

ヒドロニウムアルナイトの分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation of hydronium alunite

小林 優斗

指導教員：黒木 雄一郎

サレジオ工業高等専門学校 機械電子工学科

キーワード：ヒドロニウムアルナイト、水素結合、分子動力学シミュレーション

1. 緒言

私が所属する電子セラミック研究室では、レアメタルを用いない新たな蛍光物質である銅添加ヒドロニウムアルナイトを発見した。銅添加ヒドロニウムアルナイトは銅、アルミニウム、硫黄、酸素、水素で形成される蛍光材料であり、その発光原理が結晶内部の水素結合に起因することを明らかにしてきた[1]。しかし、現状では従来の蛍光物質を代替できるような発光強度は得られていない。この物質の発光強度向上のためには、基礎的な結晶構造と水素結合を詳細に調べる必要がある。しかし、結晶内の水素位置や水素結合を X 線回折等の実験的手法で解明することは容易ではない。そこで本研究では、分子動力学シミュレーションを用いて、水素および水素結合の動的挙動を解析することを目的とした。

2. 方法

本研究における分子動力学計算では、LAMMPS(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)コードを用いた。ヒドロニウムアルナイトの初期構造[2]を LAMMPS 入力ファイルに変換した。ポテンシャルとしてレナードジョーンズ型を採用し、結合長および結合角については clayFF (粘土構造における一般的な力場) のパラメータを用いた[3]。図 1 はレナードジョーンズ型のポテンシャルを各原子間でグラフ化したものである。静電クーロンエネルギーにおいて、各原子の電荷が同符号ならば斥力、異符号ならば引力が作

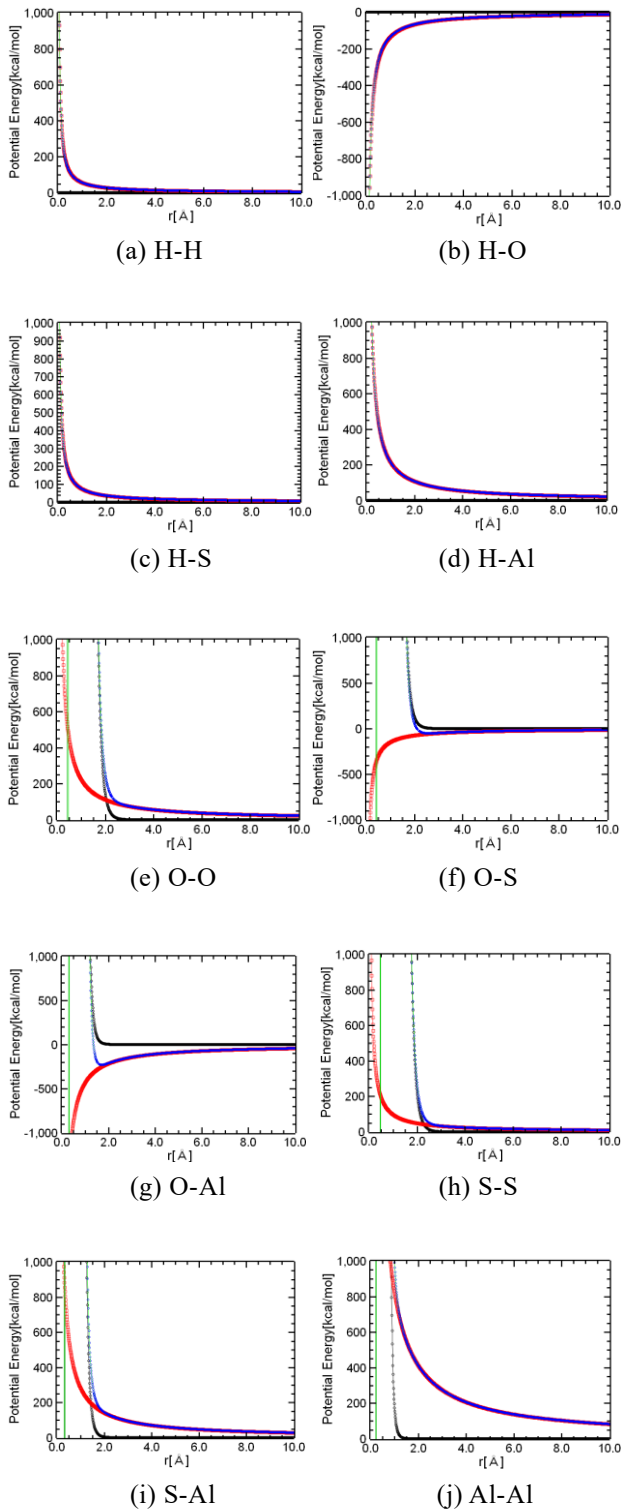
用している。まず始めに、エネルギー最小化計算を行い、原子間に働く力を 0 にする。次に、スタートアップ計算に移行する。この計算では、温度を設定することで原子に初速度を与える。以上の計算を踏まえて、Molecular Dynamics 計算(MD 計算)を行う。この計算では、ステップ毎に原子座標を書き出し原子の動きを可視化する。

3. 結果

図 2 は分子動力学シミュレーションに用いたヒドロニウムアルナイトの初期構造である。エネルギー最小化計算を行ったところ、初期構造に比べて酸素-水素間の結合距離が長くなった。そこで酸素-水素間の結合長と結合角パラメータを再設定し、再度最小化計算を行ったところ図 3 のように 13 ステップでエネルギーが最小化された。図 4 のように、構造上部のアルミニウム-酸素間の結合が接近し、酸素同士の結合も近すぎるようになった。

4. 結言

本研究ではヒドロニウムアルナイトの各原子間における 2 体間ポテンシャルを調査し、各原子のポテンシャルを設定した。また、設定した構造ファイルを用いてエネルギー最小化計算を行った。



黒:ファンデルワールスエネルギー
 赤:静電クーロンエネルギー
 青:トータルエネルギー

図1 ヒドロニウムアルナイトの各種原子間ポテンシャル

青:アルミニウム
 黄:硫黄
 赤:酸素
 桃:水素

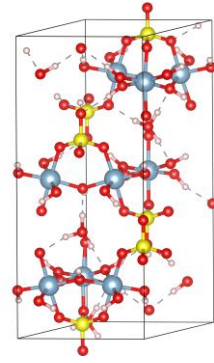


図2 ヒドロニウムアルナイトの初期結晶構造

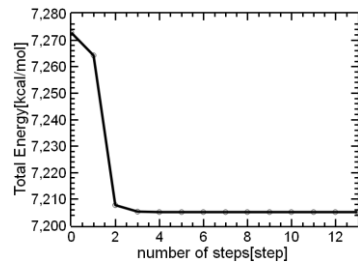


図3 最小化計算中のエネルギー遷移

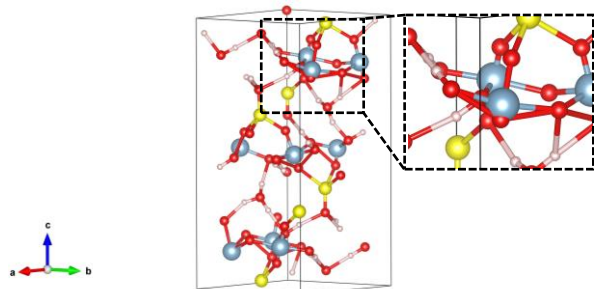


図4 最小化計算で得られた結晶構造

5. 今後の予定

結果からアルミニウムと酸素間の結合長、および酸素-酸素間距離も短くなってしまったことがわかった。今後はアルミニウム-酸素間および硫黄-酸素間の結合長および結合角パラメータ等を検討し、スタートアップ計算およびMD計算を実施する。

6. 文献

- [1] 黒木雄一郎, 岡元智一郎, 高田雅介, 日本セラミック協会, **51**, 321(2016)
- [2] J. D. Gale, K. Wright and K. A. Hudson-Edwards, *Am. Miner.*, **95**, 1109(2010)
- [3] Randall T. Cygan, Jian-Jie Liang, and Andrey G. Kalinichev, *J. Pys. Chem. B*, **108**, 1255(2004)