

利用事例紹介 6

高分子中の水分子の拡散速度計算

分子動力学法により分子の平均二乗変位を求めることができます。ジオール/ジイソシアネートで構成される高分子中での水分子の平均二乗変位より水の拡散速度を計算することができます。

計算フローチャート

モノマーモデル、ポリマーモデル

全原子モデル、10分子、力場：dreiding → 粗視化

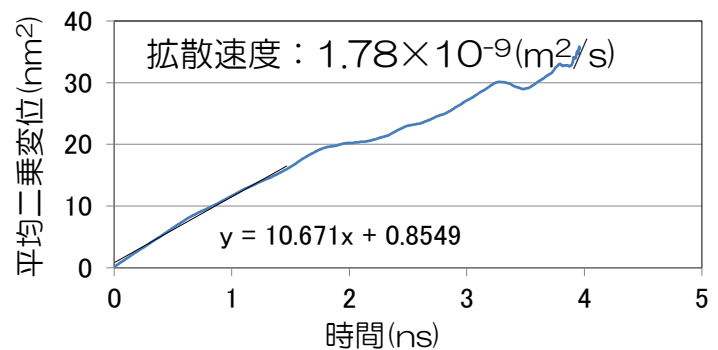
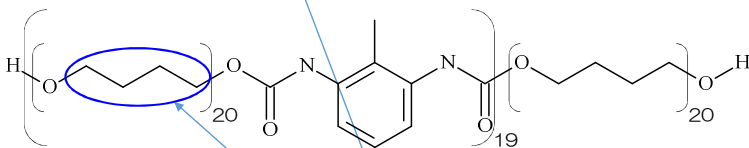
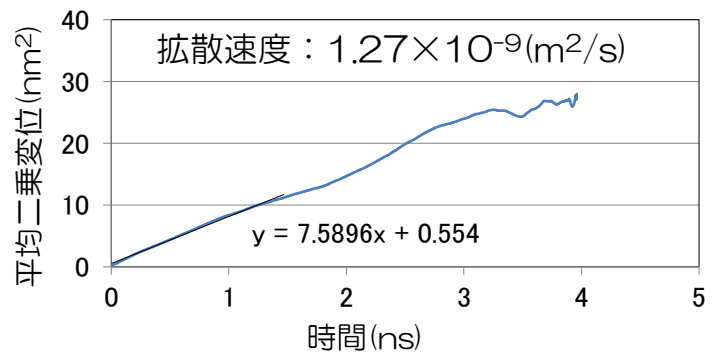
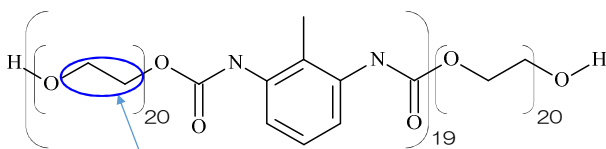
初期配置作製 緩和後、圧縮 (温度：300K)

リバースマッピング後の緩和

水分子(4分子)を配置して拡散速度の計算

三次元での平均二乗変位
: $x^2(t)$ 、 $y^2(t)$ 、 $z^2(t)$
拡散速度：D、時間：t
 $x^2(t)=2Dt$ $x^2(t)+y^2(t)+z^2(t)=6Dt$
→ $D=(x^2(t)+y^2(t)+z^2(t))/6$

計算結果



ジオールのアルキル部分が長い方が拡散速度が速い結果が得られました。透湿度の優位差の推測に利用できる可能性があります。