry Center フロンティア化学教育研究センター 講演会

演 題：**核量子効果を考慮した第一原理計算**

講 師：**志賀 基之 先生**
日本原子力研究開発機構システム
計算科学センター



日 時：2026 年 11 月 27 日（金）14:30~16:00

場 所：理学部 5 号館 2-03 室（大講堂）

主 催：総合化学院

共 催：FCC、SMatS

要 旨：水素などの軽元素を含む物質では、原子核の零点振動やトンネル効果といった核量子効果が、物質の構造、化学反応、拡散などに重要な役割を果たしている。しかし、通常の分子動力学法では原子核を古典的に扱うため、これらの効果を十分に記述できない。核量子効果を取り入れる手法として、経路積分分子動力学法がある。本講演では、その基本原理と計算手法を概説し、水や水溶液の水素結合構造、金属中水素の拡散や振動ダイナミクスなどへの応用例を紹介する。特に、核量子効果が物質の構造や物性の温度依存性、同位体効果に及ぼす影響について、第一原理計算による予測と実験との比較を交えて議論する。また、機械学習力場を活用した大規模・長時間シミュレーションへの展開についても述べる。

連絡先：理学研究院化学部門　武次徹也（内線：３５３５）

SMatS 北海道大学 スマート物質科学を拓くアンビシャスプログラム