スーパーコンピュータによる

水・氷・ハイドレートの科学

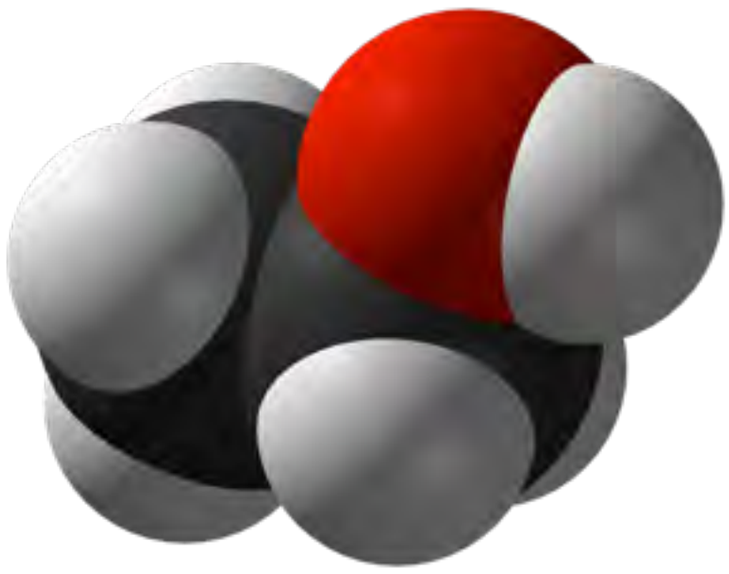
松本 正和

岡山大学 大学院自然科学研究科

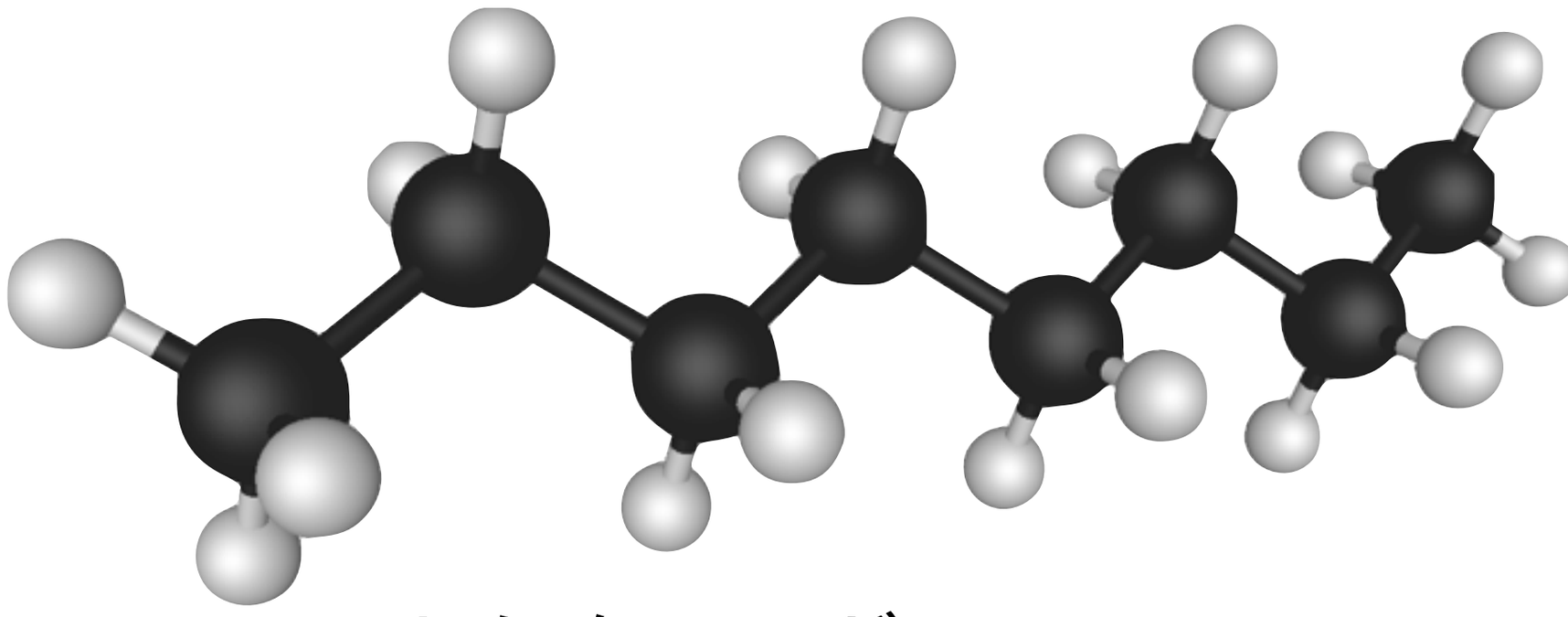
化学 = 分子の学問

水

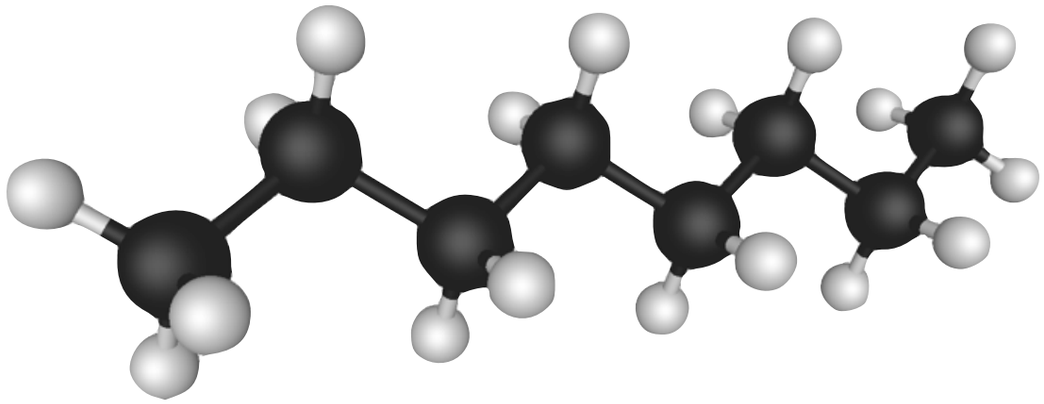
水

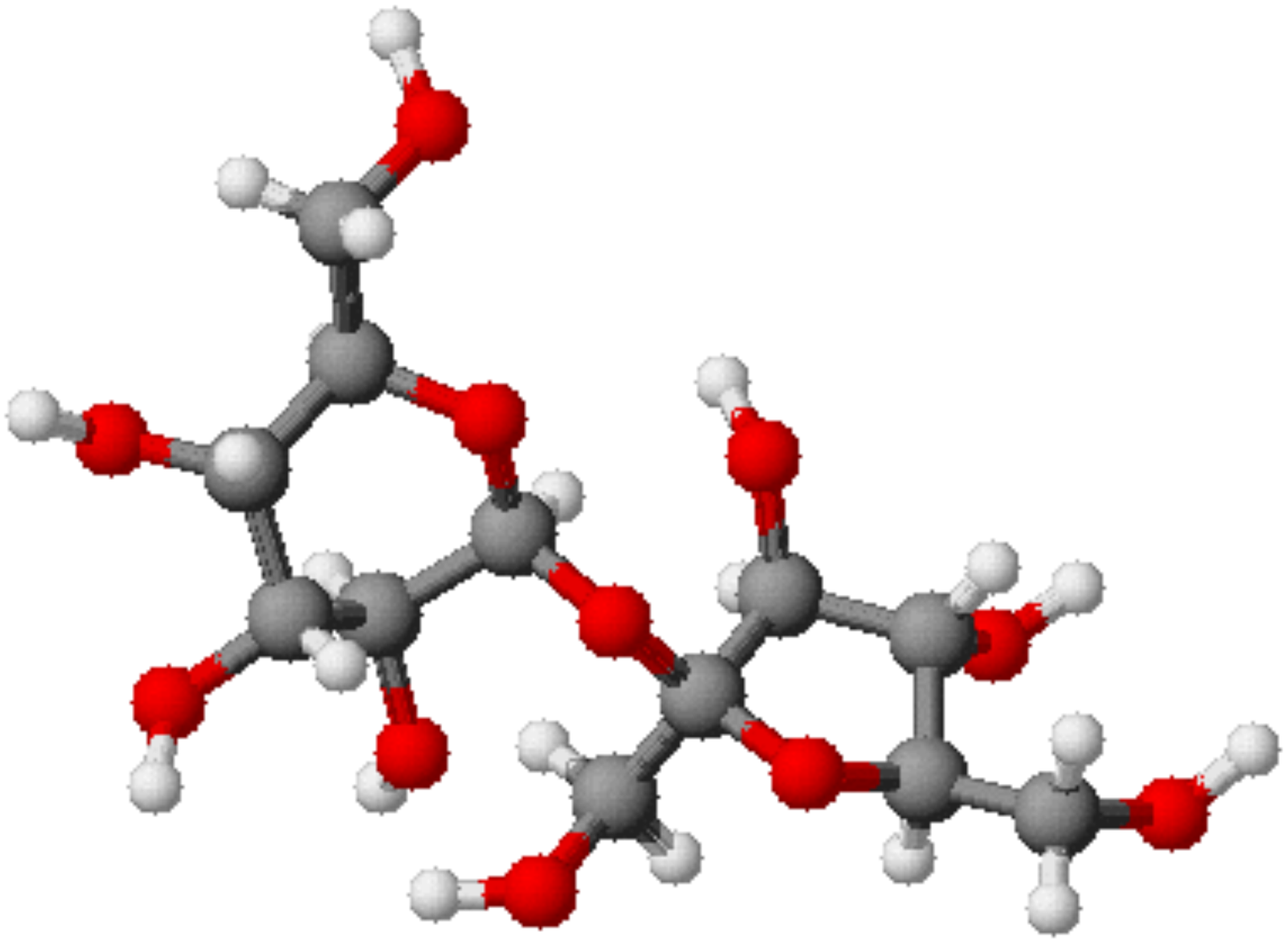


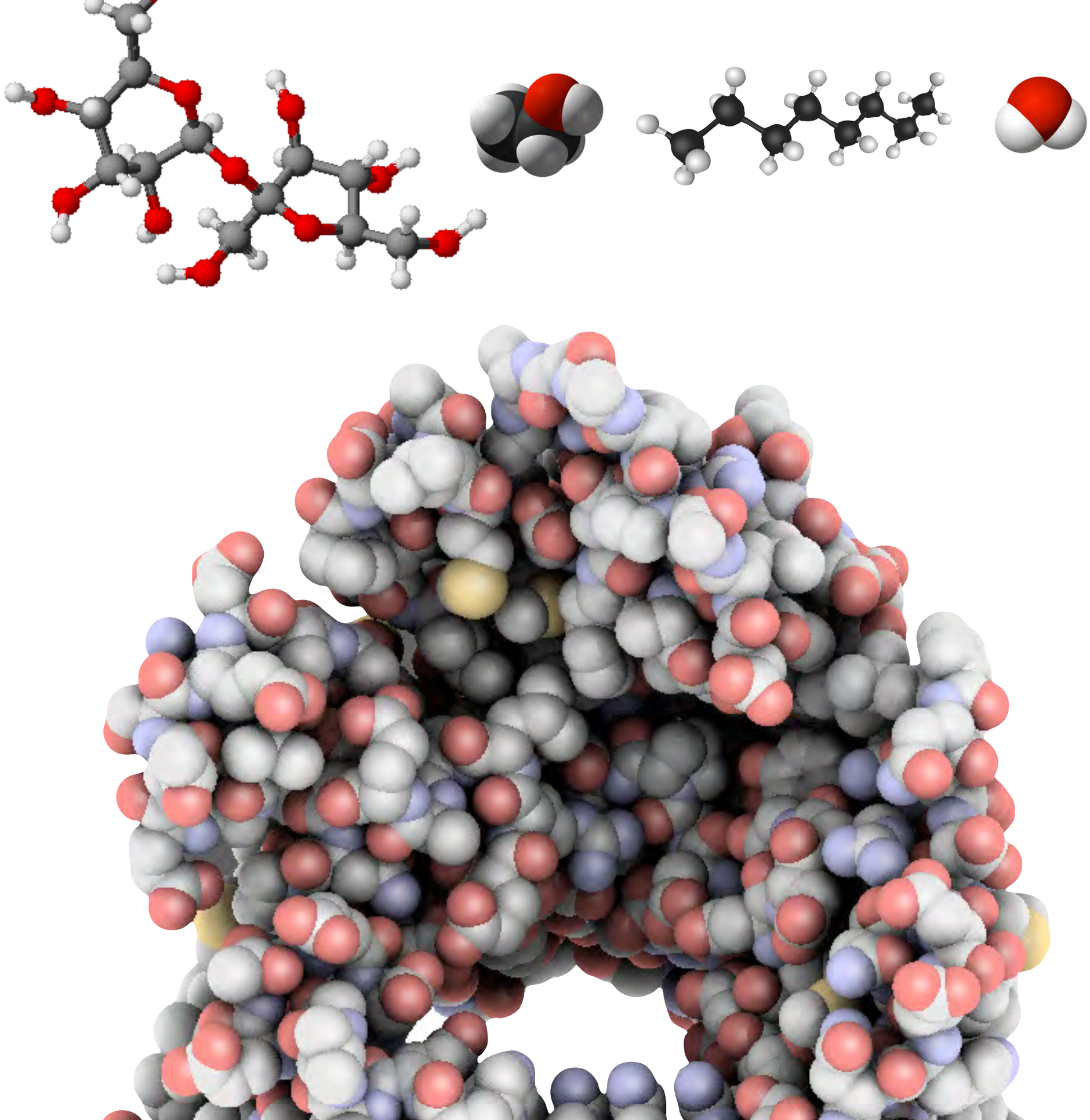
エタノール

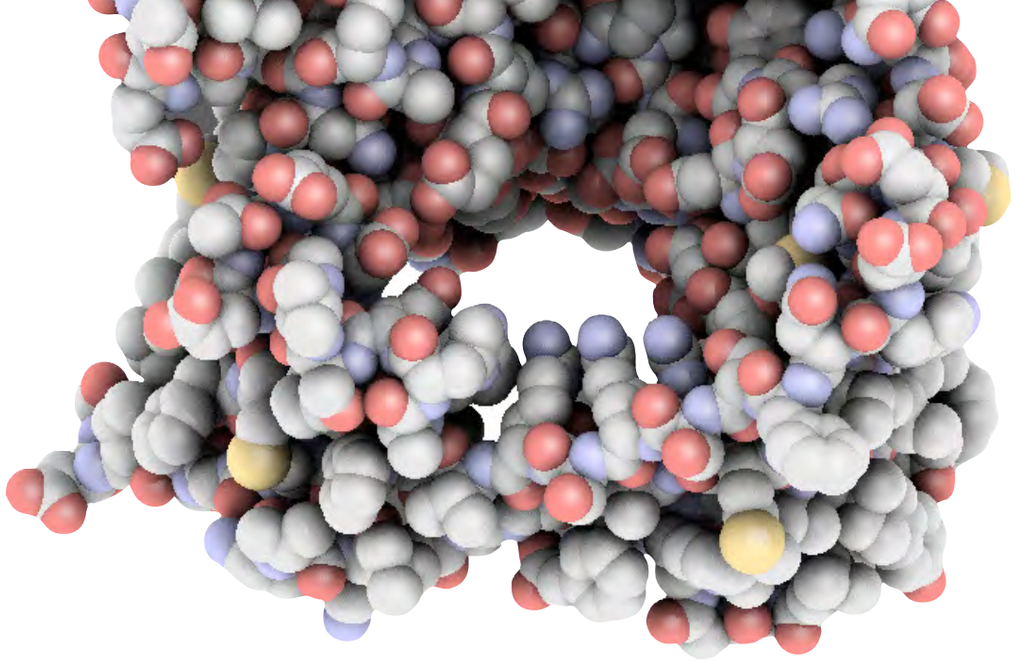


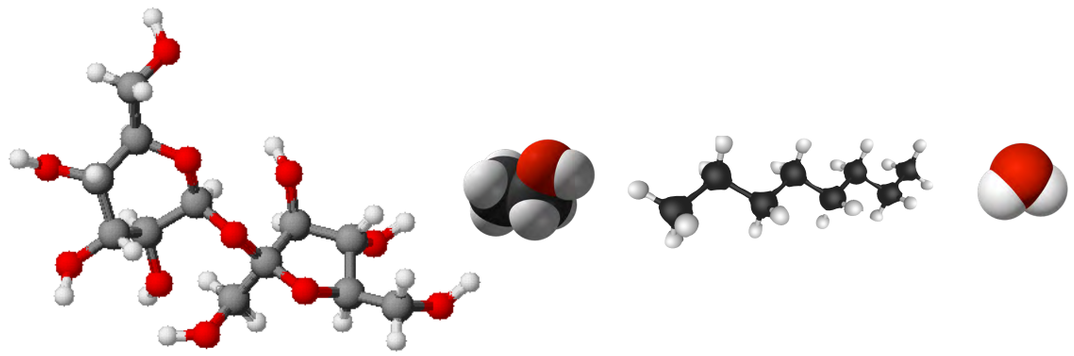
オクタン (ガソリン)

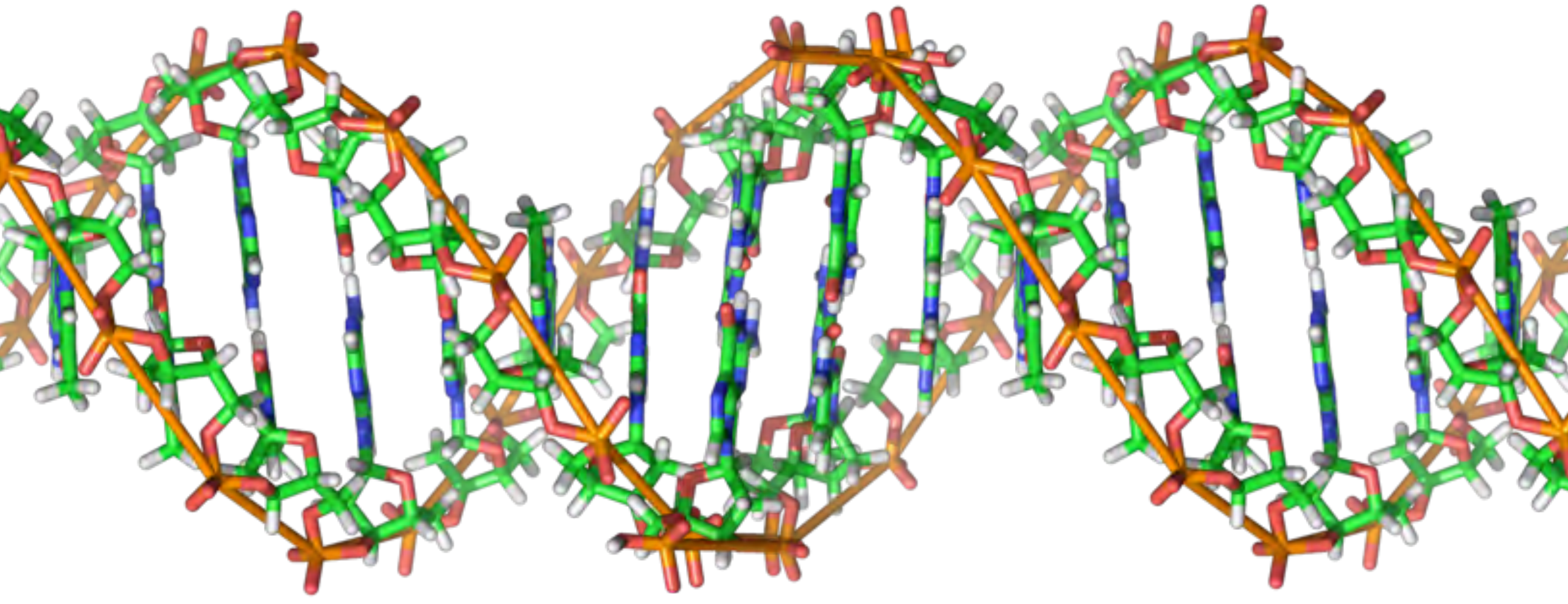








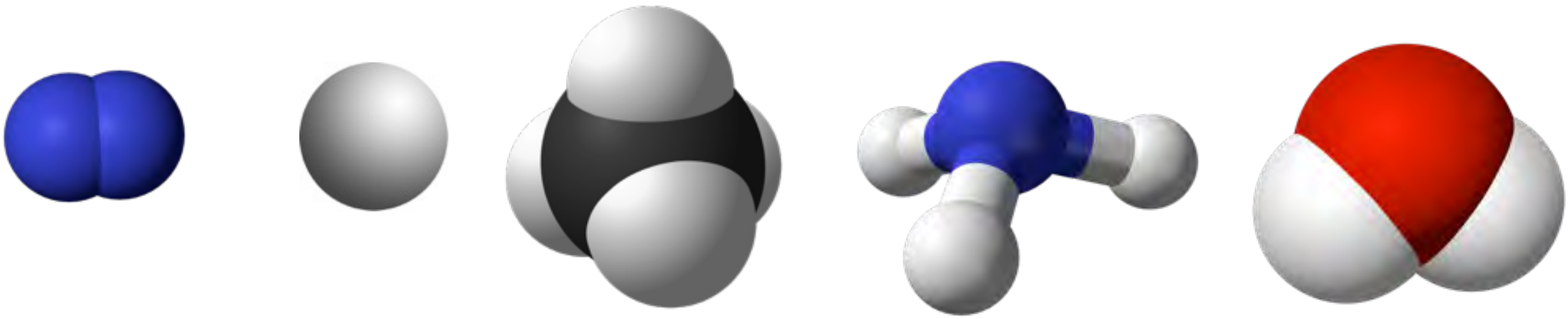




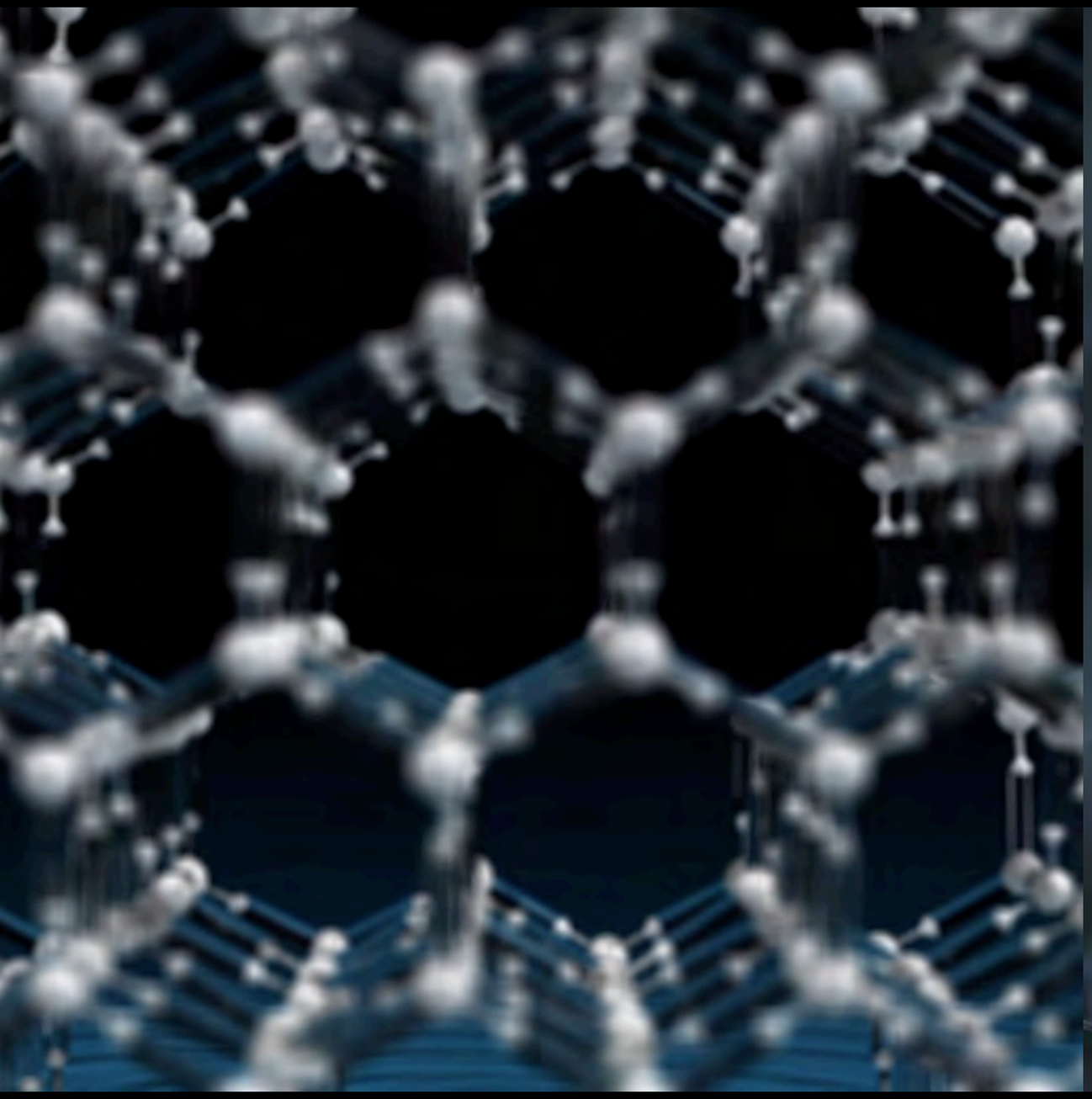
元素周期表

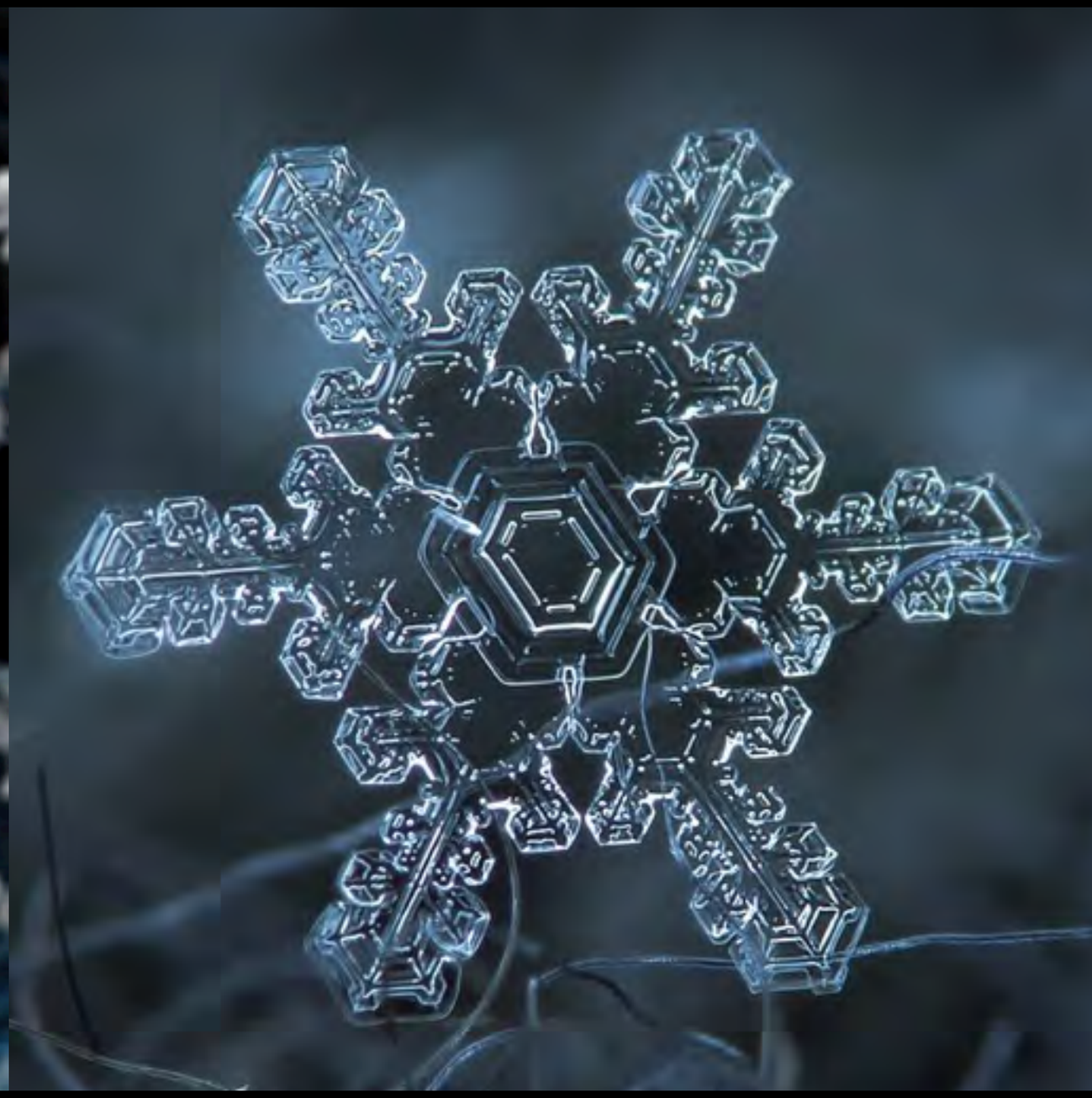
1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57~71 La-Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89~103 Ac-Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn						

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



水素　ヘリウム　メタン　アンモニウム　水





?

光学顕微鏡

"Microscope" by Original uploader was Zephyris

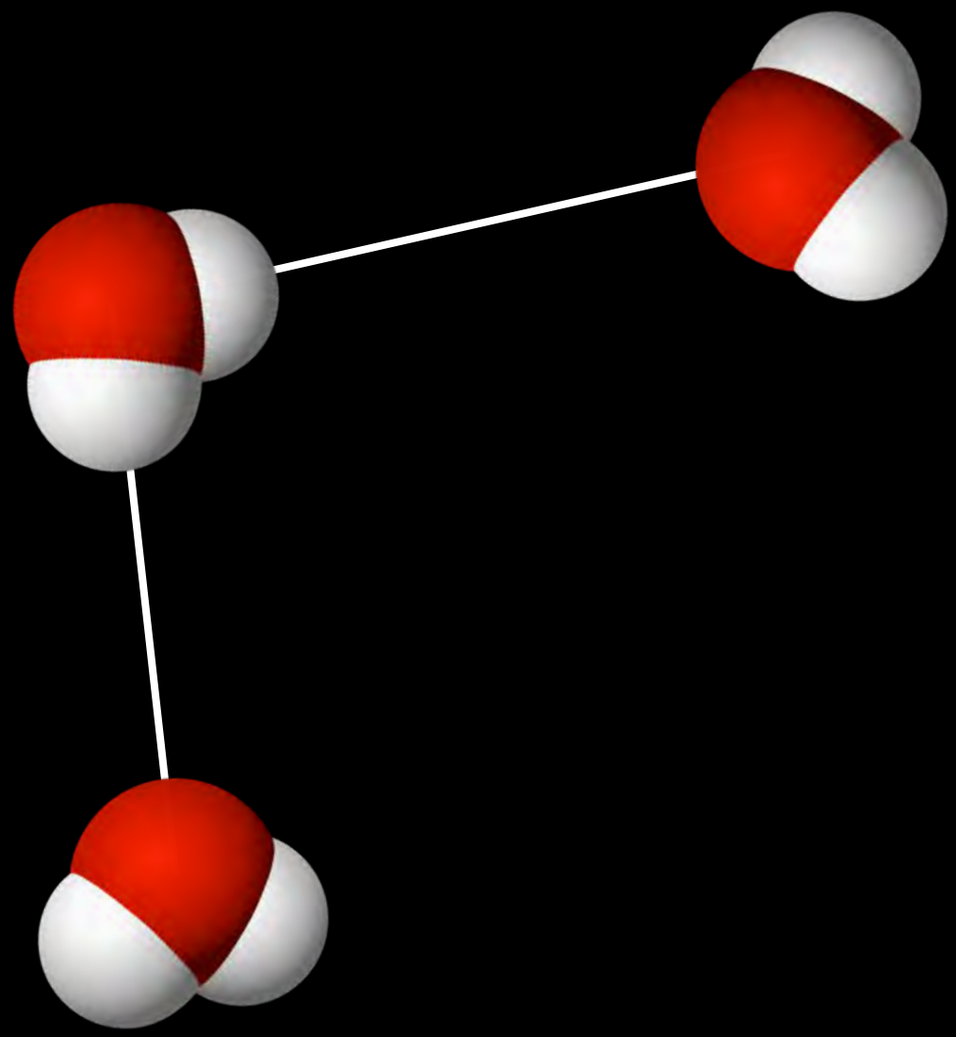
電子顕微鏡

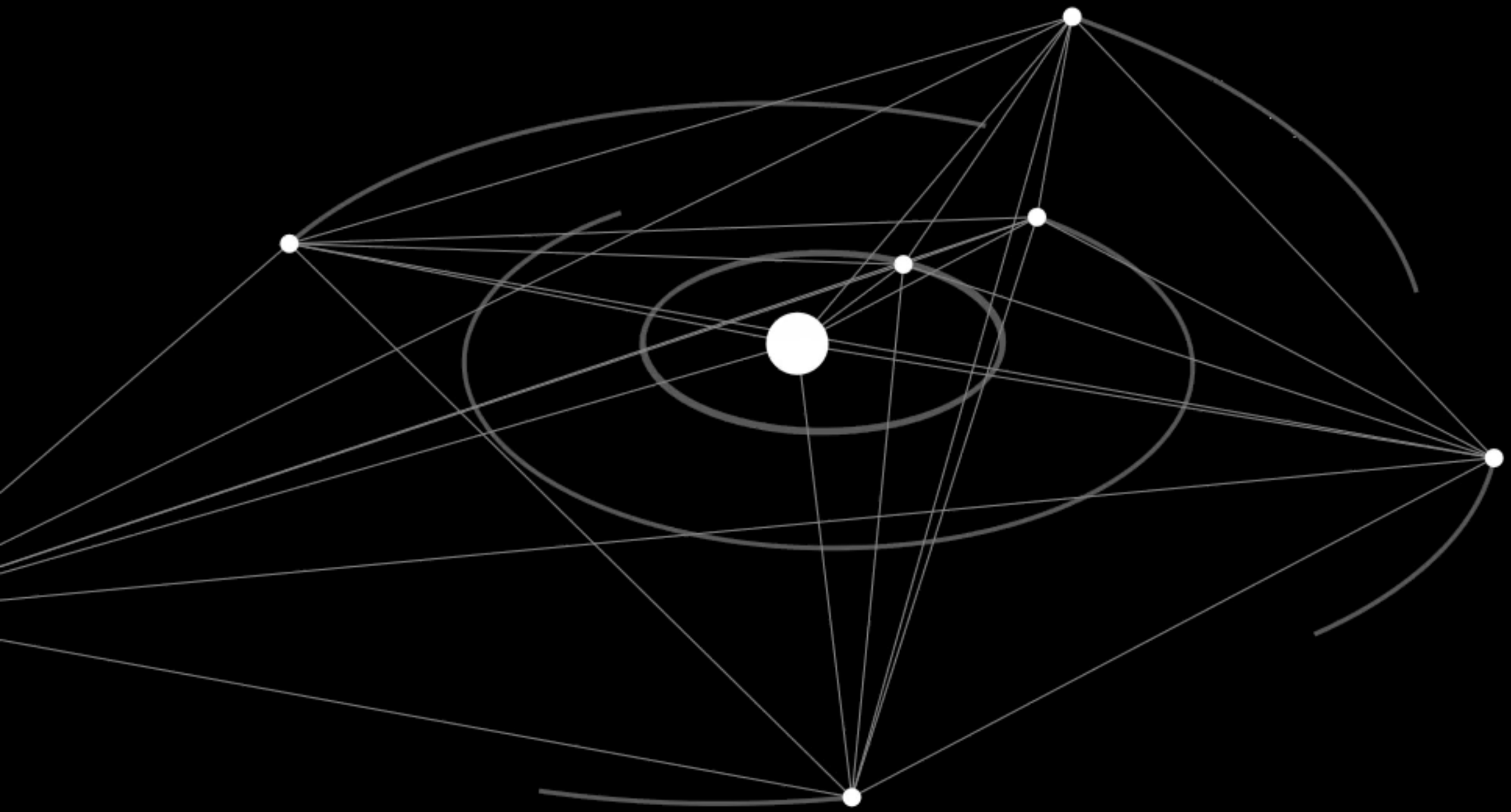
"Microscope-IMG 0518" by Work by Rama

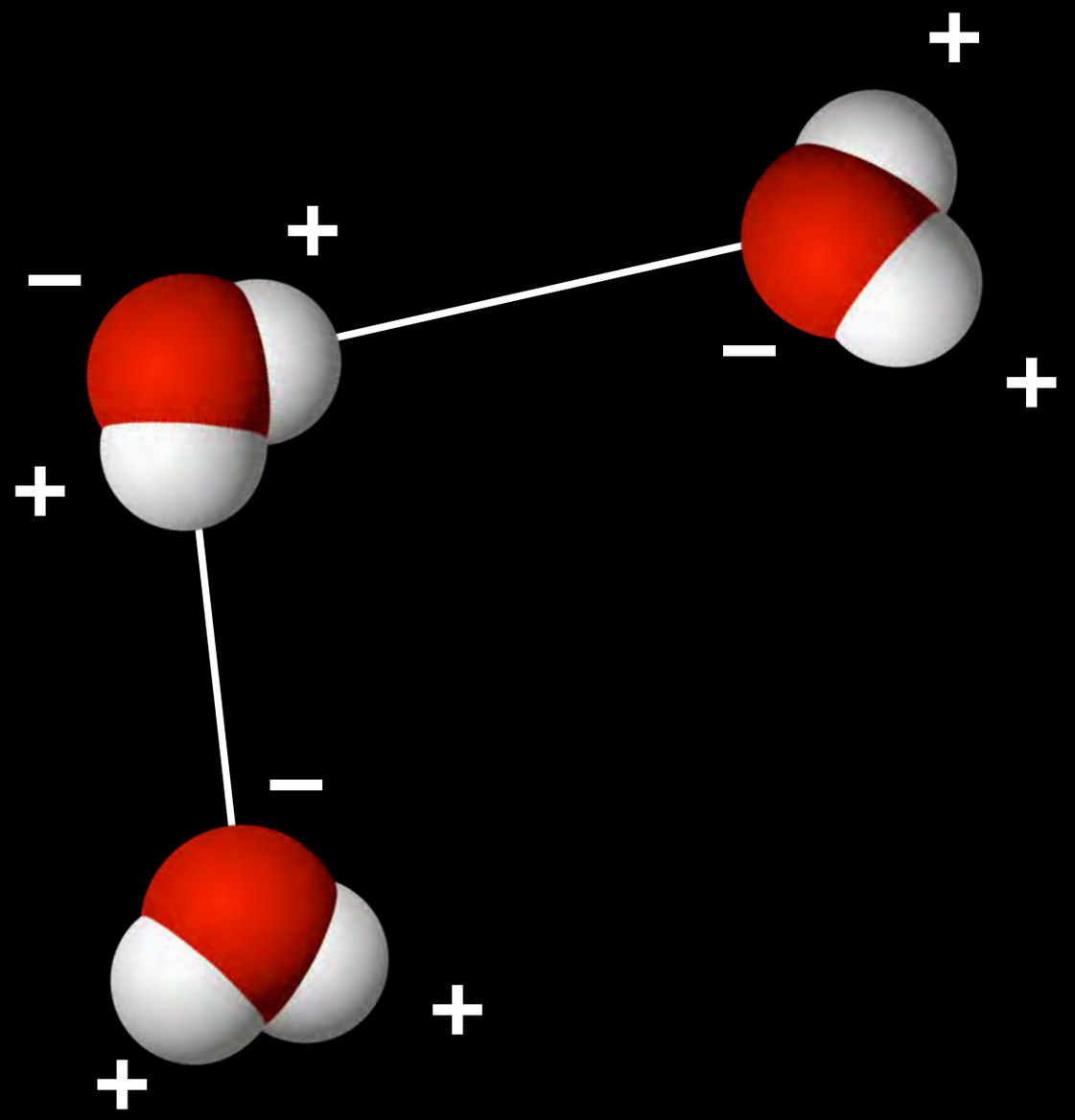
原子間力顕微鏡

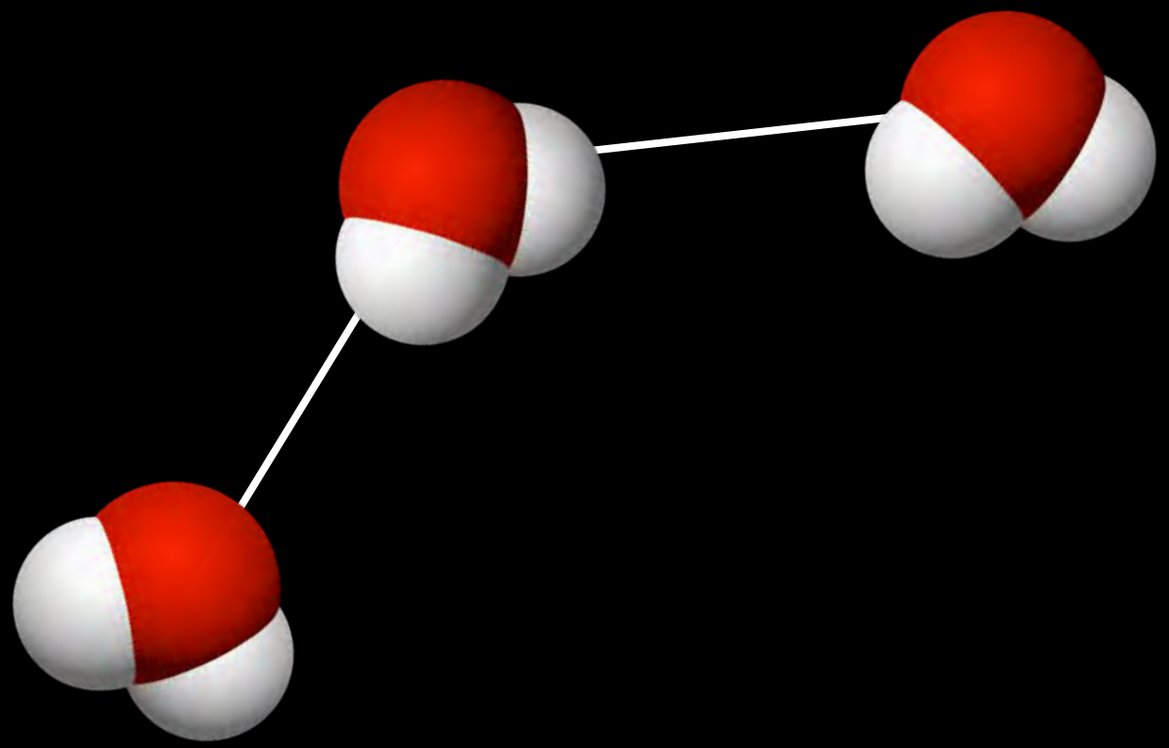
"STM at the London Centre for Nanotechnology" by O. Usher (UCL MAPS)

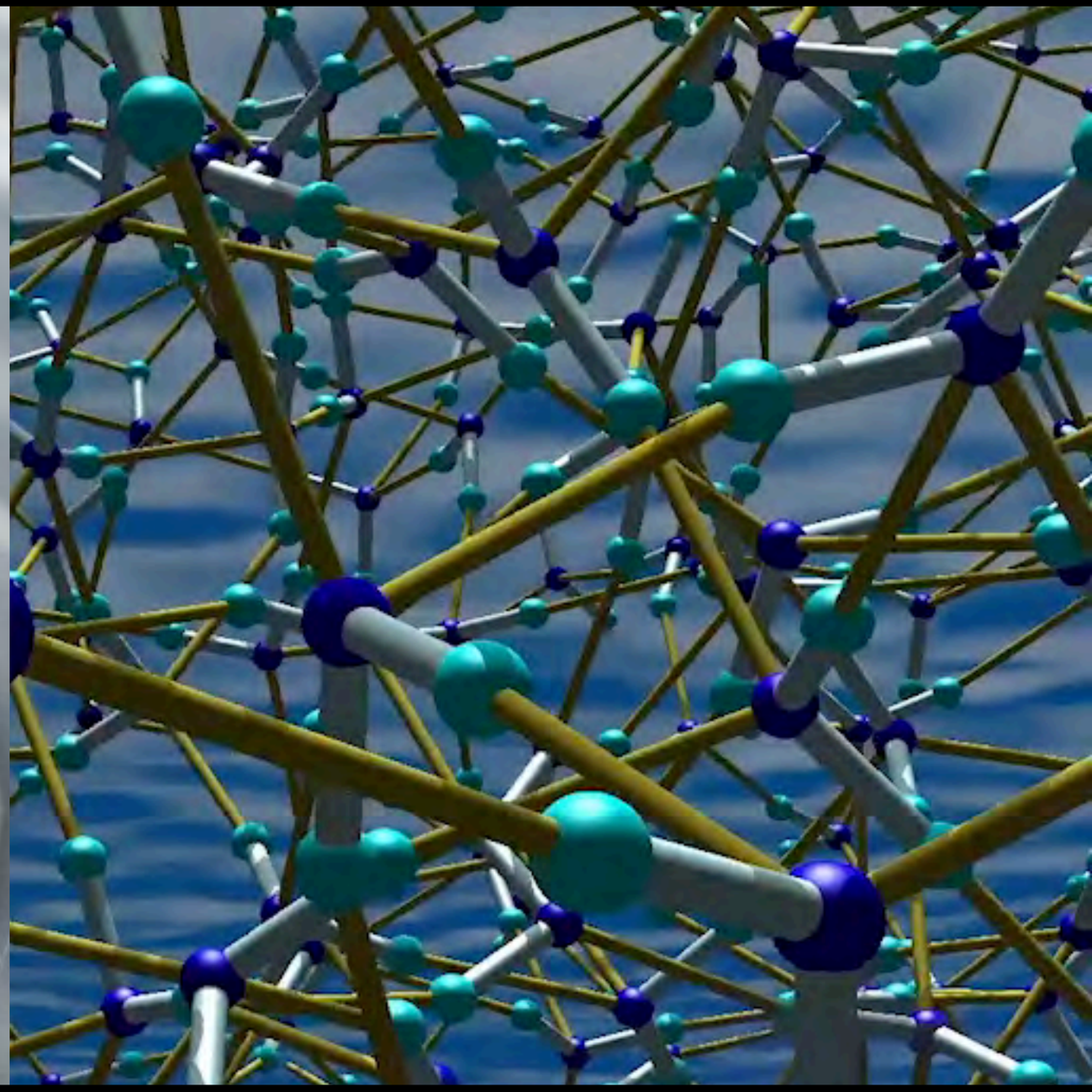
動く水分子が見える顕微鏡は ない

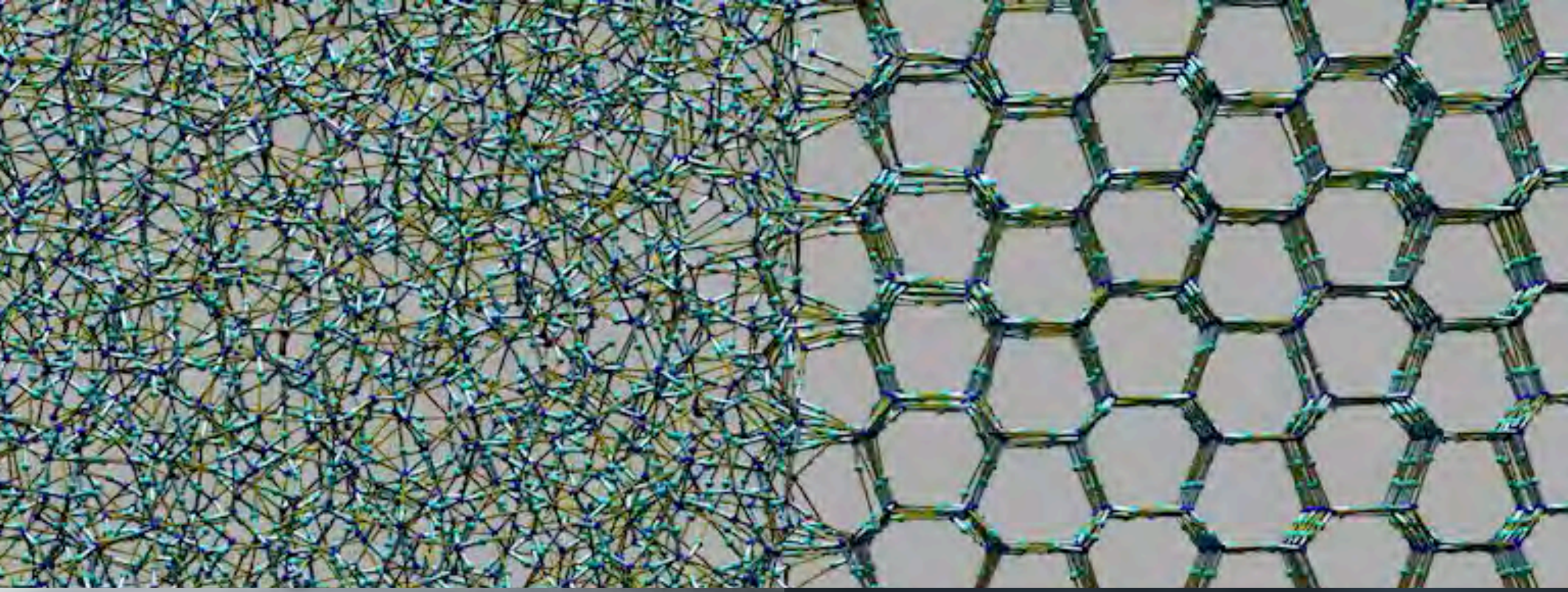


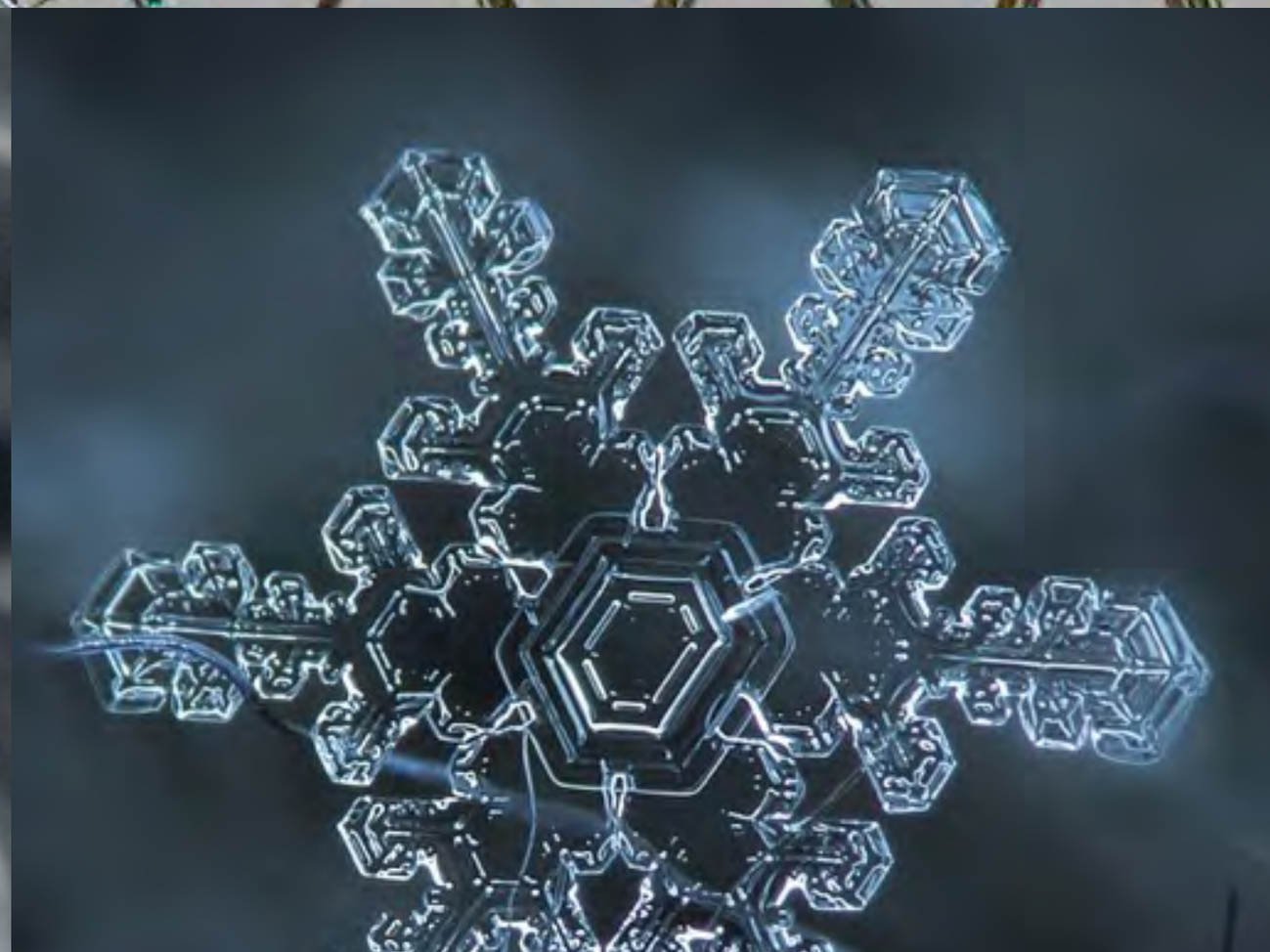


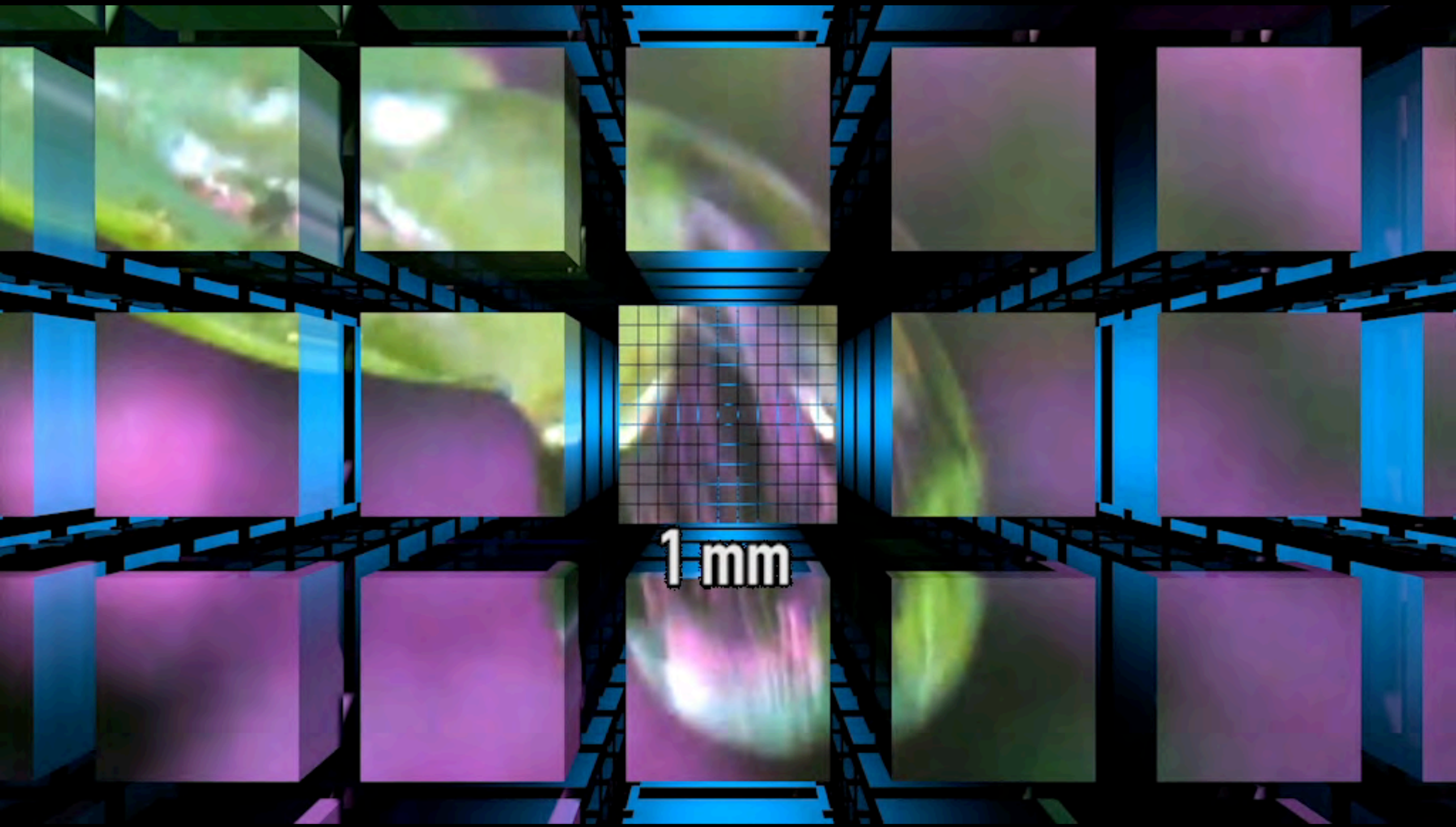


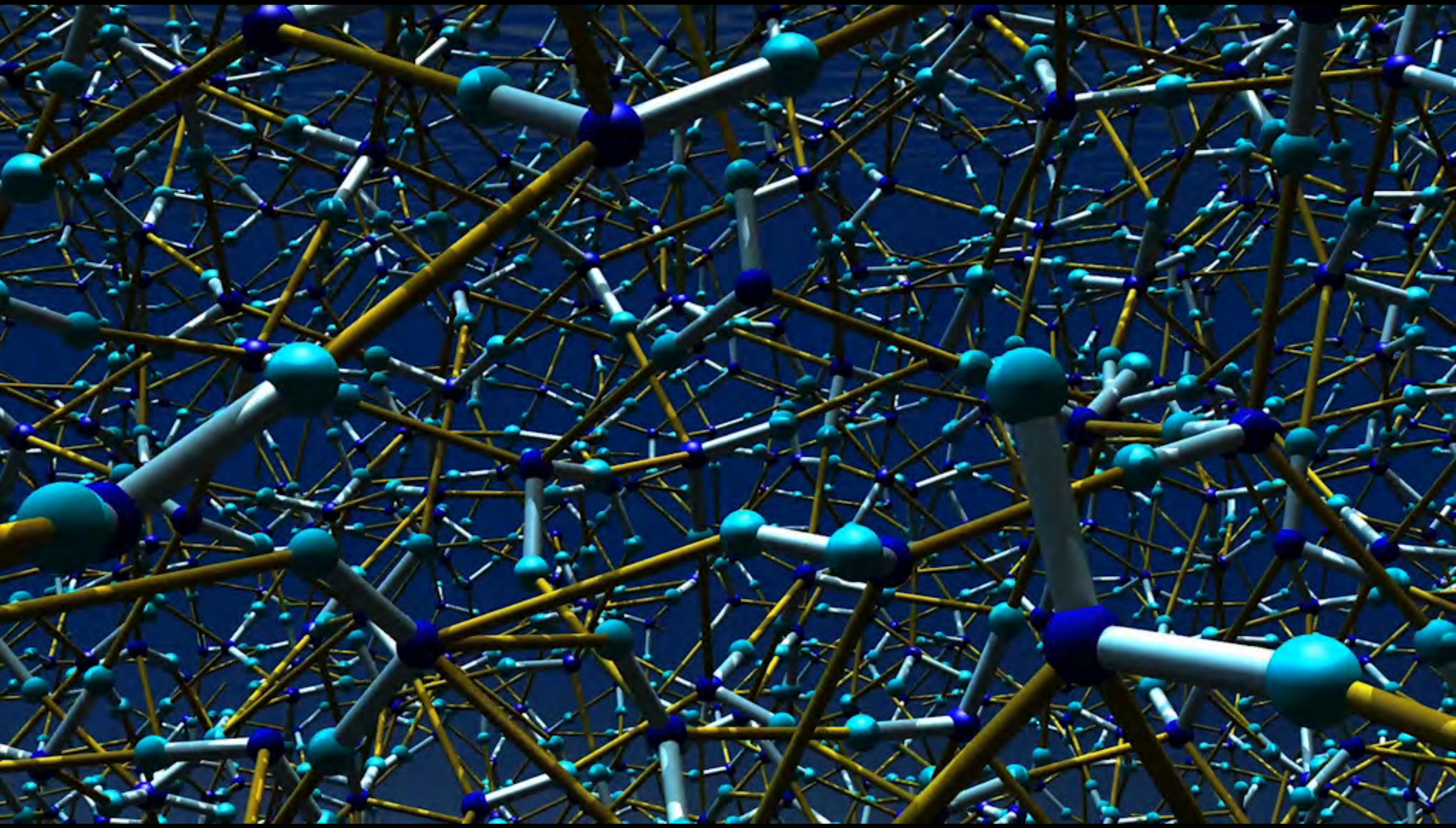






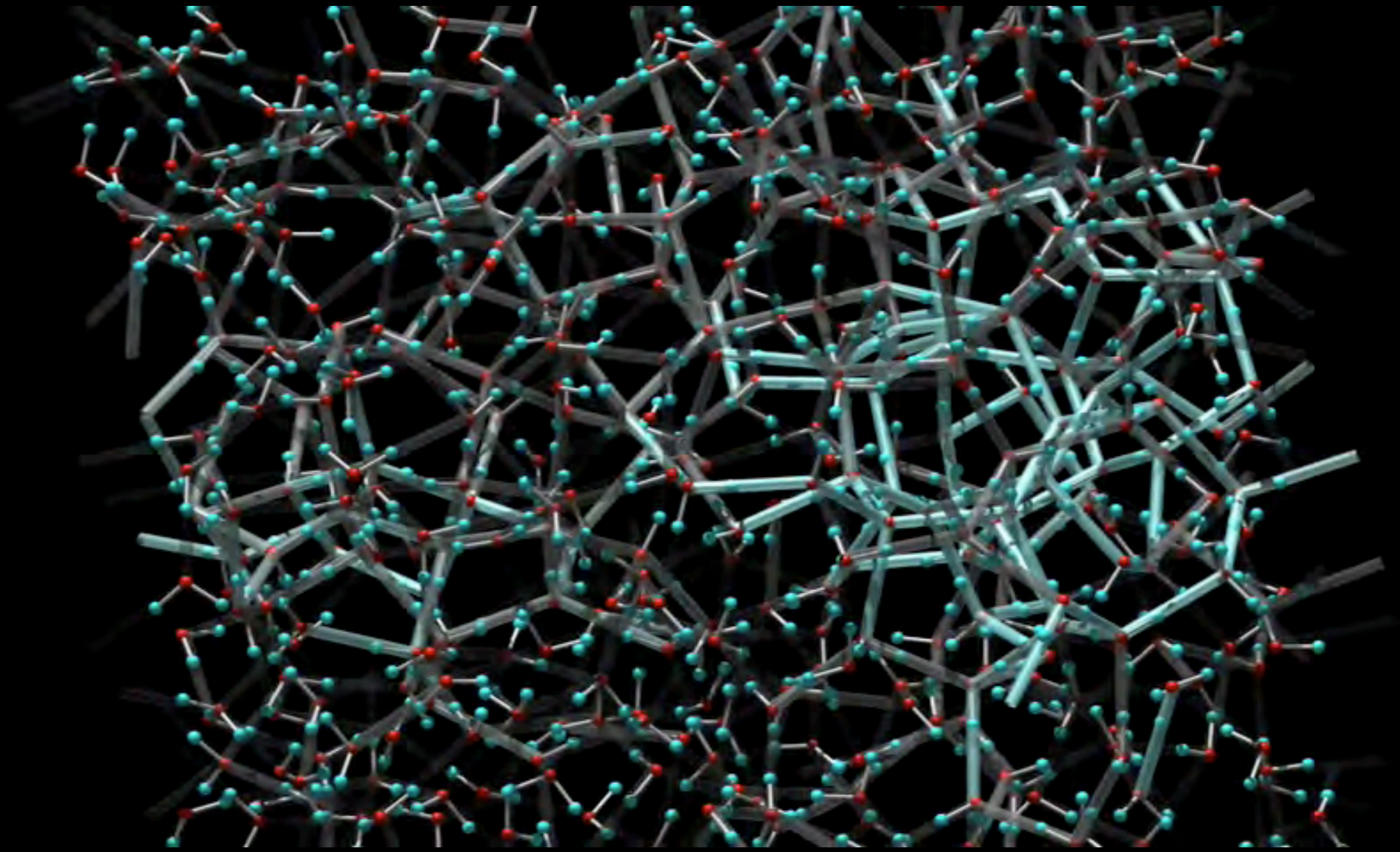



1 mm

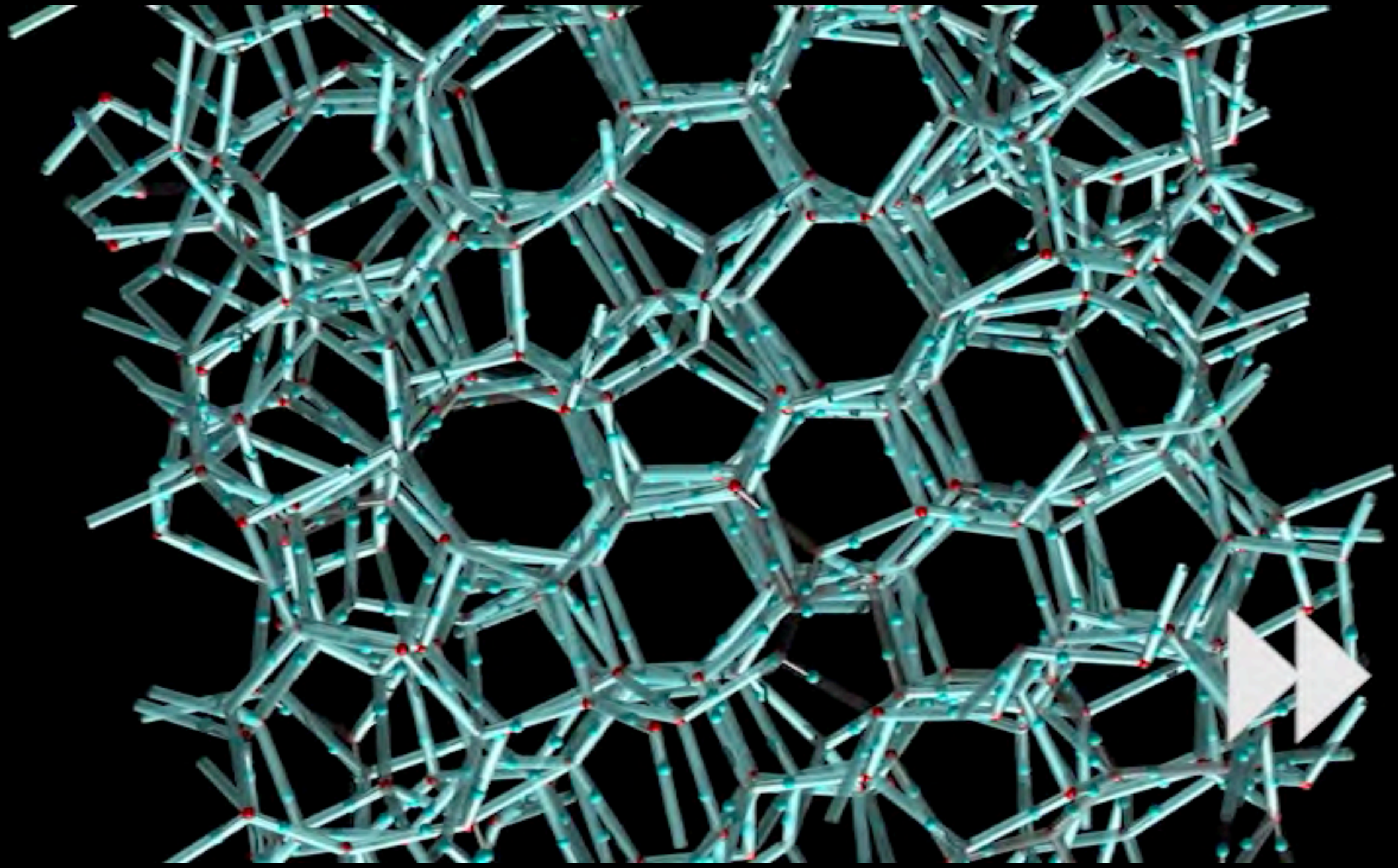


サイズを一億倍に、
時間を一兆倍にひきのばす「**超顕微鏡**」

“Supercooled Water Instantly Freezing”
by Seattle Food Geek Videos
https://www.youtube.com/watch?v=zOt53yKB6ZI

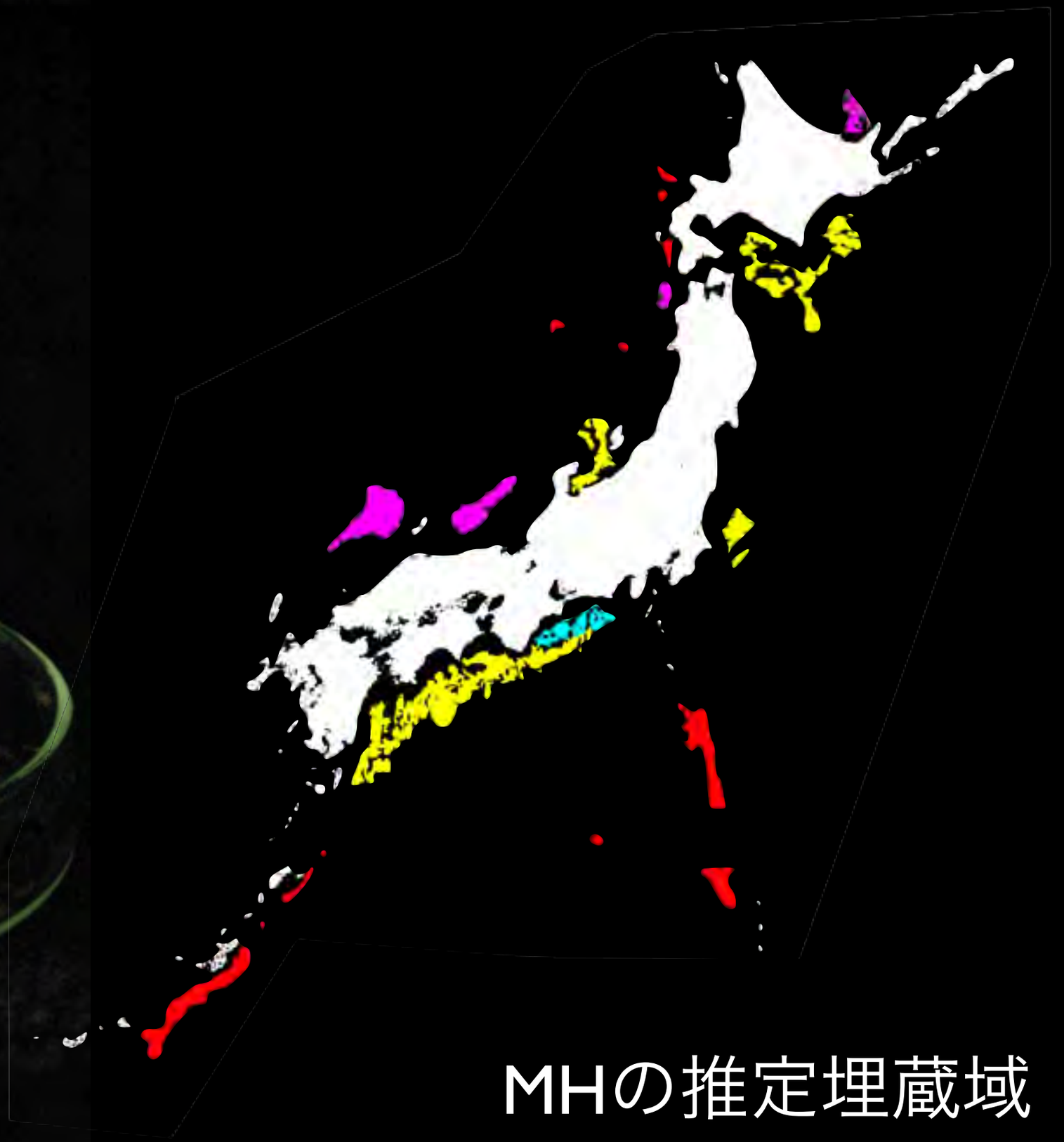


松本 (2002)



メタンハイドレート

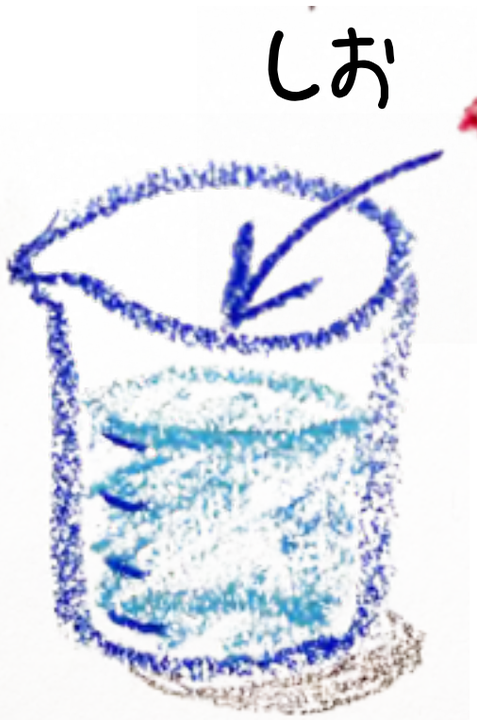
“燃える氷”



MHの推定埋蔵域

メタンハイドレートのふしぎ

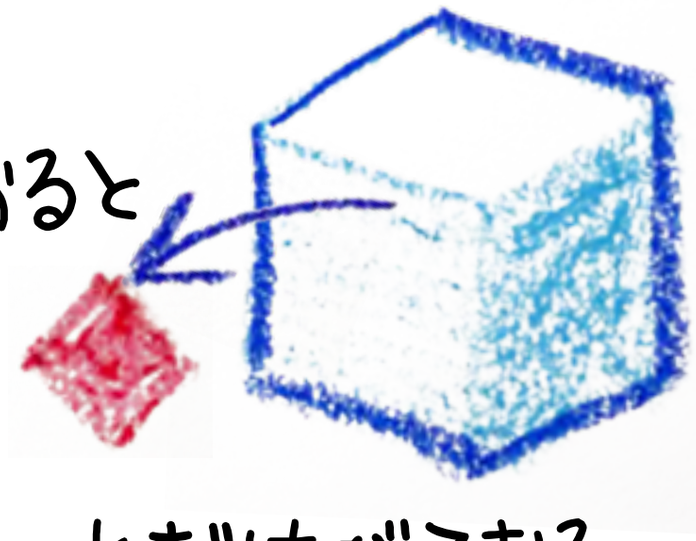
しお



とかすと

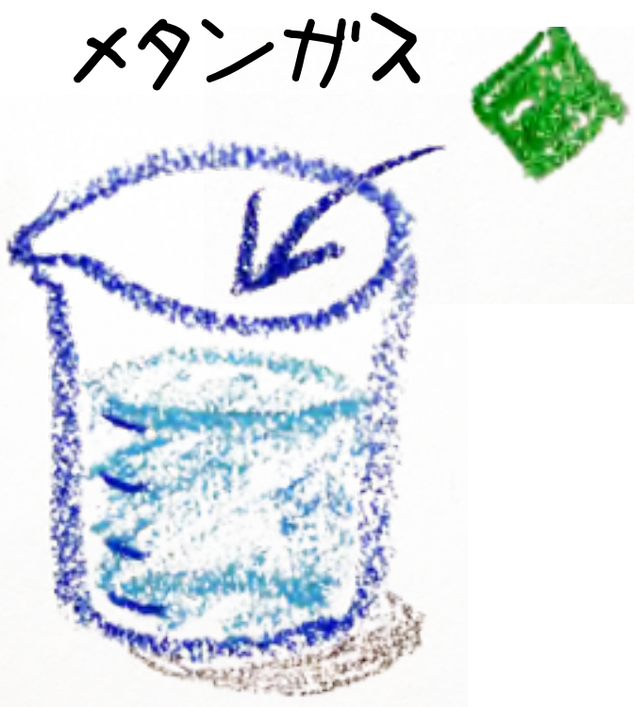
しお水

こおると



水だけがこおる

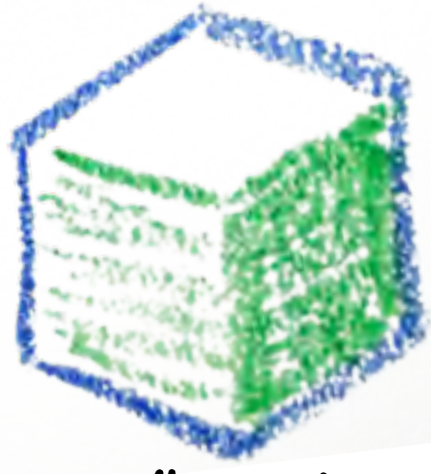
メタンガス



とかすと

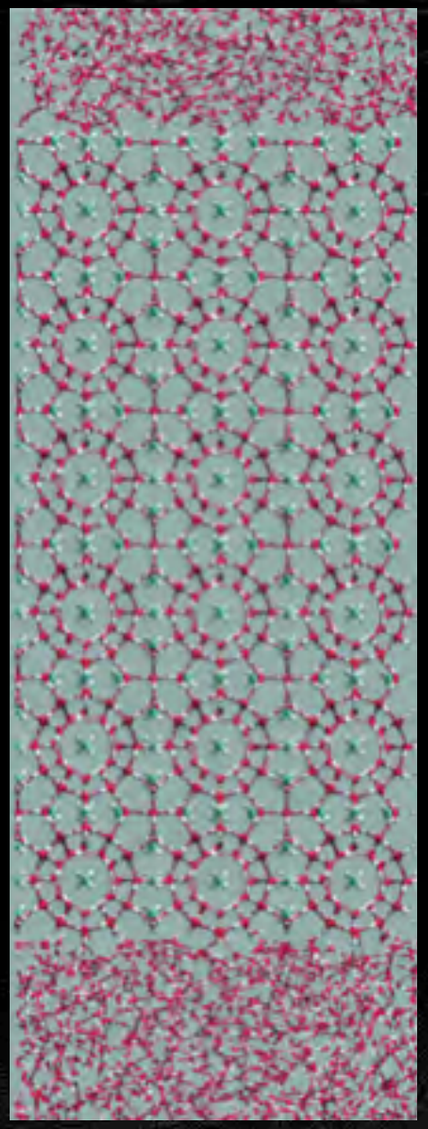
ほとんどとけない

こおると

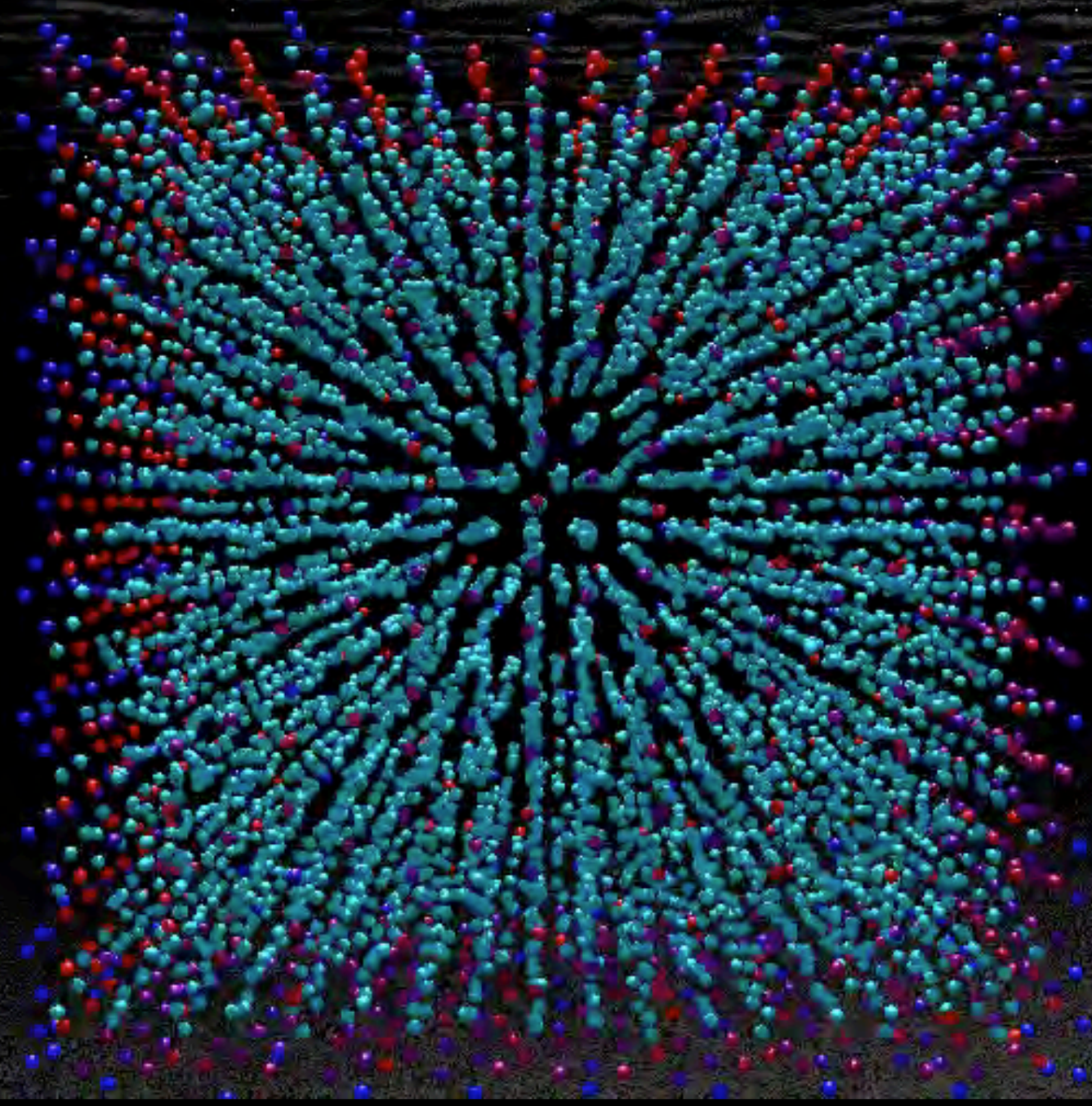


１万ばい とけて
いっしょにこおる！

10 ナノメートル = 0.000 01 mm



S. Alavi et al (2010)



K computer

矢ヶ崎 (岡山大学)

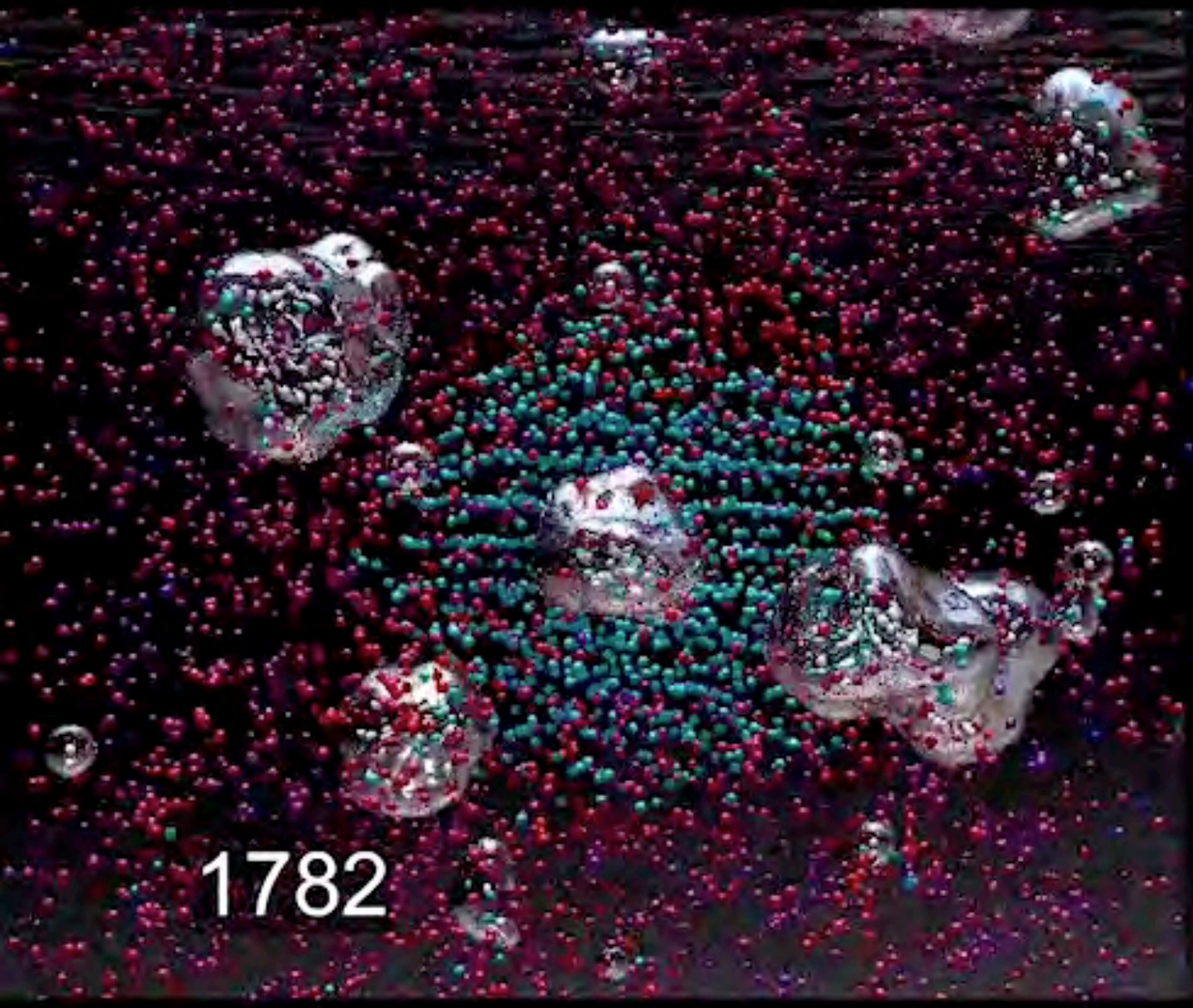
(2014)

水中のメタンハイドレートの分解

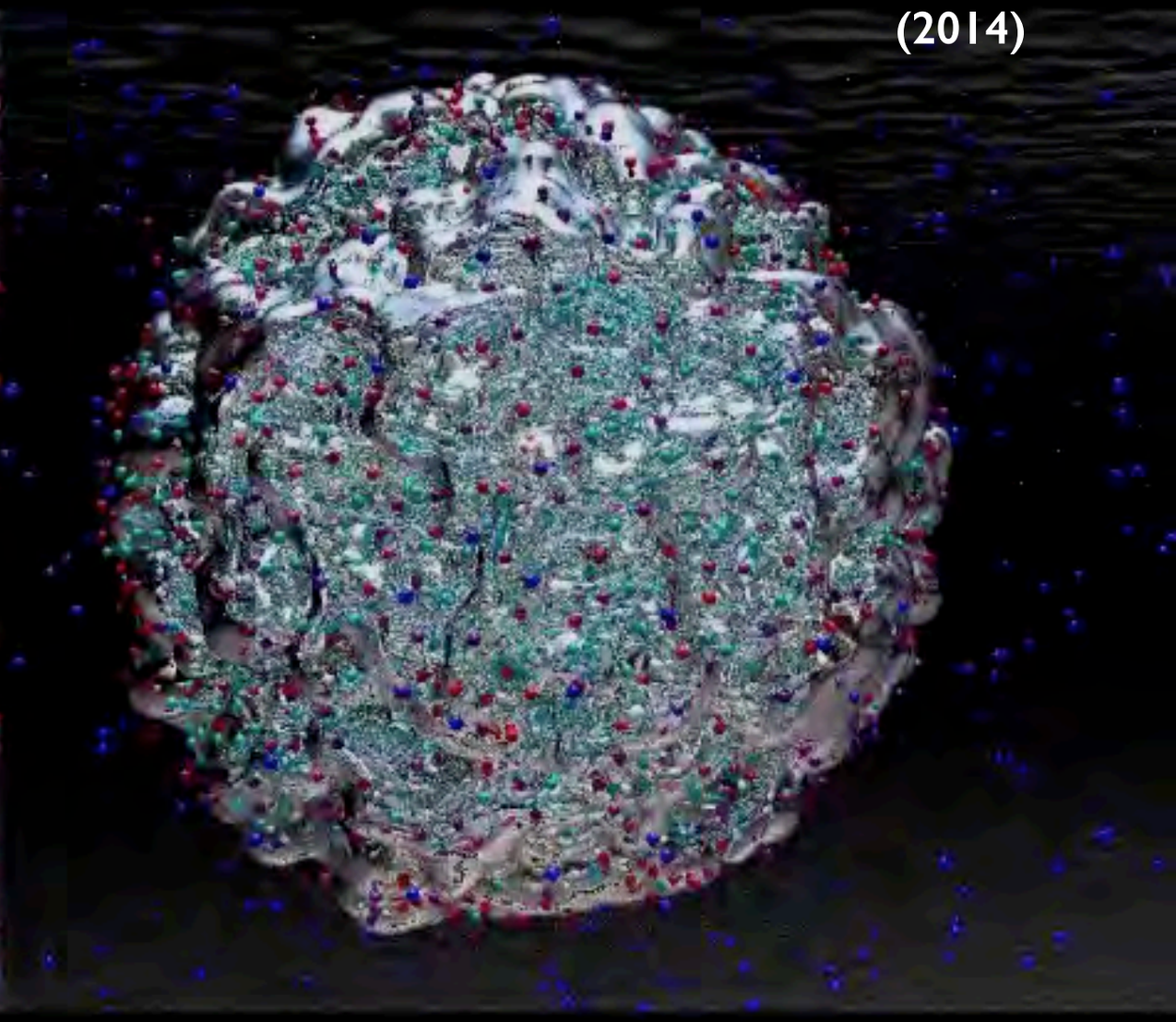
K computer

矢ヶ崎 (岡山大学)

(2014)



淡水中



塩水中

数百万個の分子を、一つ一つ見分けつつ、
時間を自在に巻き戻して現象を観察できる

「超顕微鏡」

超顕微鏡の性能を決めるのは、

コンピュータの速さ

目に
見える
大きさ

サイズ

顕微鏡 (実験) の 進化

超顕微鏡 (コンピュータ) の 進化

分子の
大きさ

みじかい・はやい
(分子のスケール)

時間

ながい・おそい
(人間のスケール)

さいごに

「コンピュータは科学全体に資する」