

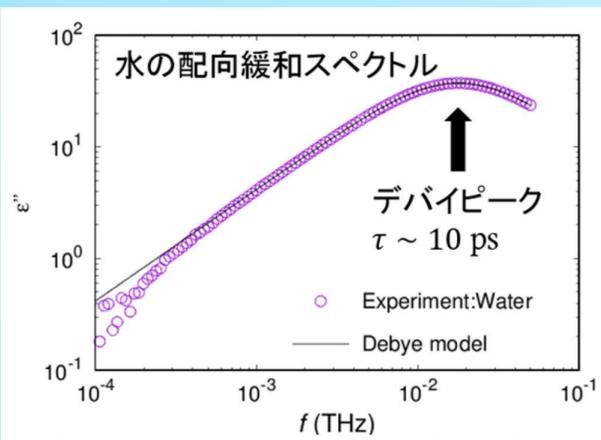


研究背景

水の物性研究

”液体中で水分子がどのように動いているのか？”

水の誘電緩和スペクトルの実験データ



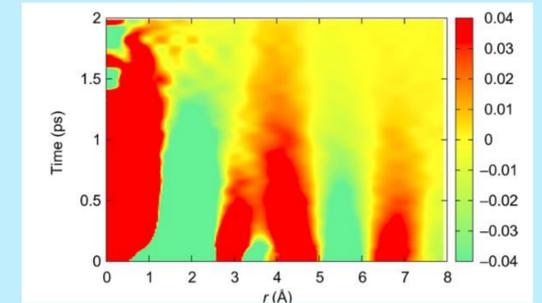
- 分子配向緩和の相関
- 10 ps にピーク (Debye peak)
- 物理的描像が未確立

挑戦的課題

MDシミュレーションによる  
デバイピークの物理的起源解明

非弾性X線散乱実験

水分子の実時間・実空間相関



T. Iwashita et al, *Science advances* 3, E1603079 (2017)

- 水の局所構造緩和の観測
- 局所構造緩和の時間スケール ~ 0.8 ps

局所構造緩和と配向  
緩和の関係は不明

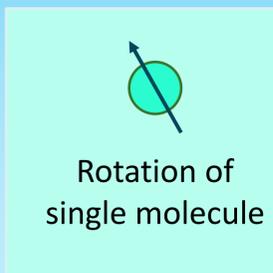
研究目的

水の配向緩和ダイナミクスの実時間・実空間相関の観点から  
誘電緩和実験データのミクロな物理的描像の確立

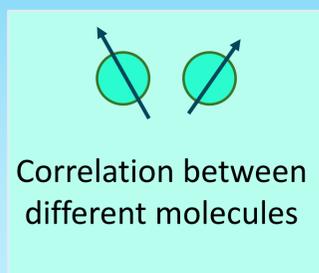
研究方針

水分子双極子モーメントの時間相関関数

$$\langle \mathbf{M}(t) \cdot \mathbf{M}(0) \rangle = \sum_i^N \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_i(0) + \sum_{i \neq j}^N \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_j(0)$$



Self part

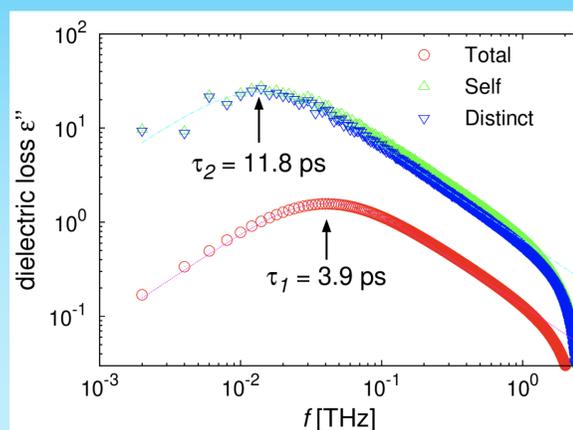


Distinct part

予備計算結果(阪大スパコン一般利用 2017,2018)

配向時間相関関数のフーリエ変換: 誘電関数

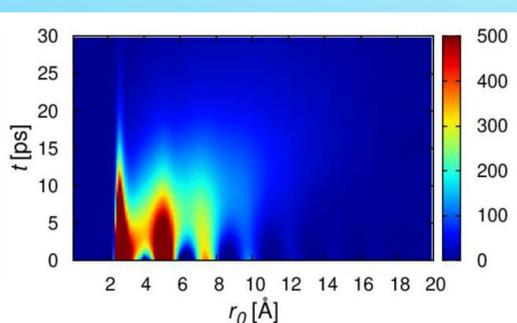
$$\psi'(\omega) + i\psi''(\omega) = \int dt \langle \mathbf{M}(t) \cdot \mathbf{M}(0) \rangle e^{i\omega t}$$



- TIP3P/E model (at room T)
- デバイピーク
- Distinct Part が支配的
- Self partの寄与は小さい  
~ 4 ps for self  
~ 12 ps for distinct

配向緩和の時間・空間  
構造の解明の必要性

今後の研究計画



$$\sum_{i \neq j}^N \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_j(0) = \int dr_0 \sum_{i \neq j}^N \boldsymbol{\mu}_i(t) \cdot \boldsymbol{\mu}_j(0) \delta(r_0 - r_{ij}(0))$$

- 水の配向緩和スペクトルの計算(TIP3P/E, TIP4P2005)
- 水分子の配向緩和と構造緩和の時間空間相関の計算
  - 密度揺らぎの実時間・実空間相関である vanHove functionの計算
  - 水分子の回転運動と並進運動の分離解析

課題参加者

中西真大(福岡工業大学)

謝辞

本研究はJSPS科研費 JP17K14371の助成を受けたものです。本研究は「(財)クリタ水・環境科学振興財団」の研究助成を受けて実施したものです。