

# 第 247 回

## 物質科学セミナー

総合科学プロジェクト「要素-システム研究」セミナーとの共催

題名：構造不規則系内の原子の挙動とマクロな物性  
～ 光捕集性有機分子、地球惑星物質を例として～

講師：大村 訓史 氏

(広島工業大学 物性物理学研究センター /  
工学部 環境土木工学科 准教授)

日時：2018 年 1 月 19 日 (金) 16:30 – 18:00

場所：総合科学部 J303

### 講演要旨：

本講演では、計算機シミュレーションの手法の一つである第一原理分子動力学法を応用した例を紹介する。第一原理分子動力学シミュレーションは、電子状態をモニターしながら原子 1 つ 1 つの動きを直接追うことができ、物質の特性を原子・電子レベルのミクロな視点から定量的に調べることが出来る。このため、この手法は、いまや物性科学における基礎研究のみならず、地球惑星科学や材料工学などの幅広い分野に応用されている。

まず 1 つ目の例として、有機薄膜太陽電池や人工網膜の材料としての応用が期待されている光捕集性有機分子の結果を紹介する。このような目的を達成するためには、光捕集性有機分子の光吸収特性をコントロールすることが求められている。その方法の一つとして期待されているのが置換ドーピングである。我々は、第一原理分子動力学シミュレーションを用いて、置換ドーピングによる有機分子の光吸収特性の変化やその他の性質の変化を調べている。本講演では、シミュレーションが明らかにした置換ドーピングによる光捕集性分子の物性変化を原子や電子のダイナミクスと絡めて紹介する予定である。

次の例として、地球惑星科学的に重要な高温、高圧下の液体物質（玄武岩質メルトや液体鉄ニッケル合金）に応用した結果を紹介する。地球内部には、固体だけでなく、外核を構成する液体鉄や部分融解としての存在が示唆される玄武岩質メルト（マグマ）などの液体物質が存在している。我々は第一原理分子動力学シミュレーションを駆使して、このような物質の高圧下における物性を原子レベルのミクロな視点から調べている。本講演では、シミュレーションにより明らかにされた液体物質内の原子の挙動とマクロな物性との関連性を紹介する予定である。

5 研究科共同セミナーの認定科目です