

分子動力学法による水の誘電緩和曲線の再現

八木原研究室 6BSP3210 志村朋也

【背景・目的】

本研究室では、水素結合について分子動力学(Molecular dynamics)法を用いて解析してきた。また、広帯域誘電分光法を用いた水構造の緩和現象の測定から、水素結合密度が分子の動的挙動に関連していることがわかってきた。本研究では、分子動力学法シミュレーションの結果から誘電緩和曲線を求め、測定結果と相対的に利用できるか検討する。そのために、水分子を用いた分子動力学シミュレーションの結果得られた双極子モーメント間の時間相関を用いた Cole の緩和理論から緩和曲線を求める。

【実験方法】

シミュレーションには東海大学総合情報センターのダイキン工業社製の discovery studio 2017 R2(以降 DS)を用いた。シミュレーション条件は；試料：水分子 10 個, 周辺溶媒：水, シミュレーション時間：10ps, 計算ステップ：0.002ps, サンプル間隔 0.1ps, NPT アンサンブル（分子数一定, 圧力 1 atm, 温度 300K）, 周期境界条件におけるセルの形状：立方体, 力場：DC CHARMM とした。Visual molecular dynamics 1.9.3(以降 VMD)を用いて、各分子のシミュレーションから得られた位置座標から、双極子モーメントを求め、双極子モーメント間の各種相関関数を求めた。減衰を示す時間相関関数からフーリエ・ラプラス変換を用いて緩和曲線を求めた。

【結果】

シミュレーション結果より図 1 のような時間相関関数が得られた。単一指関数関数で減衰関数を $f(t) = \exp(-t/\tau)$ と表したとき、 $\tau = 0.5\text{ps}$ とすれば、0 ps から 3.5ps までの範囲において、ある程度の一致が見られた。しかし、ゼロ



図 1. 時間相関関数

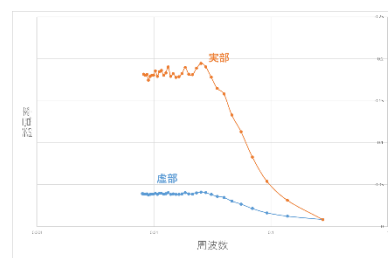


図 2. 得られた緩和曲

まで減衰した 3.5ps 以降は大きく乱れていった。その時間相関関数を 0 ps から 3.5ps までの範囲でフーリエ・ラプラス変換を用いると図 2 が得られた。実部の緩和曲線は得られたが、虚部の緩和曲線は得られなかった。

【考察】

図 2 の結果は、計算過程の理解も兼ねて MD、VMD 以外の計算に、Excel を用いたため、人的な入力エラーがあったためだと考えられる。このエラーは今後検証していく。

【参考文献】

- [1] コンピュータシミュレーションの基礎 出版社：化学同人 岡崎進, 吉井範行著 2000/8/1
- [2] Evaluation of Dielectric Behavior by Time Domain Spectroscopy. The Journal of Physical Chemistry, Vol.79, No14, Robert H.Cole 1945
- [3] Can molecular dynamics help in understanding dielectric phenomena?, Robert Olmi and Marco Bittelli 2017
- [4] Dielectric Properties and Molecular Behaviour, Van Nostrand Reinhold inc.U.S. 1969/7/1
- [5] 分子動力学法による水溶液中の水分子ダイナミクスと水素結合ネットワーク, 宮本陽介, 東海大学修士論文
- [6] 尿素水溶液測定.pptx, 古旗華保莉 2018,
- [7] 自己相関・相互相関まとめ_20161008.pptx, 川口翼 私信 2016
- [8] <http://pc-chem-basics.blog.jp/archives/1266369.html> (閲覧日：2019/6/25)