

演 題	エチレングリコールのポテンシャルモデルによる溶液構造の差異	
発 表 者 ( 所 属 )	○内藤研二, 佐々和洋, 林 治尚, 山名一成, 中野英彦 (姫路工大工)	
連 絡 先	〒671-2201 兵庫県姫路市書写 2167 姫路工業大学大学院 工学研究科 物質系工学専攻 林治尚先生気付	
キーワード	Molecular simulation, SHAKE, alcohol	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 等	エチレングリコールに関して、これまでに提案されたいくつかのポテンシャルモデルについて、シミュレーション結果を比較・検討する。	
環 境	適 応 機 種 名	Fortran77 搭載機種
	O S 名	UNIX, Turbo Linux
	ソ ー ス 言 語	Fortran77
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	<ul style="list-style-type: none"> <li>・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする</li> <li>・独自に頒布する</li> <li>・ソフトハウス、出版社等から市販</li> <li>・ソフトの頒布は行なわない</li> <li>・その他                      ・未定</li> </ul>	具 体 的 方 法

はじめに

多価アルコール類は、タンパク質の高次構造を安定に維持する変性防止効果や、氷点下で不凍水が存在するという水の凍結防止効果等の興味深い特徴を有する。しかしこれらの現象と個々の分子運動との関連性やその機構は、まだ十分には解明されていない。flexible な溶質分子と溶媒分子の間の相互作用は協同的で、その周囲の溶媒分子の構造は、溶質分子の回転運動と直接的な関係があると考えられており、当研究室では計算機シミュレーションを用い、これらの現象を解析してきた。また、アルコールやエチレングリコールについて、これまでにいくつものポテンシャルモデルが提案されている。本研究では、それらのうち4つを用いて、束縛分子動力学 (constraint-MD) 法により、純粋なエチレングリコール溶液と、エチレングリコール水溶液について、シミュレーションを行った。

## 概要

エチレングリコール分子は、化学式が  $\text{H}-\text{O}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O}-\text{H}$  であり、3つのねじれの内部自由度を持っている。ここでは、エチレングリコールは6点系の鎖状分子とし、分子内回転だけが可能な flexible モデルとして扱った。エチレングリコールと水分子の間の異種分子間相互作用には、LB 則を適用した。4つのポテンシャルモデルのパラメーターと分子内ポテンシャルエネルギーを次に示す。角度は  $0^\circ$  がシス、 $180^\circ$  がトランスとした。

Table1 ポテンシャルモデルのパラメーター

	HTN			OPLS			WP・JMOD		
	H	O	CH <sub>2</sub>	H	O	CH <sub>2</sub>	H	O	CH <sub>2</sub>
q (e)	+0.523	-0.587	+0.064	+0.435	-0.700	+0.265	+0.435	-0.700	+0.265
$\sigma$ (Å)	0.0	3.07	3.905	0.0	3.07	3.905	1.295	3.07	3.905
$\epsilon$ (kcal mol <sup>-1</sup> )	0.0	0.17	0.118	0.0	0.17	0.118	0.0003657	0.17	0.118

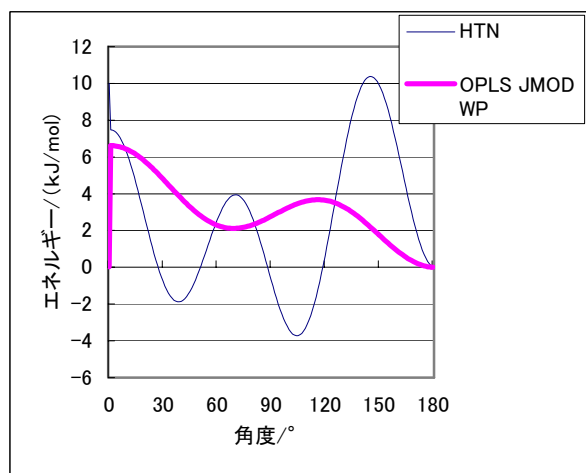
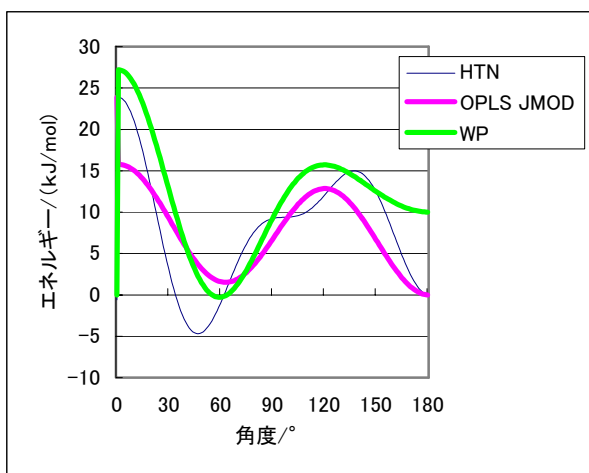


Fig.1 CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub> の分子内ポテンシャルエネルギー

Fig.2 CH<sub>2</sub>-O の分子内ポテンシャルエネルギー

## 参考文献

- 1 Hayashi, H, Ph, D Thesis, (1994)
- 2 L.Saiz, J.A.Padro, and E.Guardia, J.Chem.Phys.114,3187 (2001)
- 3 W.L.Jorgensen, J.Phys.Chem.90,1276 (1986)
- 4 G.Widmalm and R.W.Pastor, J.Chem.Soc., Faraday Trans.88,1747 (1992)