

# 分子動力学シミュレーションによる

## 溶媒和効果の検討

藤田貴敏<sup>1</sup>、渡邊博文<sup>2,3</sup>、田中成典<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>神戸大学発達科学部人間環境科学科(〒657 8501 神戸市灘区鶴甲 3 - 11)

<sup>2</sup>神戸大学自然科学研究科(〒657 - 8501 神戸市灘区六甲台町 1 - 1)

<sup>3</sup>科学技術振興機構(JST) CREST

一般にある物質が溶けることによって、溶媒におきる効果には様々のものが考えられる。イオンの正水和、負水和、非極性物質の疎水性水和など、その効果を正確に予測、解析することは、生命システムを理解する上でも極めて重要なテーマである。また、RISM法などの液体の統計力学の発達と、近年の分子動力学法、モンテカルロ法などの古典力学的な計算手法から、分子軌道法などの量子化学的計算までの様々な計算機シミュレーション手法の発達により、溶媒和という現象の分子論的な描像も徐々に明らかになってきつつある。このことは物理化学的にも大変興味深いテーマである。

このような背景のもとに、本研究では溶媒和効果を定量的に解析することを目標とする。溶媒としては最も広く知られ、かつ生命にとって最も重要であると思われる水を用いる。また溶媒和効果(水和効果)の定量的なパラメータとしては溶媒和ギブス自由エネルギー(水和ギブス自由エネルギー)を算出する。希ガス原子などの様々な物質について水和ギブス自由エネルギーを求め、比較、あるいは考察する。

具体的な計算方法としては、古典力学的な計算手法である分子動力学法を用いて Widom の方法等を用いて自由エネルギーを算出する。