

## MERIT 長期海外派遣報告書

工学系研究科 マテリアル工学専攻 博士課程 2年  
澁田研究室 福原 智  
派遣期間：2019年9月30日～2019年11月27日

2019年9月末より2カ月間、ベルギーの都市アントワープにある University of Antwerp の PLASMANT という研究グループに滞在した。PLASMANT は名前の通りプラズマを用いて物質を合成する研究を主軸にするグループであるが、実験だけでなくコンピュータシミュレーションも用いて効率的な物質合成に取り組んでいる。今回は、原子レベルのシミュレーションを率いる Erik Neyts 准教授にお世話になった。

海外で生活をするると日本との違いがいくつか出てくるが、私がベルギーの生活の中で日本と最も違いを感じたのは「水」である。ベルギーも日本と同様に水道水が飲めるが、どうも味が異なる。シャワーをするときも普段髪の毛など気にしない私でもパリパリになるのが気になった。これらの違和感の水の「硬度」に由来するものである。硬度とは水中に溶解するカルシウムイオンやマグネシウムイオンの濃度であり、ベルギーは日本に比べて水が「硬い」。硬度はほかにもたとえば洗濯に影響し、塩（カルキ）が詰まらないようにするために専用の洗剤が必要となる。もちろん水は料理にも影響する。ベルギーは外食が高く、たとえばハンバーガーとフライドポテト（実はベルギー発祥）とビールを頼むと 2000 円程度となるので頻繁に自炊もしたが、お米を炊くにも硬水で炊くより購入した軟水で炊くほうがうまく炊けた。水の硬度には「平衡状態」と「速度論」の二つが関わってくる。平衡状態とはビーカーの水の中に石を置いて、何十年何百年とそのままにした場合に最終的に至るイオン濃度である。要するに、溶ける最大の濃度である。平衡状態までカルシウムやマグネシウムが溶けた水は飲めたものではないので、水道水の場合重要なのは「速度論」である。これは水と接しているときの「単位時間あたりに溶け出す量」と「水に接している時間」が関係する。ヨーロッパでは日本と比べて溶けやすい岩石が多いか、雨が降ってから浄水場にたどりつくまでに時間がかかるのであろう。

さて、アントワープではこの「平衡状態」と「速度論」についての研究をした。対象とするのは金属中に溶け込んだ炭素原子が炭素同士で結合を形成する反応過程である。これは、カーボンナノチューブという材料が形成されるとき初期

段階の反応となる。分子動力学計算というシミュレーションを用いて、反応の平衡状態と速度論を議論するのであるが、分子動力学で扱える時間範囲はナノ秒オーダーと短く反応を観察するには足りない。そこで、**metadynamics** という反応の加速手法を用いた。今回アントワープ大学を滞在先として選んだのは Erik 先生が分子動力学の専門家であり指導教員の澁田先生と昔より交流があるのに加え、ポストクの **Kristof** が分子動力学の加速手法についての専門家であるからである。2 カ月間という短期間であったが、充実した研究生活をおくることができた。2 カ月の滞在先に先立って Erik 先生、**Kristof** と議論しながら開発した新たな分子動力学加速手法については論文投稿中であり、2 カ月間の滞在先での成果についても現在論文準備中である。

### 謝辞

滞在先を受け入れてくださった Erik Neyts 准教授、日々ディスカッションをしてくれた **Kristof Bal** 博士、PLASMANT グループメンバーに感謝いたします。また、金銭面を含め本派遣に関し多大なサポートをいただいた澁田靖准教授に深く御礼申し上げます。現在リーディング大学院予算削減により MERIT プログラムからは長期海外派遣に対して経済的サポートが一切得られない状況となっておりますが、今後 MERIT プログラムからの支援が復活し、より多くの学生が海外研究を体験できるようになることを願います。



図 1. 研究室の様子。奥からアントワープの修士学生、短期でウズベキスタンから研究しにきている教員、そして私。グループには様々な国籍のメンバーがいる。



図 2. グループメンバーとの昼食。二カ月間昼食は毎日この大学食堂で食べた。右から 2 番目が **Kristof**。