

P13) 分子動力学法を用いた水の誘電緩和曲線の再現

東海大理物理¹・東海大院理²・志村朋也¹・八木原晋¹・新屋敷直木¹・喜多理王¹・杉本博紀¹・川口翼¹

古旗華保莉¹・宮本陽介²・庄司幸平²

e-mail: 6bsp3210@cc.u-tokai.ac.jp 電話: 0463-58-1211

[背景] 分子動力学 (MD) 法は分子シミュレーションの一種で、液体構造やタンパク質、DNA などの生体高分子の分野では幅広く研究に用いられている。これらの複雑系物質の構造や物性を理解するためには、分子の動的挙動の知見を得ることが重要である。特に水系物質では、純水や水混合系中の水構造の動的挙動の解析から、様々な性質の分子機構を理解することができる。また水構造の観測・解析技術として、1970 年代に R. H. Cole や S. Mashimo らによってリファインされた TDR (Time Domain Reflectometry) 法では、分子の分極に由来するマイクロ波誘電緩和による解析が行われてきた。本研究では、R. H. Cole の緩和理論に基づき、水分子を用いた MD シミュレーションの結果から双極子モーメント間の自己・相互相関関数を表現して誘電緩和曲線を求める。得られた緩和曲線と実験に基づく文献値を比較し、相補的に利用できるか検討する。

[実験] MD シミュレーションには Discovery Studio

2017R2 (BIOVIA, 東海大学総合情報センター) を用いた。

シミュレーションモデルには、水分子: 2171 個, 力場:

CHARMm, シミュレーション時間 100ps, 時間ステップ 0.1ps,

アンサンブル: NPT, 温度: 300K, 水分子のモデル: TIP3P の

条件で行った。

[結果・考察] シミュレーションで得られた水分子の双極子モーメント間の自己・相互相関関数は、指数関数的な減衰関数で近似できた 0 から 10ps の範囲をラプラス・フーリエ変換して求めた誘電緩和曲線を Fig. 1 に示した。誘電損失のピーク周波数と緩和時間は 60GHz/2.65ps だった。一方緩和時間の実験値は^[2]8.27ps であった。モデル減衰関数のラプラス・フーリエ変換による特徴づけから、緩和曲線の高周波側に見られる周期的な挙動はラプラス・フーリエ変換の際、100 ステップの時間分解

能と積分範囲の打ち切り誤差が反映されていると考えられる。ラプラス・フーリエ変換の数値計算を分子運動スケールに対して十分長い時間積分の範囲で実行することで、観測された緩和過程のより詳細な分子間相互作用や分子機構の議論が可能になる。したがって、換算可能な緩和時間や強度は相対的な変化を、また緩和時間分布パラメータは絶対値を議論すべきことが分かった。

[参考文献]

[1] Robert. H. Cole, Evaluation of Dielectric Behavior by Time Domain Spectroscopy, The Journal of Physical Chemistry, Vol, 79, No.14, 1459 – 1469, 1991, 1945

[2] J. Barthel and R. Buchner, High frequency permittivity and its use in the investigation of solution properties, Pure & App. Chem., Vol. 63, No. 10, pp. 1473-1482, 1991

Dielectric relaxation curves for water represented by molecular dynamics simulation

Tomoya SHIMURA¹, Shin YAGIHARA¹, Naoki SHINYASHIKI¹, Rio KITA¹, Tsubasa KAWAGUCHI, Hironori SUGIMOTO¹, Kahori FURUHATA², Kohei SHOJI¹, Yusuke MIYAMOTO² (Department of Physics, Tokai University, 4-1-1 Kitakaname, Hiratsuka, Kanagawa, Japan ²Graduate School of Science, Tokai University, Hiratsuka, Kanagawa, Japan)

Tel: +81-0463-58-1211, E-mail: 6bsp3210@cc.u-tokai.ac.jp

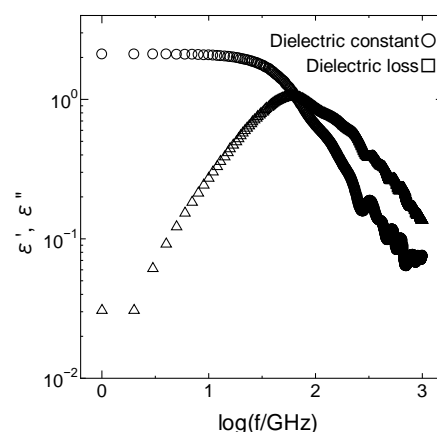


Fig.1. Dielectric relaxation curves for water obtained from MD simulation. Auto-and cross-correlations were setup in time region from 0ps to 10ps with 0.1ps resolution..