

凍らない水において多数の水分子が協奏して引き起こされる水素結合ダイナミクス



金 鋼

大阪大学・准教授

「水圏機能材料」において高分子と強く相互作用し凍らない水として機能する水分子の運動性が重要となります。そこで、多数の水分子が協奏することによって水素結合が破断・結合することを正確に理解することが鍵となります。本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて水素結合ネットワークを通じた

水圏機能材料の学理深化を目指します。特に、マルコフ状態モデルにより水素結合破断の遷移過程を抽出し、水分子の協調的運動を特徴付ける理論的技術を確立します。

