

計算機シミュレーションを用いた水中の水素結合ネットワーク解析

(名古屋大学 物質科学国際研究センター) 松本 正和
052-789-3656 / matto@nagoya-u.jp

溶質と水の間を考えると避けて通れないのが「水の構造化」の問題です。疎水性分子の周辺にある水は構造化している、電解質は水の構造を破壊する、などなど、それぞれに熱力学的にはコンシステントな知見が多数知られています。

構造化というのは、熱力学的にはエントロピーの低下を指します。疎水性分子を水に溶かすとエントロピーの低下が観察できますし、拡散などの動的性質の変化も伴います。一方で、何も溶かしていない純水の中にも、構造化したドメインとそれ以外の部分が混在していることを示唆する多数のデータが存在します。

では、構造化というのは微視的にはどのような状態を指すのでしょうか。「クラスタ化する」「iceberg(冰山)化する」といった表現を使うこともあります。人によっては「ice-likeな構造」と表現することもあります。しかし、これらの比喩は、本質を見誤らせます。シミュレーションで水分子の作る構造や運動を子細に観察しても、液体の水の中に、明確に識別できるクラスタのような構造は見えませんが、疎水分子の周りに水の結晶構造を見つけることもできません。

最近過冷却水の物性が実験とシミュレーションの両面から詳しく研究され、「構造化」を考えるにあたって、水と氷の構造に注目するだけでは不十分であることがわかってきました。構造化とは、氷晶形成というよりもメタンハイドレートやアモルファス氷の構造形成に近く、これまで個別に扱われてきた、構造化、結晶化、アモルファス化、ハイドレート化といった現象が、実は互いに密接に関係を持つらしいのです。

本講演では、シミュレーションからみた水の物性、構造、運動を紹介し、水の構造を子細に解析すると何がでてくるか、シミュレーションで水を扱う際にどのような点に注意を払わなければいけないかを解説します。