



平成 29 年 5 月 25 日

計算機シミュレーションによる 水・氷・ハイドレートの研究 最も身近な液体「水」の“異常”な性質を探る

岡山大学異分野基礎科学研究所理論化学研究室では、計算機シミュレーションによって、水・氷・ハイドレートの性質を研究しています。

水は私たちに一番身近な液体なので、液体といえば誰もが水をイメージします。しかし、化学の目で見れば、水ほど変わった液体はほかにありません。水分子は非常に小さく単純ですが、冷やすと膨張します。また、表面張力が大きいなど、多数集まることで異常な性質が創発します。水は化学だけでなく、物理、生物、宇宙、地学などの科学分野から、気象、工学、環境、生活まで幅広い分野に深く関わりがあります。水を知り、新しい性質を見付けることは、他分野での現象の理解を深めます。

本研究室では計算機シミュレーションと理論により、水の異常な諸性質を、分子の目線で説明することを目標としています。

<導入>

水は最も身近な液体で、宇宙に大量に存在しています。化学だけでなく、物理、生物、宇宙、地学などの科学分野から、気象、工学、環境、生活まで幅広い分野に関わりがあるため、興味もたれている物質です。一方で、多数の変った性質を持つことが知られており（冷やすと膨張する、表面張力が大きい、いろいろなものを溶かす、etc.）、本研究室ではこれらの性質を分子の目線で説明しようと、さまざまな方法でアプローチしています。

<背景>

水はどのように凍るか、氷はどのように融けるか、なぜ塩や砂糖は水によく溶けるのに、氷にはまったく溶けないのか、逆にメタンは水に全く溶けないのにハイドレートになるのかなど…最も身近だからといって、その仕組みは全て分かっているわけではありません（水に限ったことではないですが）。

水分子は水素原子 2 つと酸素原子 1 つが結合している単純な分子ですが、多数集まることで、水独特の性質が出現します。つまり、分子 1 つを見ていたのでは予想できない＝複雑系とも言える分子なのです。

現在では、計算機のたえまない高速化により、今まで見えなかった現象を今までにない規模（100 万原子、10 億ステップ）でシミュレーションでき、計算機の中で再現できるようになってきました。一方で、再現できてもすぐ理解につながるわけではなく、計算機が生み出すビッグデータから、本質（仕組み）を見極める地道な解析が必要です。

**PRESS RELEASE****<研究内容、業績>**

本研究室では、計算機シミュレーションにより、極低温超低压～高温超高压までの全ての状態での水と氷の間の相変化（凍結・融解）や性質の変化を再現し、その場で観察し、仕組みを解明しています。*

最近の研究で、実験でまだ見つかっていない新しい氷がいくつか予測されました。（大学院自然科学研究科の平田雅典院生、松井貴宏院生の研究[†]、未発表）

また、包接水和物（メタンハイドレートなど）の基本的な性質と、融ける・凍るしくみを解明し、より速く融かし凍らせる方法を探っています。

<展望>

水に新しい性質を見つけることは、科学の諸分野に直接的な影響を及ぼします（惑星探査、地震、医療、エネルギー、気象、気候変動、生命科学、化学、スポーツ…）。一方で水にはまだまだ謎が多く、答えが新しい疑問を次々に生みだします。一つ一つ丁寧に答えを見つけることが課題となっています。

水は生命維持に直結し、しかも他の物質にない性質を持つのに、極めて安価でどこにでもあります。今後、新しい使い道を見つけていきたいです。

計算機シミュレーションが生み出すビッグデータから、何をどうやって漉し取るか調べていきたいです。

*これらの成果は、異分野基礎科学研究所理論化学研究室の田中秀樹教授、矢ヶ崎琢磨講師、理論物理化学研究室甲賀 研一郎 教授、望月建爾助教および学生との協同研究によるものです。

[†]大学院自然科学研究科博士前期課程 1 年平田雅典さんは超高压の、松井貴宏さんは超低压の氷を探索し、それぞれ新種の氷をシミュレーションで予測しました。

<略歴>

松本 正和（まつもと・まさかず）

1967 年生まれ。京都大学大学院修士課程、総合研究大学院大学大学院修了。博士（理学）。専門は統計熱力学。名古屋大学理学部助手から現職。

<お問い合わせ>

岡山大学 異分野基礎科学研究所

准教授 松本 正和

（電話番号）086-251-7846

（メール）matsu-m3@cc.okayama-u.ac.jp