

## 21aVA-5 水の液液共存状態の微視的構造を見る

名大物質国際研、名大院理<sup>A</sup>

松本正和、神谷基司<sup>A</sup>

Microscopic Structure of Water at Liquid-Liquid Coexistence

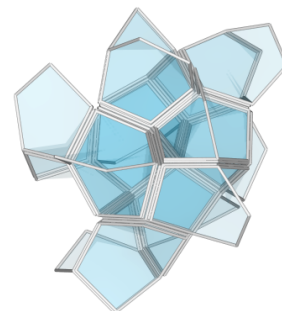
Nagoya University Research Center for Materials Science,

Masakazu Matsumoto and Motoshi Kamiya

液体の水を常温から過冷却すると、膨張率や比熱が $-45^{\circ}\text{C}$ に向けて発散的に変化する。[1] 様々な実験およびシミュレーションから、この現象の原因は水のPolyamorphism(複数の非晶質状態、液体状態を持つ性質)と考えられている。[2] 2つの液相はエントロピーに大きな違いがあるので、片方の相には、何らかの秩序構造が存在するはずである。しかし、シミュレーションで得られる構造を見ても、2つの相を識別することは容易でない。このため、密度が近い2つのランダム相をどう見分けるか、片方の相にはどのような秩序があり、なぜ排他的に凝集することができるのかといった、基本的な疑問が未解決である。

本研究では、水の水素結合ネットワークに注目し、トポロジーを手掛りに液体構造を分類すれば2相が識別できることを示す。単純液体の場合と同様に、これらの凝縮相の構造の違いはパッキングの違いと理解できる。ただし、水の場合、パッキングする実体は分子ではなく、フラストレーションの小さいネットワークモチーフ(フラグメント)である。[3] かくして、局所秩序形成(パッキング)は過冷却液体では普遍的な現象だが、それが局所にとどまるのは構造フラストレーションが避けられないからである。[4] 水のように特殊なパッキング構造が自己組織化できる場合には液液相転移がおこるのではないだろうか。

本講演では、併せてガラス転移近傍での2成分単純液体の局所構造と運動の相関や、(溶質分子や器壁による)水の構造化の例を示し、低温の液体の構造を精密に解析する意義を強調したい。



一見ランダムに見えるが、歪みが小さく対称性の高い局所秩序構造の例。

[1] C. A. Angell, in *Water: A Comprehensive Treatise*, edited by F. Franks, Plenum, New York, 1981, Vol. 7, 360 (1994).

[2] O. Mishima and H.E. Stanley, *Nature* 396, 329-335 (1998)

[3] M. Matsumoto, A. Baba, and I. Ohmine, *J. Chem. Phys.* 127, 134504 (2007).

[4] G Tarjus et al, *J. Phys.: Condens. Matter* 17 (2005) R1143–R1182