

機械学習ポテンシャルを用いたアモルファス氷表面における

分子吸脱着挙動の理論研究

(筑波大学大学院数理工学物質科学研究群) 渡辺 七都稀

s2330059@u.tsukuba.ac.jp

電波望遠鏡による宇宙観測により、星間分子雲に多様な有機分子が存在することが明らかになっている。星間分子雲は極低温・低密度環境であり、気相反応は極めて遅く進行する。これに対し、星間塵を覆うアモルファス状態の氷 (Amorphous Solid Water; ASW) 表面上での反応や吸脱着過程が、分子の生成・分解速度を決定する主要な要因となる。特に、ASW 表面からの有機分子の脱離は、生成された分子がガス相へと供給され、観測可能になるための必須プロセスである。また、吸着状態にある分子は ASW 表面上でさらなる反応を経て複雑化する可能性があり、吸脱着平衡は星間分子雲の化学進化の方向性に直接影響を与える。加えて、分子の脱離効率や脱離機構に関する理解は、望遠鏡観測で得られる分子存在量の解釈精度を向上させる上でも重要である。

本研究では、機械学習ポテンシャル¹ (MLP) による MD 計算 (MLP-MD) を用いることで量子化学に匹敵する精度での力の推定を高速化し、さらに生体分子のシミュレーションにおいて効率的な構造遷移過程の抽出に用いられる並列カスケード選択分子動力学² (Parallel Cascade Selection MD; PaCS-MD) を組み合わせることで、従来の方法ではシミュレーションが困難な低温環境での分子吸脱着挙動を調べた。グリシン前駆体であるアミノアセトニトリルがアモルファス氷表面から脱離するシミュレーションを行い、通常の MLP-MD では観測が困難な脱離挙動を取得した (図)。さらに、異なる集団変数を用いて PaCS-MD を行うことで、複数の脱離様式を確認した。

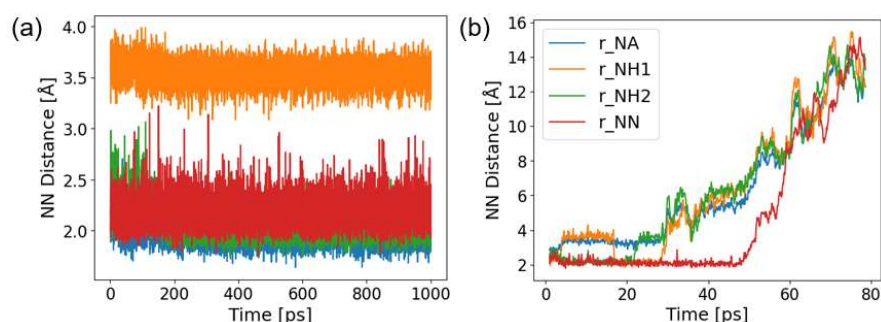


図. アミノアセトニトリルのアミノ基の窒素(NA)、水素(NH1, NH2)、ニトリル基の窒素(NN)と最隣接した水との距離変化。(a)通常の MLP-MD、(b)PaCS-MD を用いた MLP-MD。

[1]. V. Zaverkin and J. Kästner, *J. Chem. Theory Comput.*, 2020, **16**, 5410–5421.

[2]. R. Harada and A. Kitao, *J. Chem. Phys.*, 2013, **139**, 035103.