

1P46

s II クラスレート構造をとる水分子の水素原子の初期位置を与える方法

○小井手一晴¹ 金政浩² 中野正博² 野田信雄¹ 根本哲也¹ 伊藤安海¹ 松浦弘幸¹
(国立長寿医療センター研究所¹ 産業医科大学²)

E-mail: koide@nils.go.jp

水分子中の酸素原子は、水素原子に比べ重いのでほとんど動かない。X線散乱実験によると水分子が集まってクラスターを作るとき水素分子は近接する酸素原子間に確率的に半分のもので2つ入っている。分子動力学のシミュレーションをするとき、初期値を与える必要がある。この初期値に酸素原子間の2つのうちひとつを選ぶ必要がある。しかし、正しく選ばなければ、ひとつの酸素原子に2つ以外の水素原子を持つような状態を初期値に選んでしまう。これは好ましくない。収束に必要な時間も長くなるが、それ以上に間違ったところに収束する可能性もある。そこで、体系的にそのひとつを選ぶ方法をここに示す。この方法は、原理的に水素結合で結びつく全ての分子集団の構造に有効である。一つの酸素原子から見ると、近接する酸素原子は4つある。このうち2つの方向に自らの持つ2つの水素原子を向け、残り二つの酸素原子からは、それぞれの水素原子1つを向けられている。この向きを矢印と見なし、水分子集団でこの矢印に沿って線を引き続ける。たとえば、セルユニットの境界条件を用いると、比較的小規模ですむ。最初は、適当な酸素原子を選び、また2つの方向を向いているので、これも一方を適当に選ぶ。なるべく全体を一度に通れるように続ける。すべての酸素原子を2度ずつ通ることになる。スター地点に2度目に戻ると線が引けないので、一旦終了となる。ただし、まだ2度の通過を経験していない酸素原子があればそこを新たなスタート地点として同じことを繰り返す。全ての酸素原子を2度通ると、本当に終了となる。これを“一筆書き法”と名づける。この場合酸素原子は偶点に対応しているので、うまく選べば本当に一筆書きができる。今回の報告では図に示す2種類のケージで作られた s II (Structure II) の場合である。

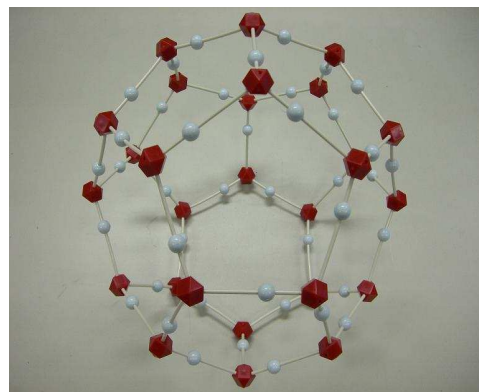
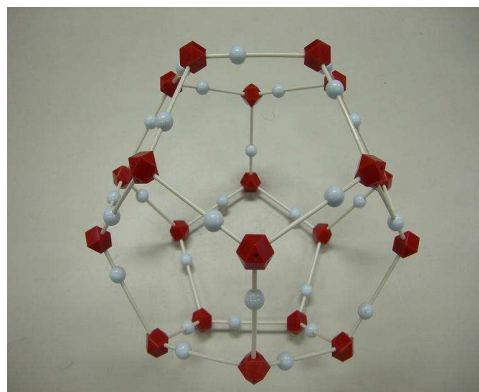


図: 構造 II(sII)を構成する 2 種類の S (Small)ケージ(左)、 L (Large)ケージ(右)

参考文献

Masahiro Nakano, Hajime Endou, Hiroyuki Matsuura, Ken-ichi Makino, Tadahiro Kin, Kazuharu Koide and Nobuo Noda, Clathrate hydrate as a phase of H₂O molecules, Biomedical Soft Computing and Human Sciences, Vol.11 No.1 51-55, 2006