

フラグメント分子軌道計算に基づく 粗視化シミュレーションの有効パラメータ算定の展開

Development of Fragment Molecular Orbital-based Parameterization for Dissipative Particle Dynamics Simulations

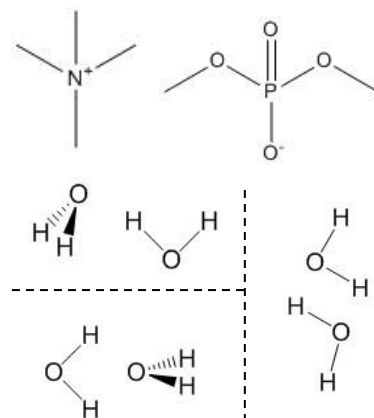
立教大理¹, 東大生研², (株)JSOL³, 慶大理工⁴, °奥脇 弘次¹, 望月 祐志^{1,2}, 小沢 拓³,
大畠 広介³, 土居 英男¹, 石川 雄太郎¹, 川田 修太郎¹, 泰岡 顕治⁴

Rikkyo Univ.¹, Univ. Tokyo², JSOL Co.³, Keio Univ.⁴, °Koji Okuwaki¹, Yuji Mochizuki^{1,2},
Taku Ozawa³, Kosuke Ohata³, Hideo Doi¹, Yuraro Ishikawa¹, Shutaro Kawada¹, Kenji Yasuoka⁴

E-mail: okuwaki@rikkyo.ac.jp

【序】高分子材料において、メソ領域の構造が物性に大きく関与することが知られている。メソ領域の挙動を予測する際、散逸粒子動力学(DPD)[1]といった粗視化粒子を用いたシミュレーションが用いられるが、成分間の相互作用を示すパラメータ(χ)の正確な算定が大きな課題となっている。我々は、高分子を構成する基本単位間の相互作用エネルギーから算出する手法[2]に着目し、相互作用エネルギーをフラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP[3]により算定すると共に、一連の評価法の改良を行った (J-OCTA[4]の機能と連携)。その結果、単純な二成分混合系での相転移上部臨界温度が実験値と良好な一致を示し、更に高分子電解質膜を例にチャネル構造を再現したことを、2015 年度春の本大会で報告した[5]。本研究では、フラグメント分子軌道法を用いた非経験的なパラメータ算定について、より汎用性を持った算定法として確立させることを目的とし、パラメータの問題が顕著な脂質膜などの系へと展開させることを試みた。

【脂質への展開】脂質のような両親媒性分子を対象とする場合、分子内でセグメント分割を行う。本研究ではリン脂質の一種である 1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (POPC)を対象とした。リン脂質には一般的に親水部として、負電荷をもつリン酸部と正電荷を持つコリン部が存在しており、これらの親水部と水の相互作用の正確な算定が重要となるが、イオン性のセグメントは真空中での算定では妥当な相互作用を見積もることができない。そこで、Poisson-Boltzmann[6]による溶媒効果を含んだ相互作用の算定を行った。更に、水分子はセグメントサイズの問題から複数分子をまと



めて扱うが、自由度を保った上での扱いが非常に難しい。そこで水の二量体について、図のような Cs、C2v、C2h 型の三種類の配向を扱い、イオン性セグメントとの相互作用を検証した。

当日はシリカゲル充填材を考慮したゴム系への展開についても報告する予定である。

【謝辞】本研究開発は文科省 FS2020 プロジェクトからの支援を受けている。

[1] Groot et al., J. Chem. Phys. **107** (1997) 4423. [2] Fan et al., Macromolecules **25** (1992) 3667. [3] Tanaka et al., Phys. Chem. Chem. Phys. **16** (2014) 10310. [4] <http://www.j-octa.com/> [5] 応用物理学会 2016 年春季学術講演会 <20a-W323-6>. [6] Watanabe et al., Chem. Phys. Lett. **500** (2010) 116.