

## DFT-MD シミュレーションを用いた界面の水の記述精度の調査

### Exploring performance of DFT-MD simulation for interfacial water

永田勇樹

マックスプランク・高分子研究所

#### 1. 研究目的

DFT をベースにした MD シミュレーションは、複雑な系において特別なモデリングを必要としないため、誰もが簡単にシミュレーションを始められるツールとなっている。しかし、DFT-MD が予測するデータは必ずしも精確というわけではない。DFT はその精度を多分に **Exchange correlation functional** やファンデルワールス補正、基底関数の精度などに強く依存する。例えば、水の密度は  $1\text{g/cm}^3$  であるが、DFT-MD で予測した水の密度は 0.7 から 1.3 の間まで取りうる。

バルクの水の **Property** に関して DFT-MD がどれほど精確に予測できるかは、他の研究者によって幅広く調べられてきたが、界面についてはほとんど知見は得られていない。我々は **Systematic** に水の界面の性質を調べることで、どのような **Functional** やファンデルワールス補正が界面水の記述に有用かを確かめた (JPCL2019, Chem. Rev.2020)。

#### 2. 研究成果の内容

我々は界面水のミクロな構造を調べる実験手法について和周波発生分光法を中心に長年研究を重ねてきた (Chem. Rev.2020)。特に **Dangling O-H group** と呼ばれる、水空気界面で空気界面に突き出た水の **O-H group** の特徴やその分子モデリングについて様々な研究を行ってきた。それらを指標にして、どのような DFT-MD の計算条件が界面水を記述しているのに適しているか調べた (JPCL2019)。

さらに、DFT-MD を使ってどのような水の振動周波数が予測できるのかも系統的に調べている (PCCP2020)。水の振動の起源 (例えば **Bending Mode**) を調べることに非常に有用であろう (Nature Comm 2020, revised)。

#### 3. 学際共同利用が果たした役割と意義

コンピュータ資源を活用するとともに、筑波大学重田教授との共同研究を推進することができた。

#### 4. 今後の展望

既に発表しているように、適切な DFT-MD の記述は実験を精確に解釈するためにも有用である (JACS2020, PCCP2020 accepted)。ここで得られた知見は、幅広い **Computational**

Chemistry の分野で簡便な方法として利用されることを期待する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

K. Zhong, C.-C. Yu, M. Dodia, M. Bonn, Y. Nagata, and T. Ohto,  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 12785 (2020).

T. Seki, C.-C. Yu, X. Yu, T. Ohto, S. Sun, K. Meister, E. H. G. Backus, M. Bonn, and  
Y. Nagata,  
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, accepted.

V. Balos, S. Imoto, R. R. Netz, M. Bonn, D. J. Bonthuis, Y. Nagata, and J. Hunger,  
*Nature Comm.*, **11**, 1611 (2020).

F. Tang, T. Ohto, S. Sun, S. Imoto, J. R. Rouxel, E. H. G. Backus, S. Mukamel, M.  
Bonn, and Y. Nagata,  
*Chem. Rev.*, **120**, 3633 (2020).

S. Das, S. Imoto, S. Sun, Y. Nagata, E. H. G. Backus, and M. Bonn,  
*J. Am. Chem. Soc.*, **142**, 945-952 (2020).

T. Seki, S. Sun, K. Zhong, C.-C. Yu, K. Machel, L. B. Dreiser, E. H. G. Backus, M.  
Bonn, and Y. Nagata,  
*J. Phys. Chem. Lett.*, **10**, 6936-6941 (2019).

T. Ohto, M. Dodia, J. Xu, S. Imoto, F. Tang, F. Zysk, T. D. Kühne, Y. Shigeta, M.  
Bonn, X. Wu, and Y. Nagata,  
*J. Phys. Chem. Lett.*, **20**, 4914-4919 (2019).

(2) 学会発表

なし

(3) その他

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	3,210,000	
Oakforest-PACS			
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			