

応答核を用いた水分子の分極ポテンシャル関数の開発と
 クラスターの構造探索への適応

○山口 高正¹, 麻田 俊雄^{1,2}, 小関 史朗^{1,2}

¹ 阪府大院理, ² RIMED

t_yamaguchi@c.s.osakafu-u.ac.jp

【序論】分子集合体の安定構造を探索するために、分子力学(MM)計算を用いてアンサンブルの候補を作成し、量子力学(QM)計算により信頼性の高いアンサンブルに再構築する方法が Muller らによって提案された^[1]。しかしながら、MM 計算は分子の分極を高い信頼性で見積もることができないため、候補となるアンサンブルの信頼性が極めて低くなり、効率的にエネルギー面上の探索ができない。そこで、分極を効率的に表すことができる電荷原子双極子応答核^[2]を用いて分極ポテンシャル関数を開発し、クラスターの構造探索に適応した。

【方法】応答核を用いることで原子上の静電ポテンシャルの変化量と電場の変化量から分子の誘起分極と原子の誘起双極子モーメントを線形近似で表すことができる。

$$\Delta Q_a = \sum_b^{atoms} \left(\frac{\partial Q_a}{\partial v_b} \right) \Delta v_b, \quad \Delta \mu_a^r = \sum_b^{atoms} \sum_{s \in x,y,z} \left(\frac{\partial \mu_a^r}{\partial E_b^s} \right) \Delta E_b^s \quad (1)$$

ここで、 $\partial Q_a / \partial v_b$, $\partial \mu_a^r / \partial E_b^s$ が応答核であり、 ΔQ_a と $\Delta \mu_a^r$ はそれぞれ原子 a の誘起電荷と誘起双極子モーメントを表し、 Δv_b と ΔE_b^s はそれぞれ原子 b の静電ポテンシャルと電場の変化量を表している。また、 r, s は x, y, z 成分を表しており、得られる ΔQ_a と $\Delta \mu_a^r$ を用いることで分極エネルギーを得ることができる。一方、水分子の分極ポテンシャル関数における静電相互作用エネルギーと van der Waals 相互作用エネルギーは、二量体の異なる配向について北浦と諸熊によって提案されたエネルギー分割法^[3]により得られる相互作用エネルギーの成分を再現するように決定した。ただし、酸素原子の電荷は角 HOH の 2 等分線上に置き、van der Waals 項としてバッキンガム型のポテンシャル関数を用いた。

【結果】水分子二量体の分子間相互作用エネルギー E について、QM 計算の結果と新たに開発したポテンシャル(○), MCY ポテンシャル(◇), TIP3P ポテンシャル(△)を用いた場合に得られた結果を図 1 に示した。なお、QM 計算は、エネルギー分割法を適応できる HF/6-311+G(d,p)を用いて行った。これらの結果から、高速かつ良好に QM 計算の結果を再現できることが明らかになり、応答核を用いた信頼性の高い分極ポテンシャル関数の作成に成功したと言える。また、水分子二量体と五量体における構造探索の効率化にも成功しており、その詳細は当日報告する。

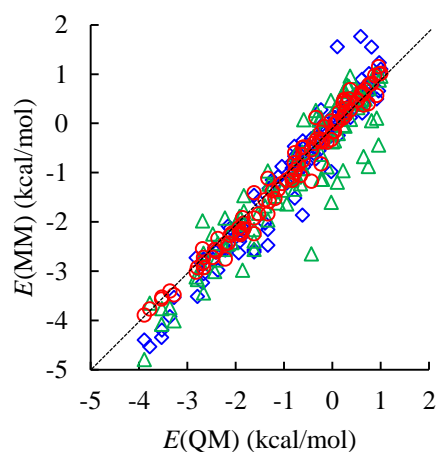


図 1 二量体における QM 計算との比較.

[1] R. P. Muller and A. Warshel, *J. Phys. Chem.* **1995**, 99, 17516.

[2] T. Asada, K. Ando, K. Sakurai, S. Koseki and M. Nagaoka, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 26955.

[3] K. Kitaura and K. Morokuma, *Int. J. Quantum Chem.* **1976**, 10, 325.