

高分子系における水分子の静電相互作用解析と赤外バンドの考察

(兵庫県大院情報¹・静岡大工²・JASRI³)

○石井 良樹¹・鳥居 肇²・池本 夕佳³・鷲津 仁志¹

On the investigation of electrostatic interaction analysis and infrared band prediction for water molecules inside polymer materials (¹*Graduate School of Information Science, University of Hyogo*, ²*Faculty of Engineering, Shizuoka University*, ³*Spectroscopy Division, Japan Synchrotron Radiation Research Institute*) ○Yoshiki Ishii,¹ Hajime Torii,² Yuka Ikemoto,³ Hitoshi Washizu¹

Toward understanding of the features of water molecules at polymer interfaces, the hydrogen-bonding interaction has been well discussed via the measurement of infrared (IR) spectra. In this study, we investigate structural and electrostatic properties of the water molecules inside poly(2-methoxyethyl acrylate) (PMEA) by using molecular dynamics (MD) simulation with the IR-band prediction method via theoretical relationship between electrostatic interaction and vibrational properties. The electric fields acting on the hydrogen atoms of a water molecule change through the intermolecular interactions with PMEA and other water molecules, and the corresponding IR band of water molecules inside the PMEA describes specific behavior of the IR band of OH stretching vibrational mode reported by experimental measurements.

Keywords : Polymer; Water; Molecular Dynamics; Infrared; Hydrogen Bond

高分子の水和構造と界面特性は、生体適合性高分子の材料設計において重要な指針に位置付けられており¹⁾、その相互作用メカニズムの解明の観点から、赤外 (IR) 分光測定や分子動力学 (MD) 計算による IR スペクトルの直接評価²⁾、水分子に作用する静電場と OH 伸縮振動モードの関係の理論的考察が展開されてきた³⁾。本研究では、全原子 MD 計算を用いることで、poly(2-methoxyethyl acrylate) (PMEA)の水和構造を様々な含水量でサンプリングし、水分子の周囲環境や熱力学特性を解析しつつ、水分子に働く静電場と OH 伸縮振動モードの関係を応用することで、高分子中の水分子に関する OH 伸縮振動モードの IR シフトについて考察した。

全原子 MD 計算で得られた PMEA 中の水分子は低い濃度領域で分散するが、水の濃度が増えると局所的な密度揺らぎが生じた。ここで PMEA 中の水分子に働く電場から、理論的な関係式³⁾を用いて OH 伸縮振動モードの IR バンドを解析したところ、水の濃度が低い組成では、水素原子に働く電場が弱いため振動数は 3600 cm⁻¹ 付近となり、また水の濃度が増えると電場が強くなり 3400 cm⁻¹ へと低波数シフトする傾向が得られた。この IR バンドの傾向は実験値と良い対応が得られており、当日の発表では、高分子と水分子間の水素結合構造との関係についても詳述する。

- 1) M. Tanaka, S. Kobayashi, D. Murakami, F. Aratsu, A. Kashiwazaki, T. Hoshiba, K. Fukushima, *Bull. Chem. Soc. Japan* **2019**, 92, 2043 (2019).
- 2) S. Kishinaka, A. Morita, T. Ishiyama, *J. Chem. Phys.* **2019**, 150, 044707 (2019).
- 3) H. Torii, R. Ukawa, *J. Phys. Chem. B* **2021**, 125, 1468 (2021).