

水圏における水分子の動的様態を評価する シミュレーション技術の開発とその応用



金 鋼
大阪大学
准教授

高分子中に水分子と水素結合する官能基が存在すれば局所的にネットワークが強く張られることから、いかに多くの水素結合ができるかが水圏機能材料の性能に直結するはずでず。水分子は持っている水素結合の状態により特徴的な時間スケールが大きく異なります。そこで分子動力学シミュレーションによって、高分子の影響を受けた

水分子が持つ水素結合の結合先・本数の起こり得る全ての状態とそのダイナミクスを詳細に解析し、水圏における水分子の動的様態の全貌を明らかにすることを目指します。

