

## 1C2b

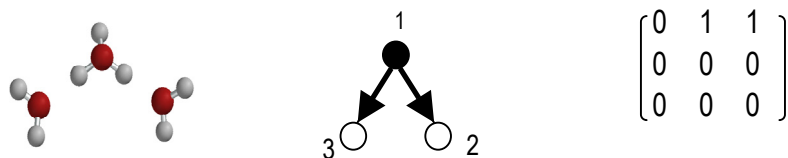
プロトン化水クラスター  $(\text{H}_3\text{O})^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$  のトポロジー的に可能な水素結合パターン の数え上げ

広島大院理， 広島大 QuLiS

○杰力 買合木提江・三宅敏子・相田美砂子

**【序】** プロトン化水クラスターは水分子と  $\text{H}_3\text{O}^+$  が水素結合によって結ばれたものである。プロトン化水クラスターは水素結合パターンの異なる多様な構造をとることができる。クラスターの水素結合の結合関係は、グラフによって表現できる。グラフとは、頂点と辺の集合である。プロトン化水クラスターにおいて、 $\text{H}_3\text{O}^+$  は他の水分子と異なるため、rooted graphによって表現できる。rooted graphは一つの頂点と別の頂点が異なるグラフである。水素結合には方向性が存在する。水素結合の方向性を矢印で表現したrooted graphをrooted digraphと言う。ここで、 $\text{H}_3\text{O}^+$  または水分子にはrooted digraphの頂点に対応し、proton-donorから proton-acceptorへの水素結合には矢印に対応する。rooted digraphは行列表記がある。本研究ではプロトン化水クラスターのトポロジー的に可能な水素結合パターンを全て列挙した。得られた水素結合パターンのそれぞれについて非経験的分子軌道法を用いて構造最適化を行い、安定構造を求めた。

**【計算方法】** 本研究ではプロトン化水クラスターの構造をrooted digraphに置き換え、H-B (Hydrogen bonded) マトリックスに対応させることによってトポロジー的に可能な水素結合パターンの数え上げを行なった。H-Bマトリックスとは  $\text{H}_3\text{O}^+$  または水分子  $i$  が水分子または  $\text{H}_3\text{O}^+$   $j$  のproton-donorであるとき  $a_{ij}=1$ 、そうでないとき  $a_{ij}=0$  であるような行列  $A=(a_{ij})$  である。



クラスターの構造

rooted digraph\*

H-Bマトリックス

(\*  $\text{H}_3\text{O}^+$  : ●, 水分子 : ○, 水素結合 : 矢印)

全ての水素結合パターンについて、そのパターンに相当するプロトン化水クラスターの初期構造を作り、非経験的分子軌道法を用いて構造最適化を行うことによって安定構造として存在するものを全て得た。

**【まとめ】** 本研究ではプロトン化水クラスターのトポロジー的に可能な水素結合パターンを全て数え上げた。  $n \leq 4$  の場合について、得られた全ての水素結合パターンの初期構造を作り非経験的分子軌道法を用いて構造最適化を行い、すべての安定構造を求めた。

$\text{H}_3\text{O}^+$ と水分子の数	2	3	4	5	6	7	8
Rooted graph	1	3	11	58	294	1806	12326
Rooted digraph (トポロジー的に可能な水素結合パターンの数)	2	9	63	561	5843	68696	896063

表 1. Rooted digraph の数え上げの結果