分子動力学法による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、分子間の水素結合について、分子動力学(Molecular Dynamics)法を用いた解析を行ってきた[1].一方、広帯域誘電分光法(BDS)を用いた水構造の緩和現象の測定から、水素結合の付け替えの速度過程が分子の動的挙動を支配する分子機構だと判ってきた.

本研究は、MD法による水分子のシミュレーション結果から得られる双極子モーメント間の自己・相互相関関数を用いて、誘電分光法の基本理論[2]に基づいて誘電緩和曲線を求める.また、誘電緩和曲線から得られる物理量と実験によって得られた文献値[3][4]を比較し、相補的に取り扱えるかどうかを検討する.

【実験方法】

１. シミュレーションツールにはDiscovery studio 2017 R2 (Biovia ,東海大学総合情報センター) (以降DS)を用いた。シミュレーション条件を以降に示す。試料: 水分子(962個,2237個), 水モデル: TIP3P, 力場：CHARMm,, 温度300K, NPTアンサンブル.その後、以降の条件で座標のサンプリングを行った.サンプリング(NAMD)時間: 1ns, サンプリング間隔1ps,アンサンブル: NPT

２．シミュレーションから得られた全分子の位置座標から各分子の双極子モーメントを求め、時間応答関数として双極子モーメント間の方向相関関数を求めた。その後、時間応答関数をフーリエ変換し、緩和曲線を求めた.

【結果】

　シミュレーション結果より得られた緩和時間に対する活性化エネルギーのグラフを図1に示す.水の凝固点が実際の温度(237.15K)よりも低いことが判った.

　この結果による温度差を考慮し、シミュレーションを行った結果から得られた緩和曲線を図2に示す.

【考察】

【参考文献】

[1]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, 修士論文, 2015

[2] Evaluation of Dielectric Behavior by Time Domain Spectroscopy, The Journal of Phys. Chem, Vol, 79, No, 14,

R. H. Cole, 1945

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

[5] ] Hierarchical viscosity of aqueous solution of tilapia scale collagen investigated via dielectric spectroscopy between

500MHz and 2.5 THz,, H. Kawamata, S. Kuwaki, T. Mishina, T. Ikoma, J. Tanaka and R. Nozaki, Scientific Reports volume 7, Article number: 45398 (2017)

[4] Can molecular dynamics help in understanding dielectric phenomena?, Robert Olmi and Marco Bittelli , 2017

[5]TIP3Pの密度の論文

[6]