
2019 年度夏学期 第 6 回 駒場物性セミナー

積分方程式理論を用いた溶媒和の理解

講師 横川 大輔 氏 (東大総合文化)

日時 2019 年 6 月 28 日(金) 午後 4 時 50 分

場所 16 号館 827

Abstract:

溶液中での化学現象を理論的に解析する手法は、これまでにいくつも提案されている。最も有名な手法として、各分子を構成する原子個々の運動方程式を解く分子動力学法が挙げられる。この手法は、用いる式のシンプルさから世界中で様々な系に対して用いられている。これとは別に、原子個々の位置・速度情報を得るのではなく、分子間の距離に関する分布に着目する積分方程式理論というものがある。この積分方程式理論では、統計力学に基づき導かれた連立方程式を解くことにより分布を解析的に得る。そのため積分方程式理論は、溶媒和自由エネルギーなどの熱力学量を解析的に計算することができ、分子動力学法で抱えるサンプリングの問題を克服できる可能性を秘めている。

本セミナーでは、積分方程式理論の中で最も有名な Reference Interaction Site Model(RISM)[1]について紹介し、RISM 法の長所と短所について説明する。さらに、その短所を克服できる可能性について、過去の研究[2]を紹介しながら説明する。

[1] Hansen, J. P.; McDonald, I. R. Theory of Simple Liquids, 2nd ed.; Academic: London, 1986.

[2] Yokogawa, D. Toward Accurate Solvation Free Energy Calculation with the Reference Interaction Site Model Self-Consistent Field: Introduction of a New Bridge Function. *J. Chem. Theory Comput.* **2018**, 14, 3272–3278.

○今後の予定：

7 月 5 日	一ノ倉 聖 氏 (東工大 理学院)
7 月 19 日	佐藤 琢哉 氏 (九州大 理学研究院)
7 月 24 日【水】	小林 徹也 氏 (東大生産研)
8 月 7 日【水】	越野 幹人 氏 (東北大)

○物性セミナーのページ 「駒場物性セミナー」で検索！

物性セミナー世話人：加藤雄介 塩見雄毅 福島孝治 前田京剛 簗口友紀