







フェントン反応の分子機構： 自由エネルギー変化の解析④

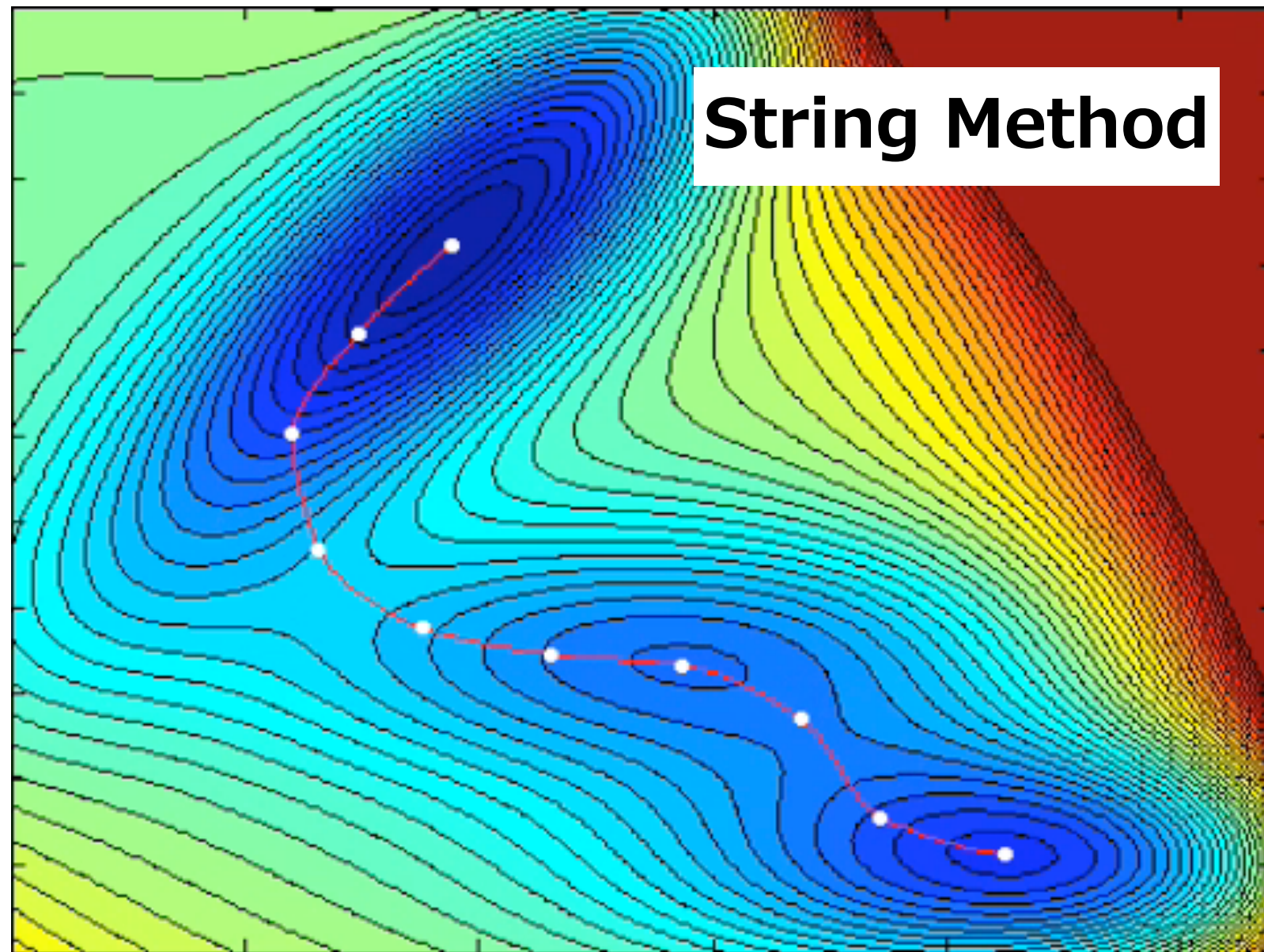
～成分分析の再考～

名大院・情報科学 | 山本典史・古賀伸明

【年間計画】 (⇔等を使って、研究開発期間が分かるように具体的に記入してください。必要に応じて、行数を増やして下さい。)

研究開発項目 <small>(小項目毎に分けて具体的に記載して下さい。)</small>	4月－6月	7月－9月	10月－12月	1月－3月
① 水和二価鉄の触媒反応 I. 最小自由エネルギー経路探索 II. 電子状態変化などの詳細解析 III. 論文作成		 		
② 金属ペプチドの触媒反応 I. 酸化還元電位に関する計算 II. 触媒反応の分子機構の解析 III. 論文作成			 	

Minimum Free Energy Pathway



L. Maragliano et al., *JCP*, **125**, 024106 (2006)

Mean Force Component (MFC)

$$\Delta F(\sigma_1 \rightarrow \sigma_2) = \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \nabla \tilde{F}_{ij}(\sigma') d\sigma'$$

FE Change

MFC

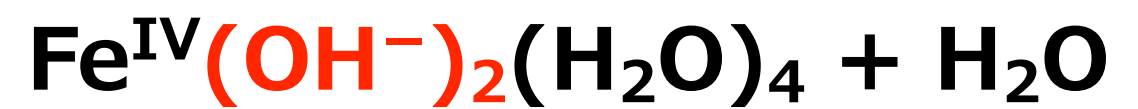
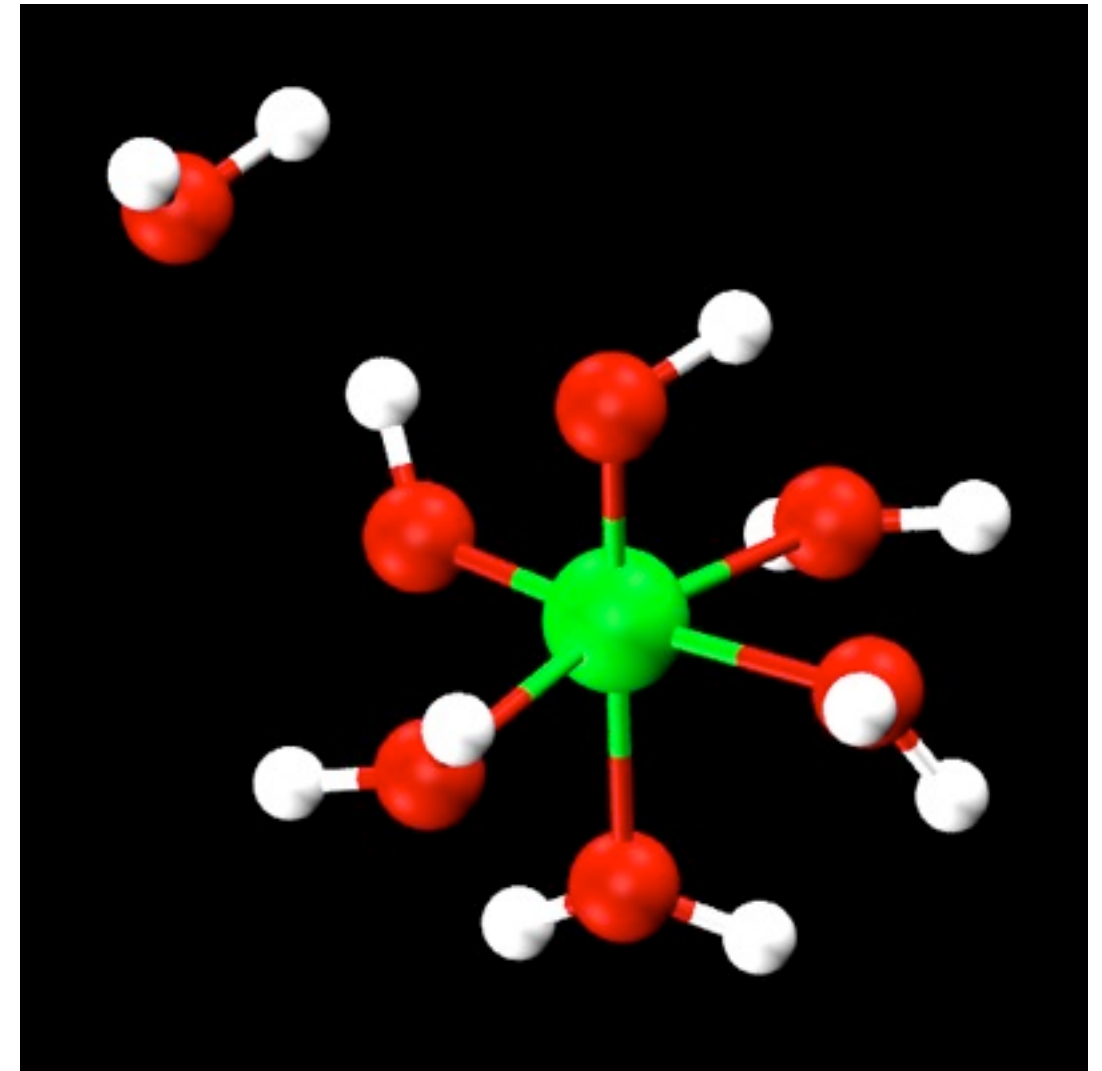
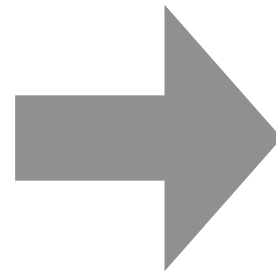
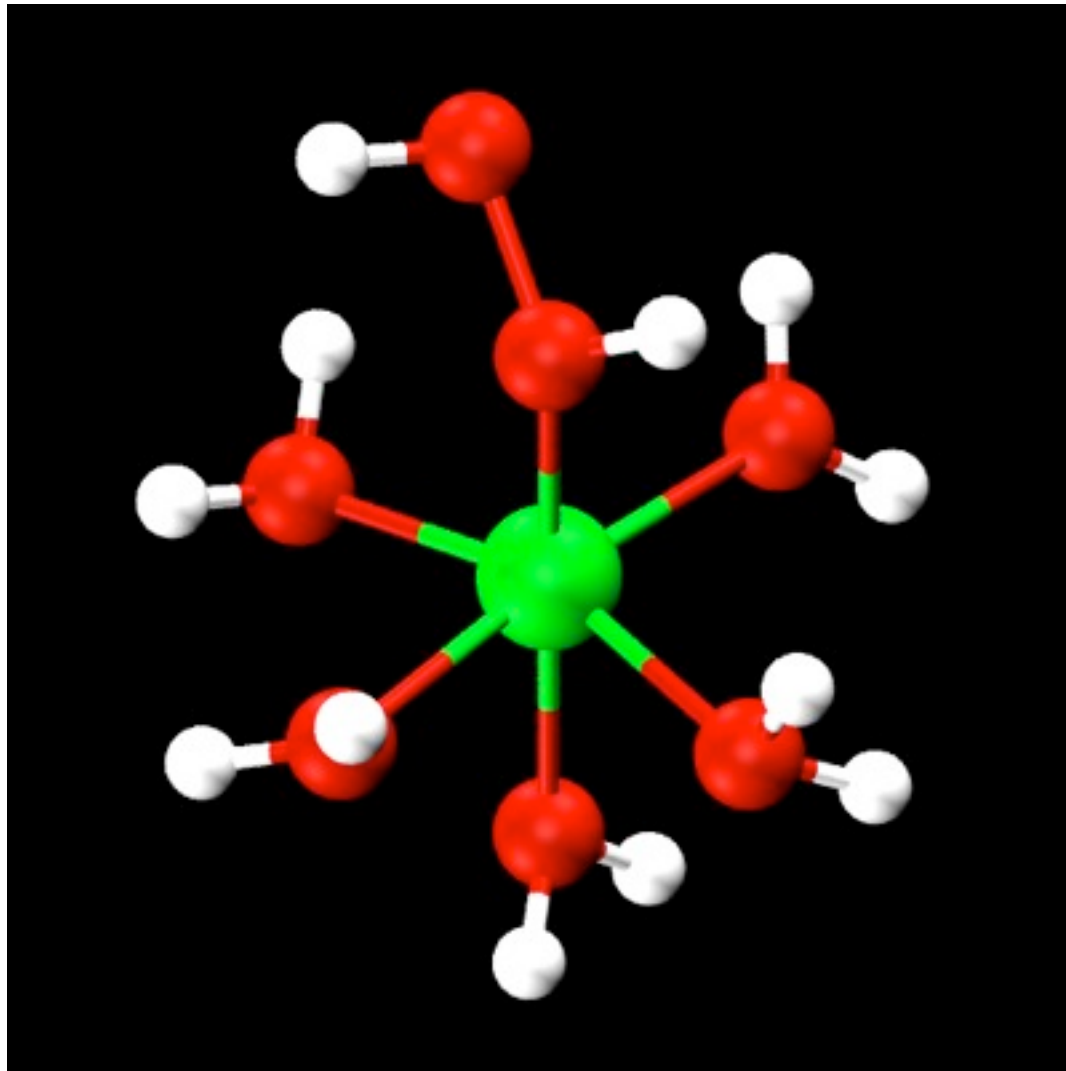
$$\nabla \tilde{F}_{ij}(\sigma) = R(\sigma) M_{ij}(\sigma) \frac{\partial F(\sigma)}{\partial \xi_i} \frac{\partial F(\sigma)}{\partial \xi_j}$$

MFC

Tensor

Mean-Force

Dihydroxo Pathway



Di-Hydroxo Pathway

