

スパコンで水を研究する

シミュレーションによる水・氷・ハイドレートの科学

松本 正和

岡山大学 異分野基礎科学研究所



岡山大学



なぜ、水？

- 私たちに一番身近であるだけでなく、地球や宇宙の規模でも大量に存在する
- 変わった性質をたくさんもっている
- 今の計算機の性能でなんとか扱える

水はどこにもでもある

- 水は多くの科学分野に深く関わる
 - 生物の体の中の水 — 生物学
 - 水の中の化学反応 — 化学
 - 凍結、融解、流動 — 物理学
 - 地表の水、地殻の水 — 地学
 - 惑星や衛星をおおう水
宇宙とともに生まれた水 — 天文学
- 単なる化学物質の一つ, ではない.

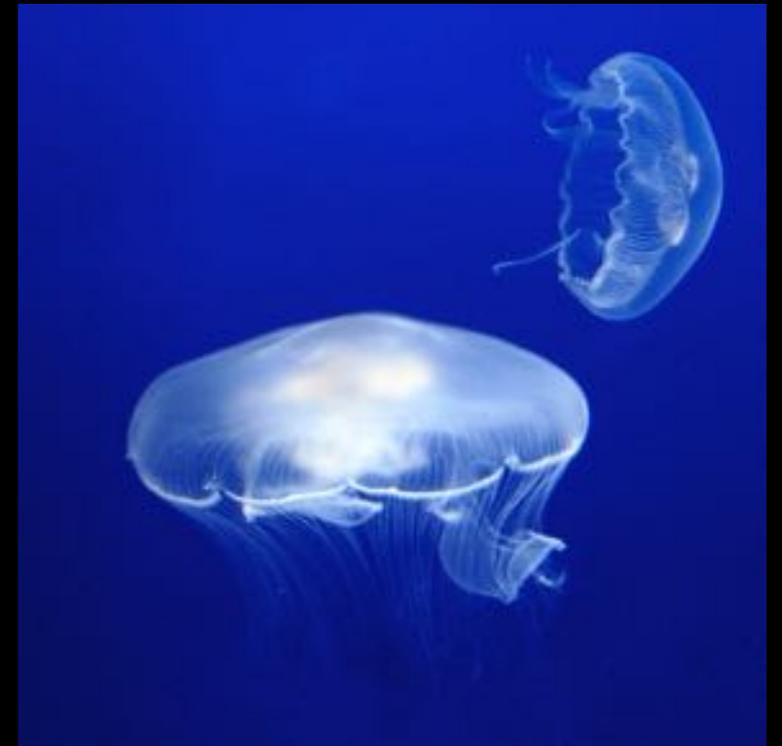
94%



60%



96%



液体



私たちにとって、液体といえば水。

しかし、水は普通の液体ではない

瀬戸内海



倉敷

なぜ、水？

- 私たちに一番身近であるだけでなく、地球や宇宙の規模でも大量に存在する
- **変わった性質をたくさんもっている**
- 今の計算機の性能でなんとか扱える

水は凍ると膨張し、氷が水に浮く

水にはいろんな物質が溶ける。

水を冷やすと、4°Cで最も体積が小さくなり、それより冷やすと逆に膨張する。

表面張力が大きく、アメンボが水面を歩ける。

まだまだほかにも.....



Wikipedia

水の変わった性質

1. 融点が高い。

2. 沸点が高い。

3. 臨界温度が高い。

4. 表面張力が大きい。※土壌の保水能力が高い。※高い樹木でも水を吸い上げることが可能。

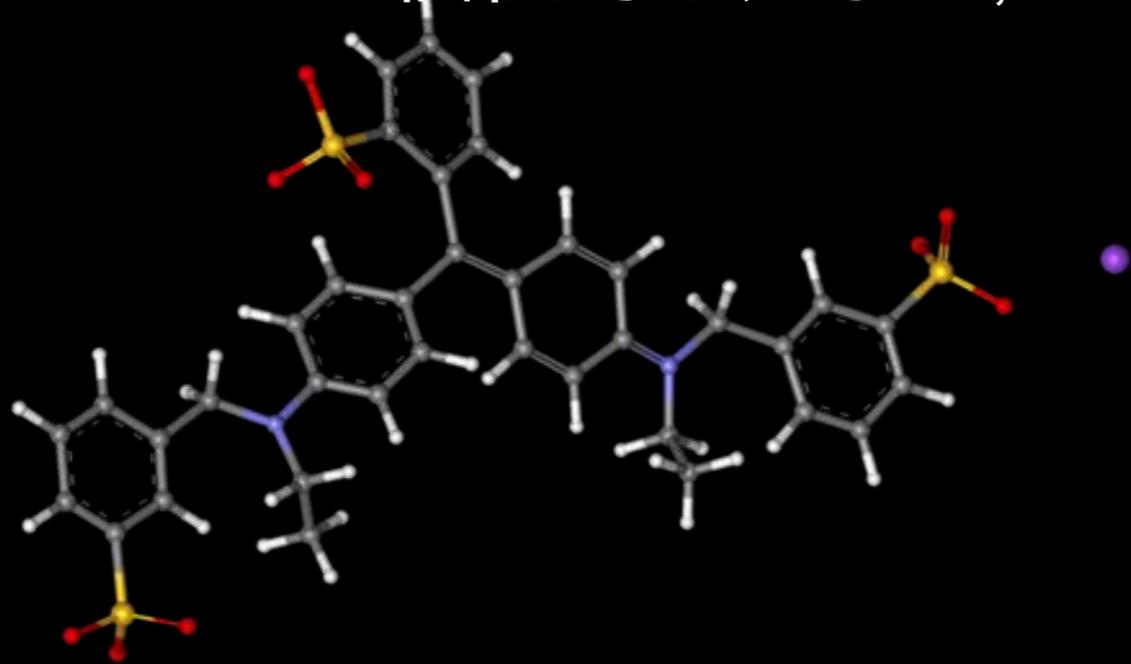
5. 粘度が大きい。

6. 気化熱が大きい。※蒸発する時にたくさん熱を奪う。※汗をかくことで体温調節できる。

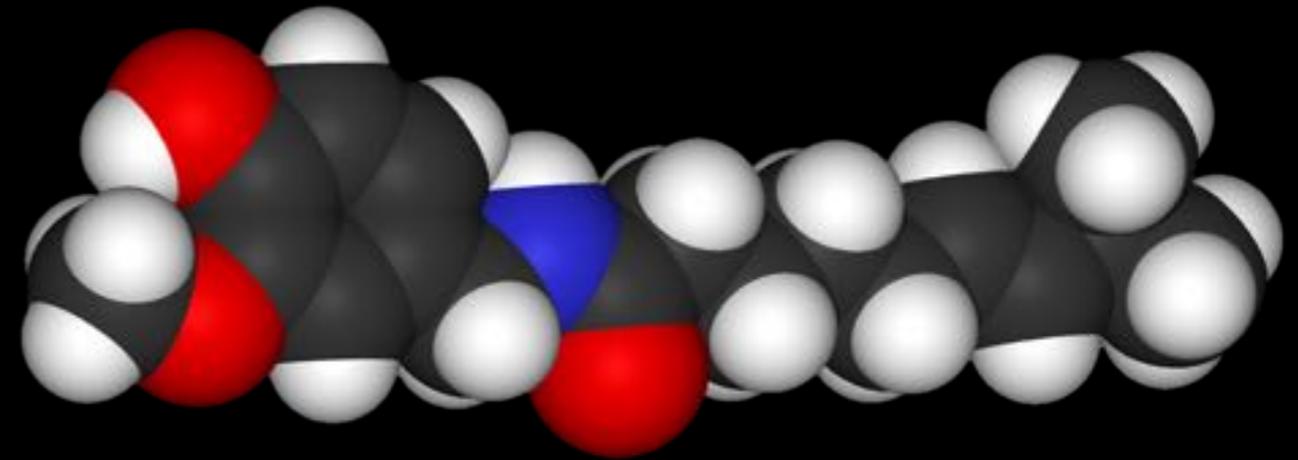
なぜ水にはこんな性質があるの？

7. 融ける時に収縮する/凍る時に膨張する

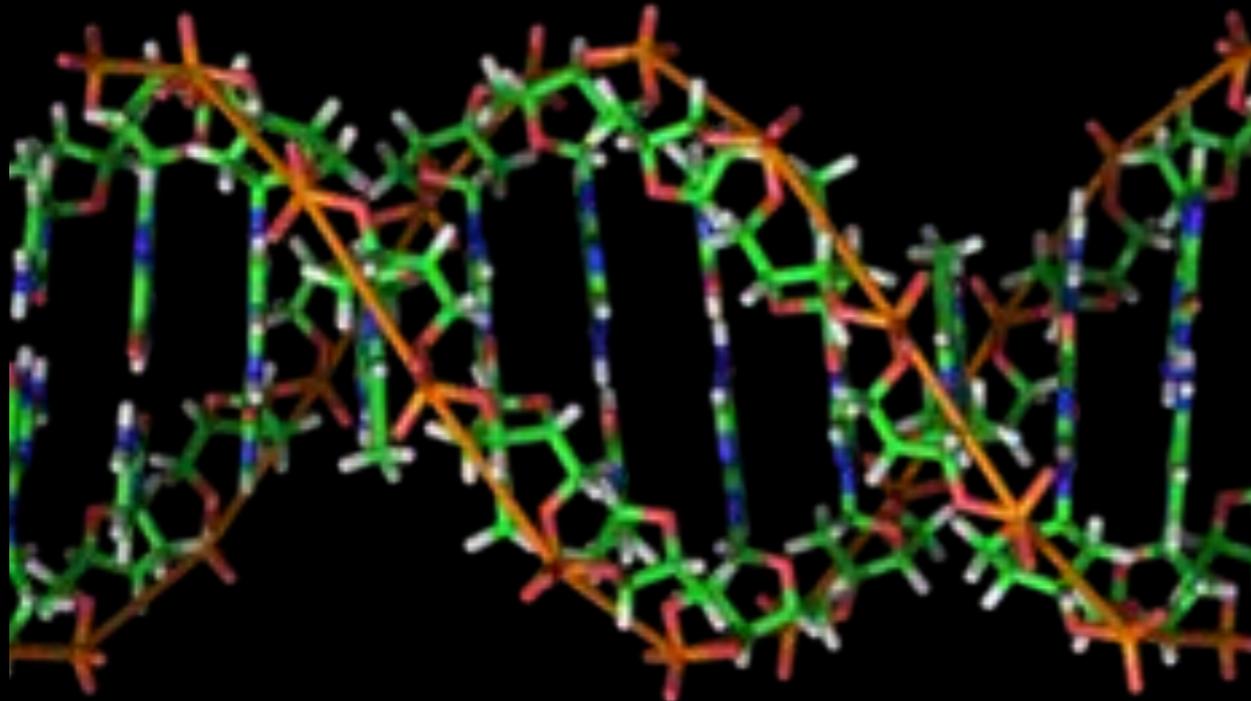
個性的な分子は、それぞれ独特の性質を持つ



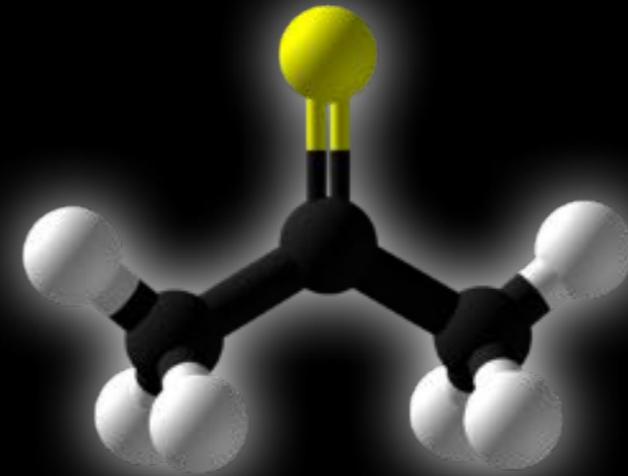
青い分子 $C_{37}H_{34}N_2Na_2O_9S_3$



辛い分子 カプサイシン

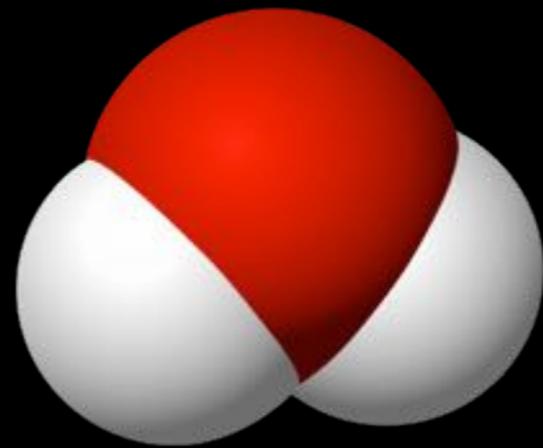


情報を記録する分子 DNA



臭い分子 チオアセトン

水分子も個性的？



水

無味無臭無色，超単純な分子



水分子は、**たくさん集まることで個性的になる**

水分子は、**たくさん集まることで個性的になる**

水分子そのものではなく、
分子の集まり方 (つながり方) が、個性を生みだす

水分子の集まり方、動き方を見たい!

「直接水分子を見ればいいのか」



光学顕微鏡

"Microscope" by Original uploader was Zephyris



電子顕微鏡

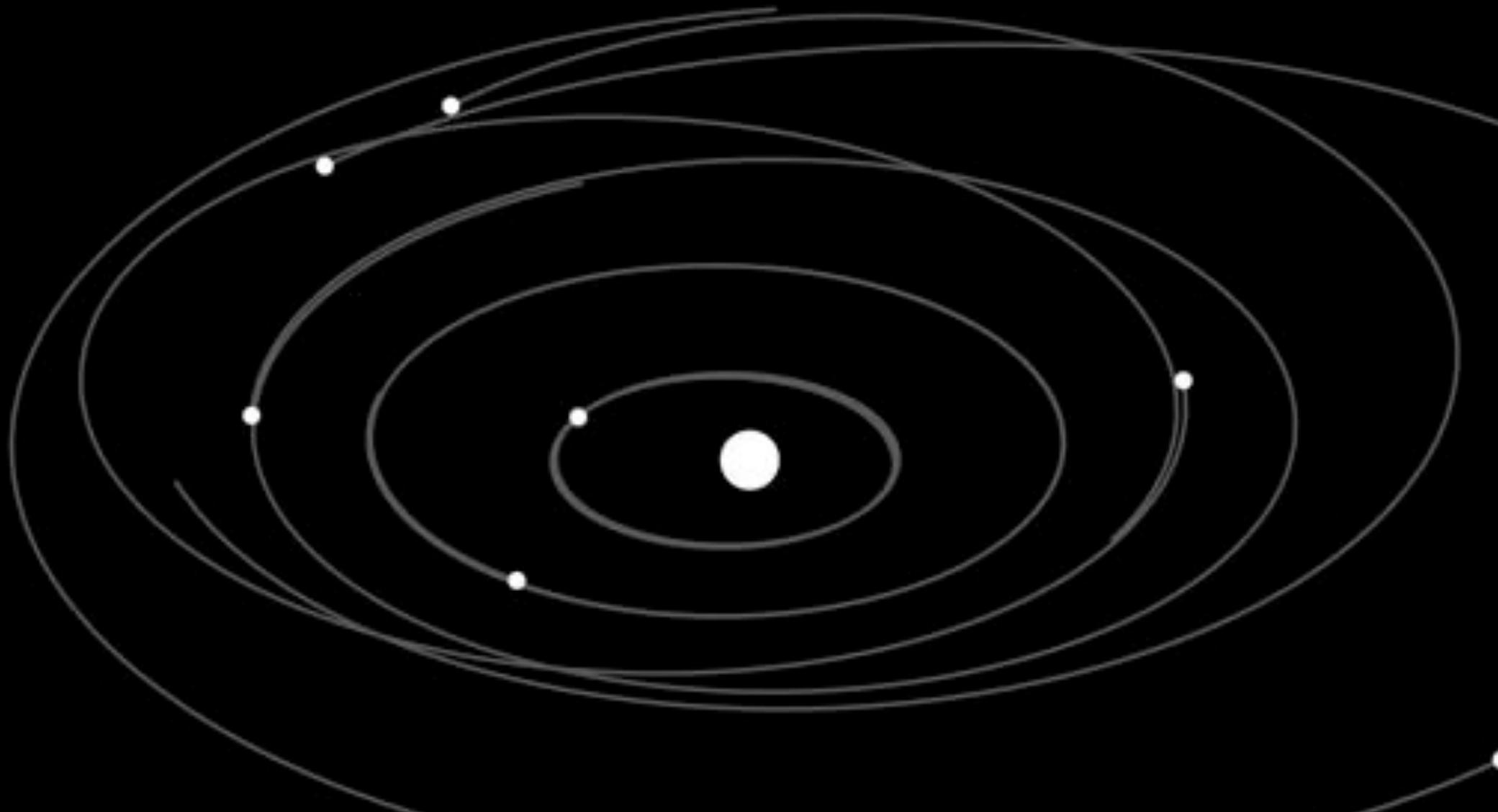
"Microscope-IMG 0518" by Work by Rama



原子間力顕微鏡

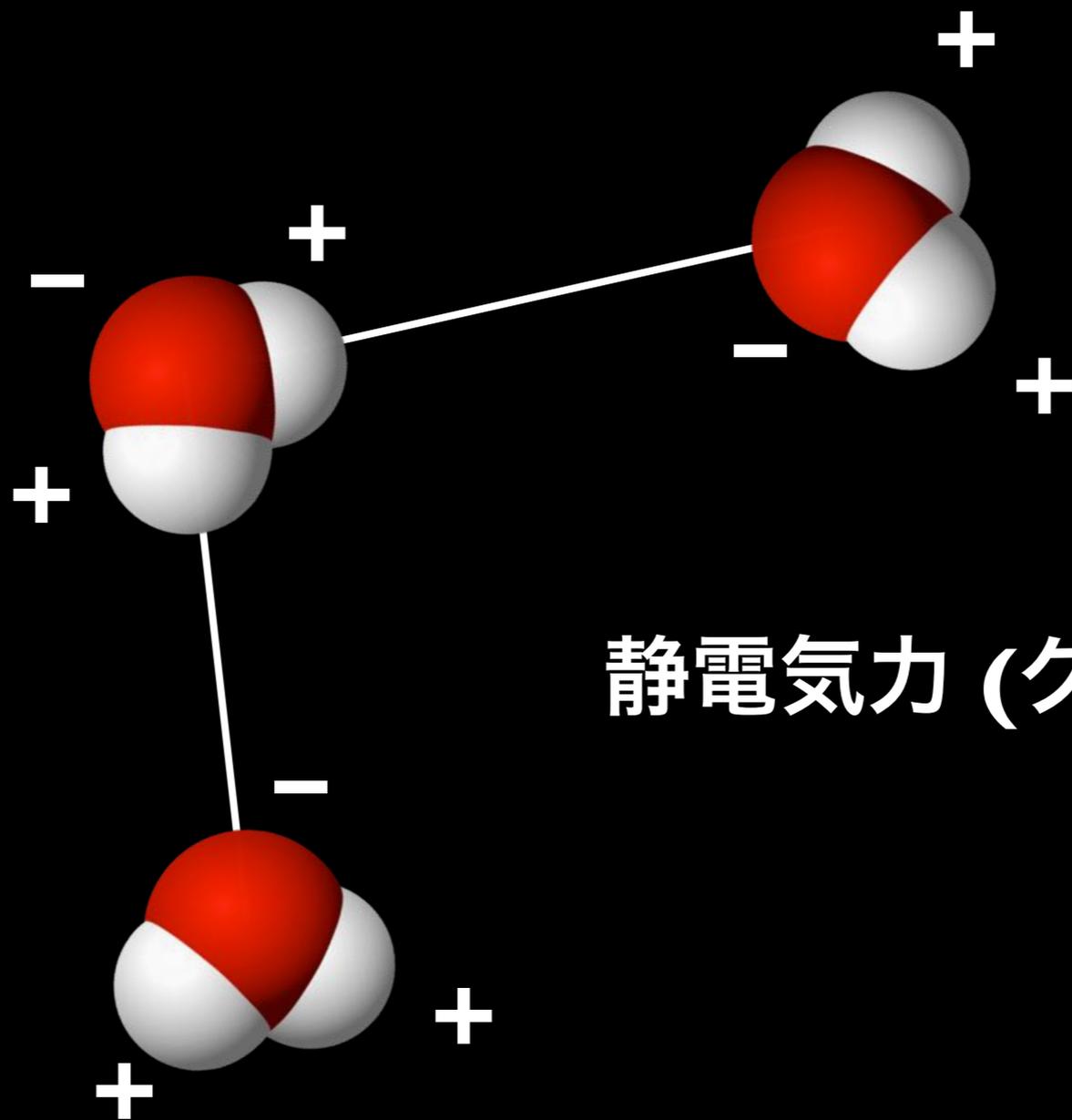
"STM at the London Centre for Nanotechnology" by O. Usher (UCL MAPS)

動く水分子が見える顕微鏡は ない

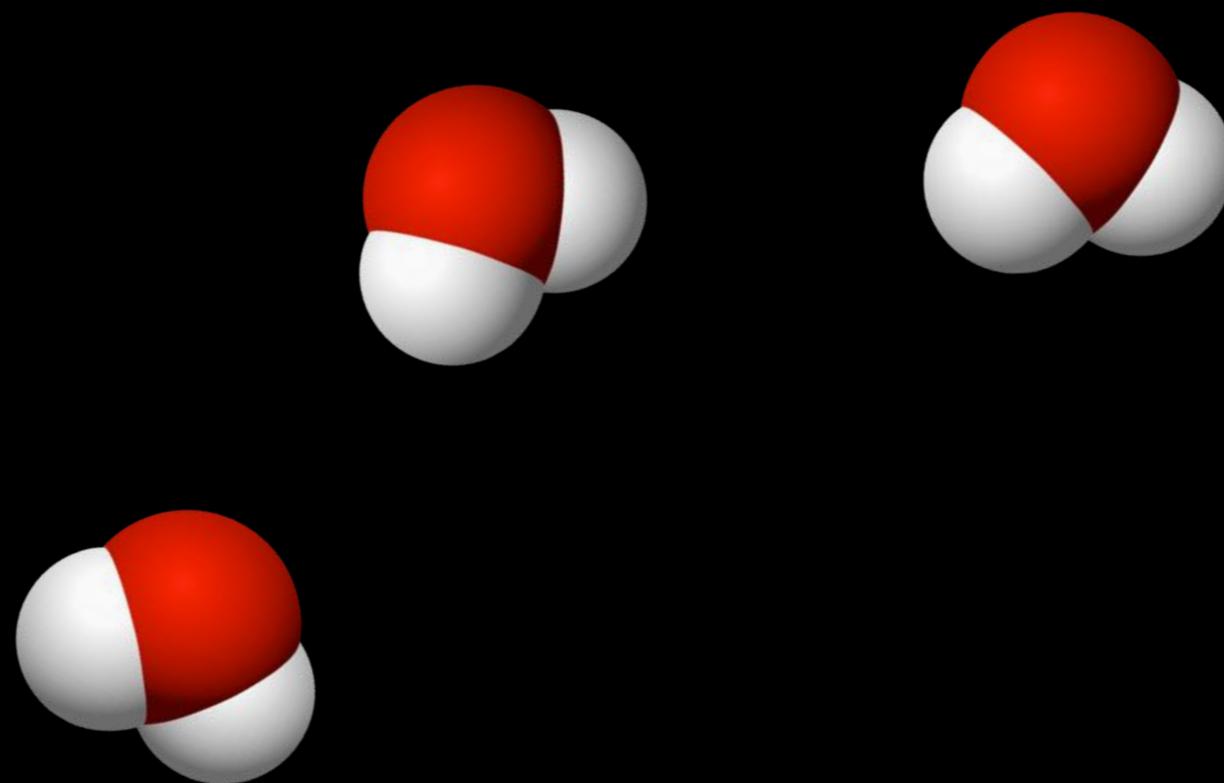


星の間に働く力を知れば，星の動きは予測できる

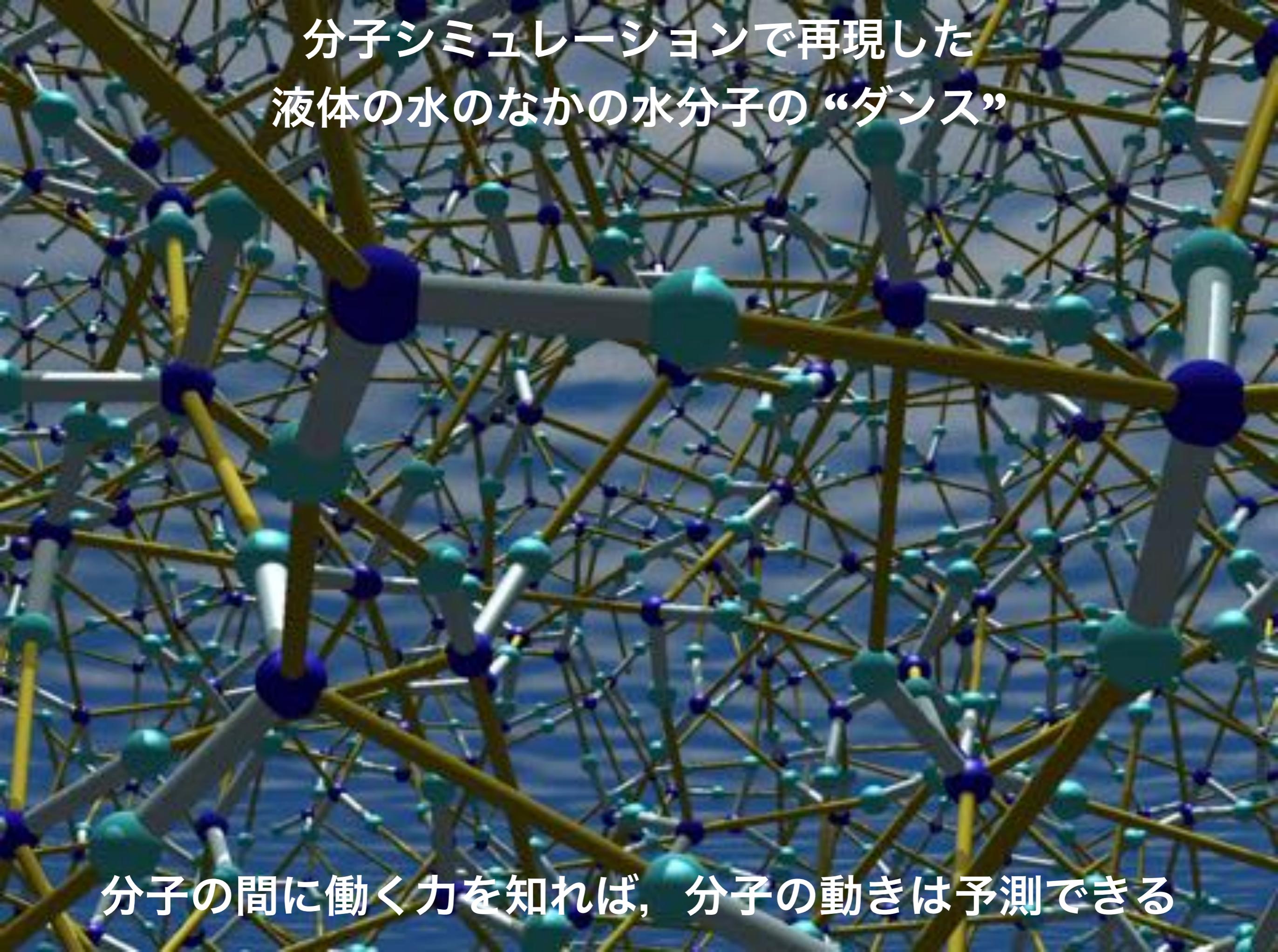
シミュレーション



静電気力 (クーロン力)

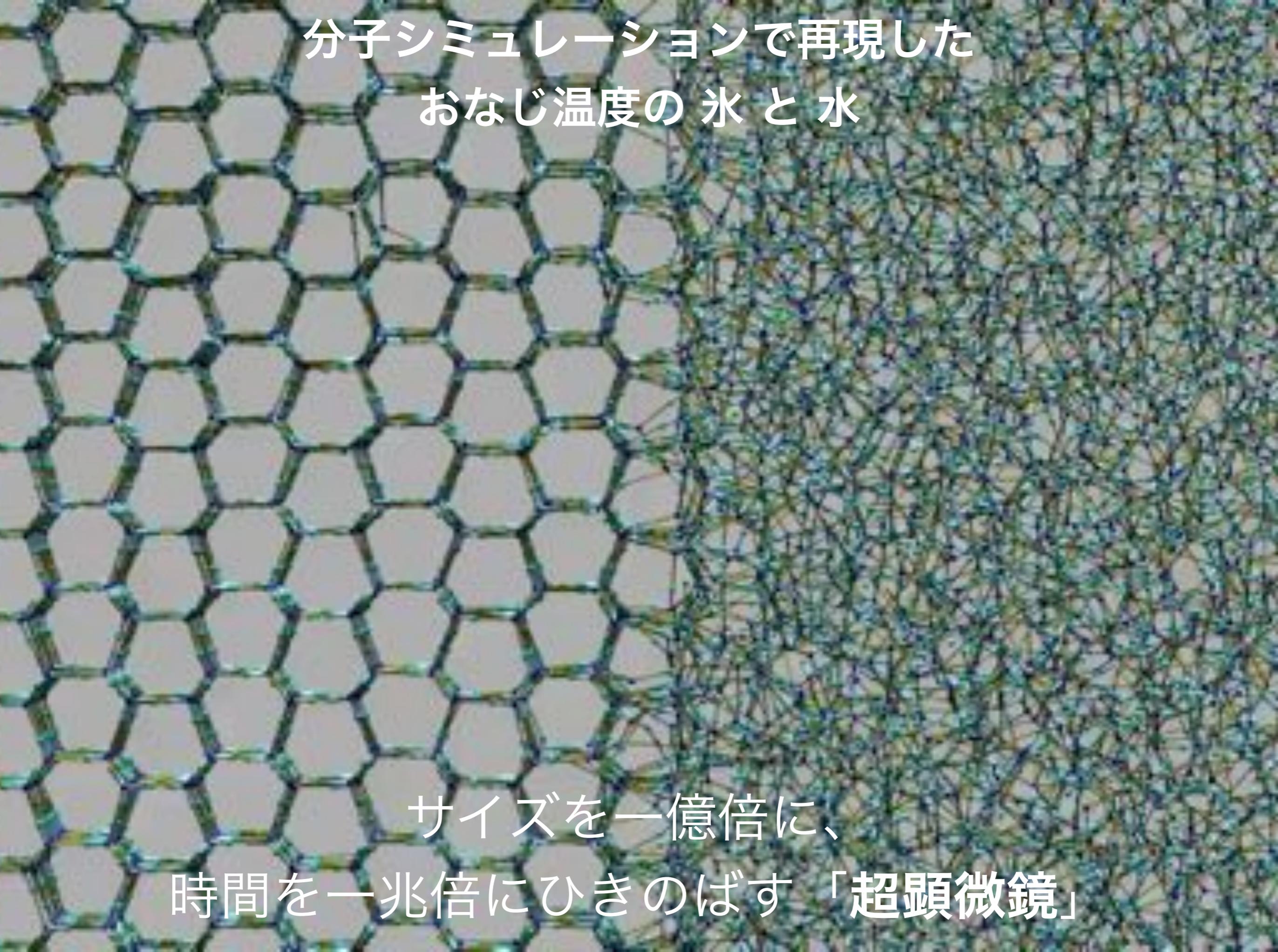


分子の間に働く力を知れば、分子の動きは予測できる



分子シミュレーションで再現した
液体の水のなかの水分子の“ダンス”

分子の間に働く力を知れば、分子の動きは予測できる



分子シミュレーションで再現した
おなじ温度の氷と水

サイズを一億倍に、
時間を一兆倍にひきのばす「超顕微鏡」

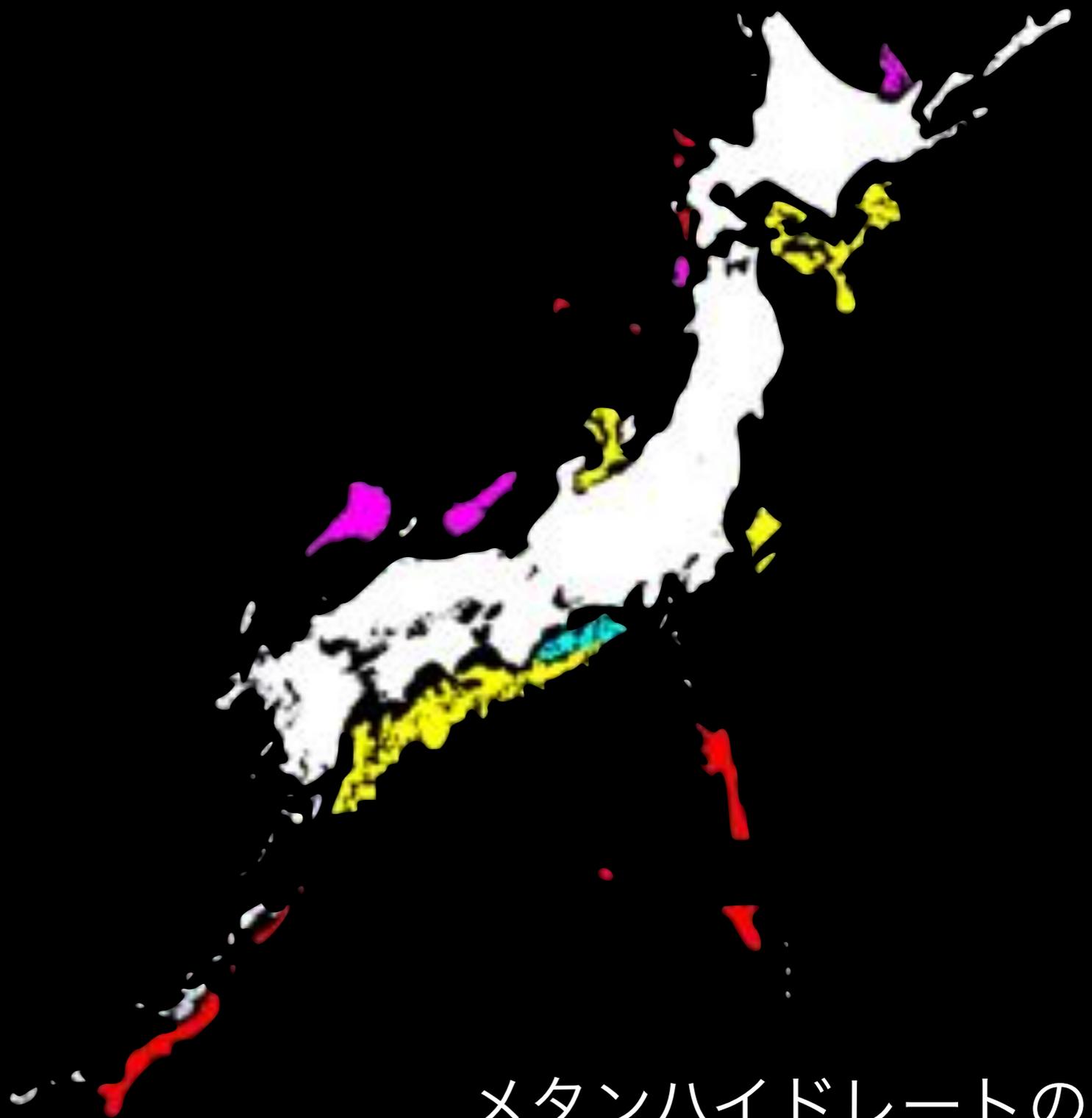
なぜ、水？

- 私たちに一番身近であるだけでなく、地球や宇宙の規模でも大量に存在する
- 変わった性質をたくさんもっている
- 今の計算機の性能でなんとか扱える

メタンハイドレート



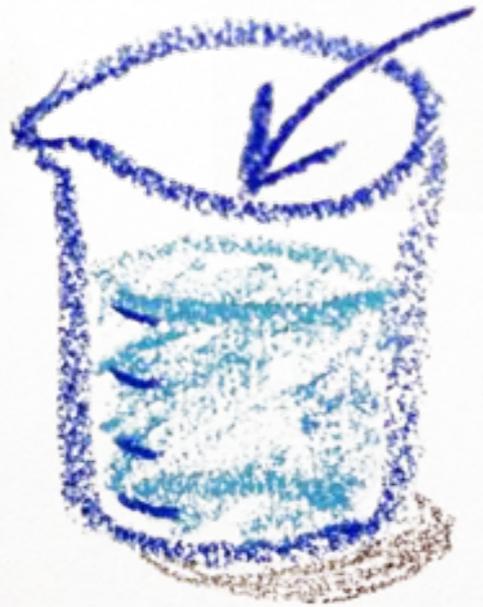
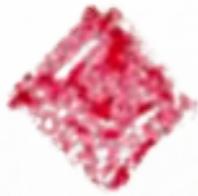
メタンと水がいっしょに
凍った“燃える氷”



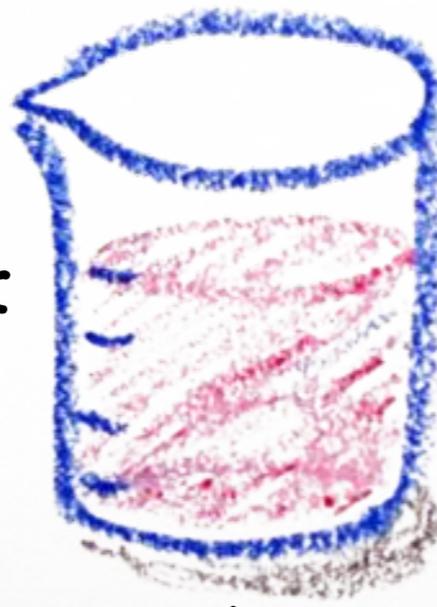
メタンハイドレートの
推定埋蔵域

メタンハイドレートのふしぎ

食塩

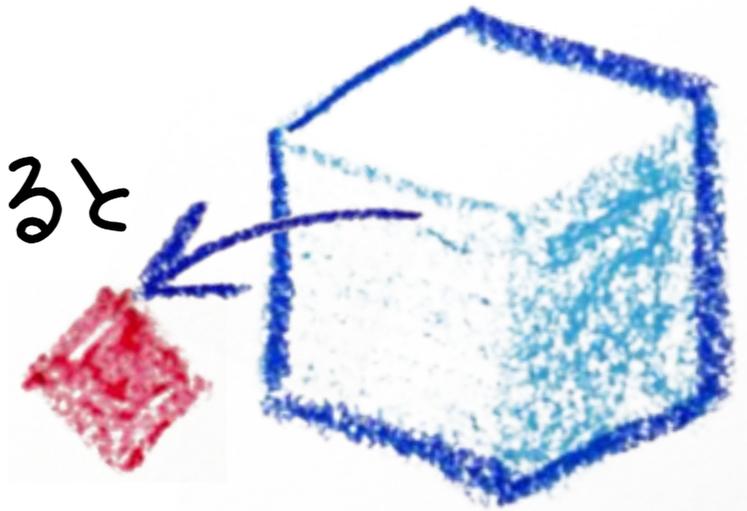


溶かすと



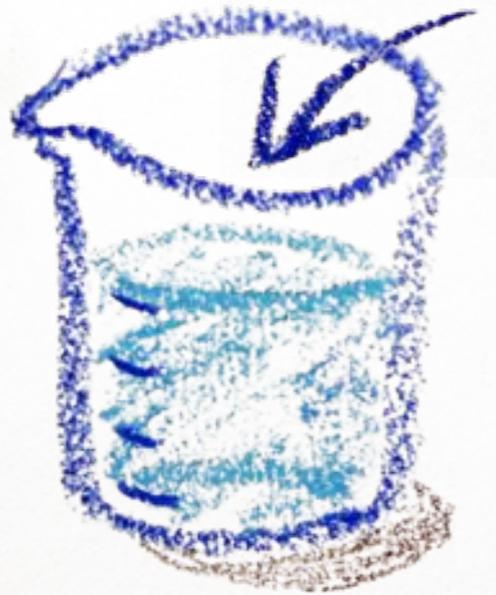
食塩水

凍ると



水だけが凍る

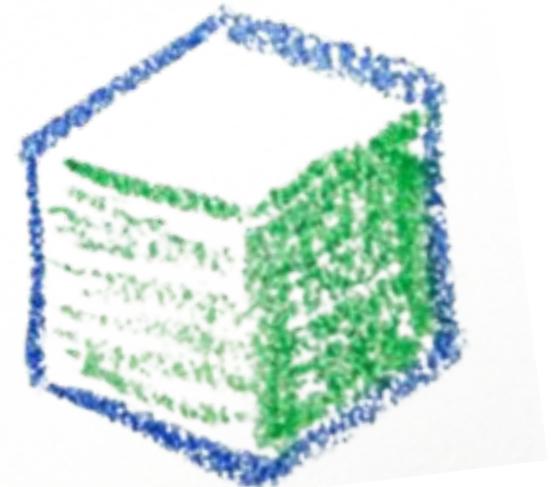
メタンガス



溶かすと



凍ると



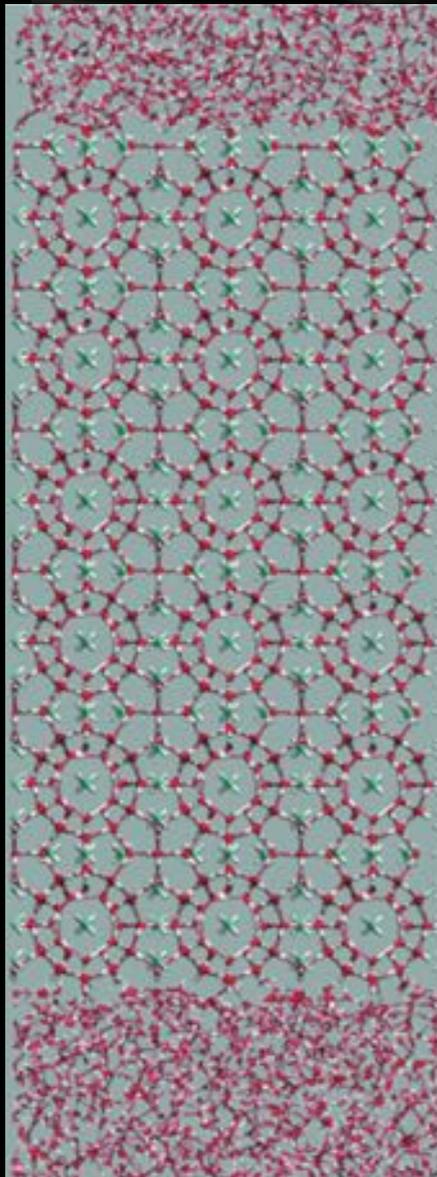
炭酸の1/10も とけない 水に溶ける量の1万倍 溶けていっしょに凍る!

10 ナノメートル = 0.000 01 mm

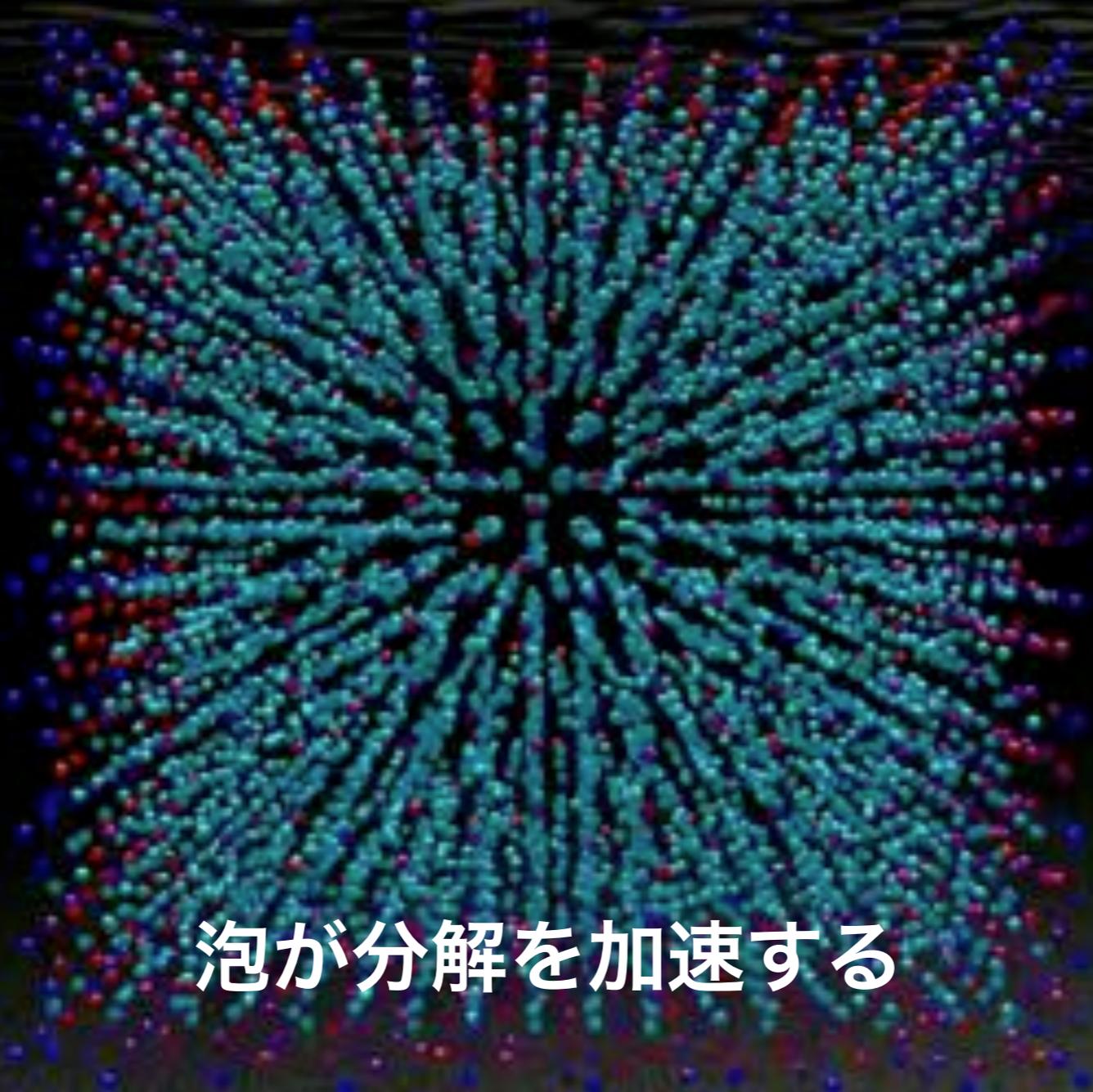


矢ヶ崎 (岡山大学)

(2014)



S. Alavi et al (2010)



泡が分解を加速する

水中のメタンハイドレートの分解

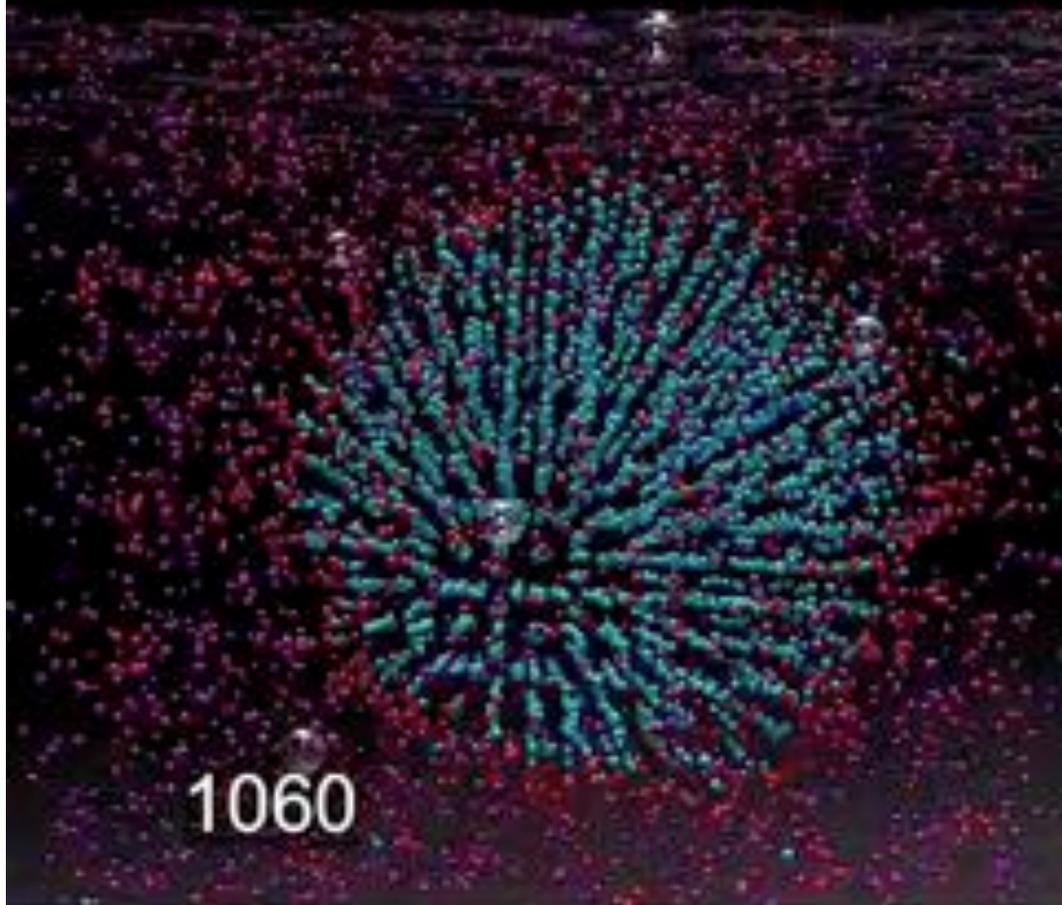
泡が分解を加速する



K computer

矢ヶ崎 (岡山大学)

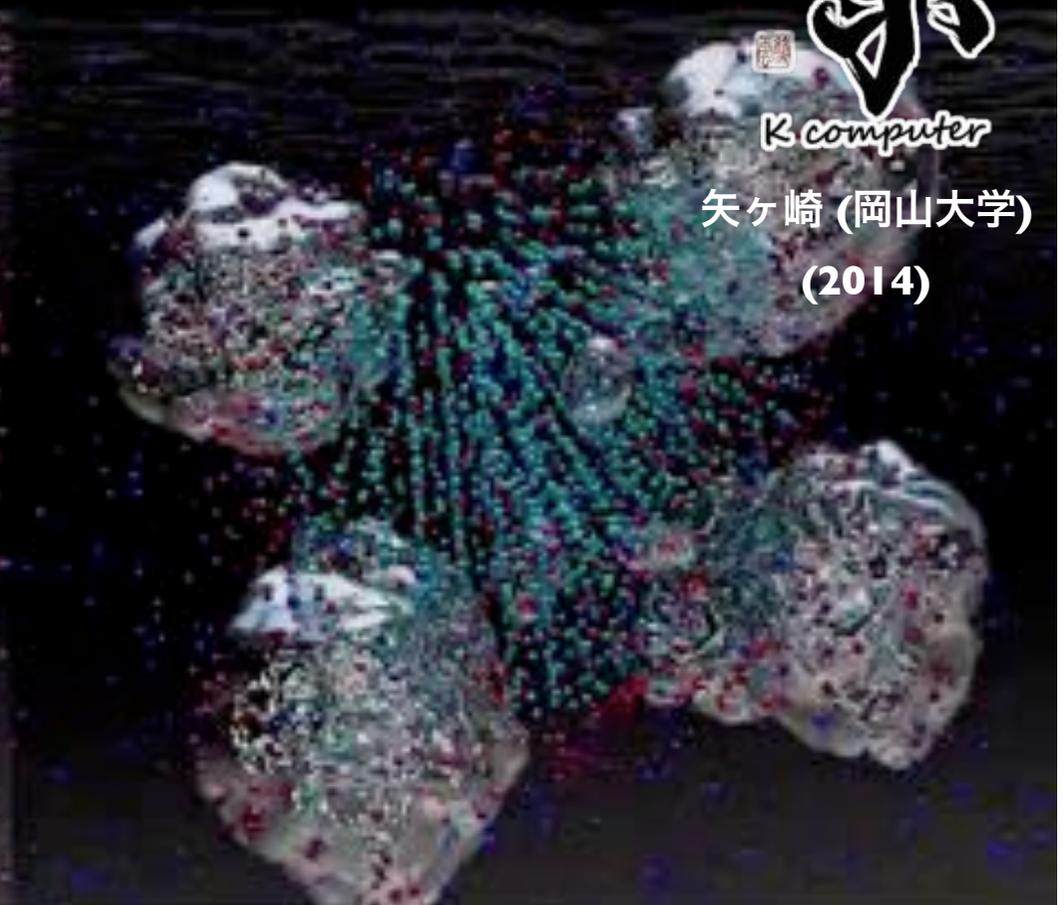
(2014)



1060

淡水中

メタンハイドレートが分解するにつれ、
メタンが水に溶けだし、濃い水溶液になる。
泡がなかなかできないので分解は遅い。



塩水中

メタンは塩水に溶けないので、
すぐに泡ができる。泡ができると、
メタンハイドレートが速く融ける。

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

分子の
大きさ

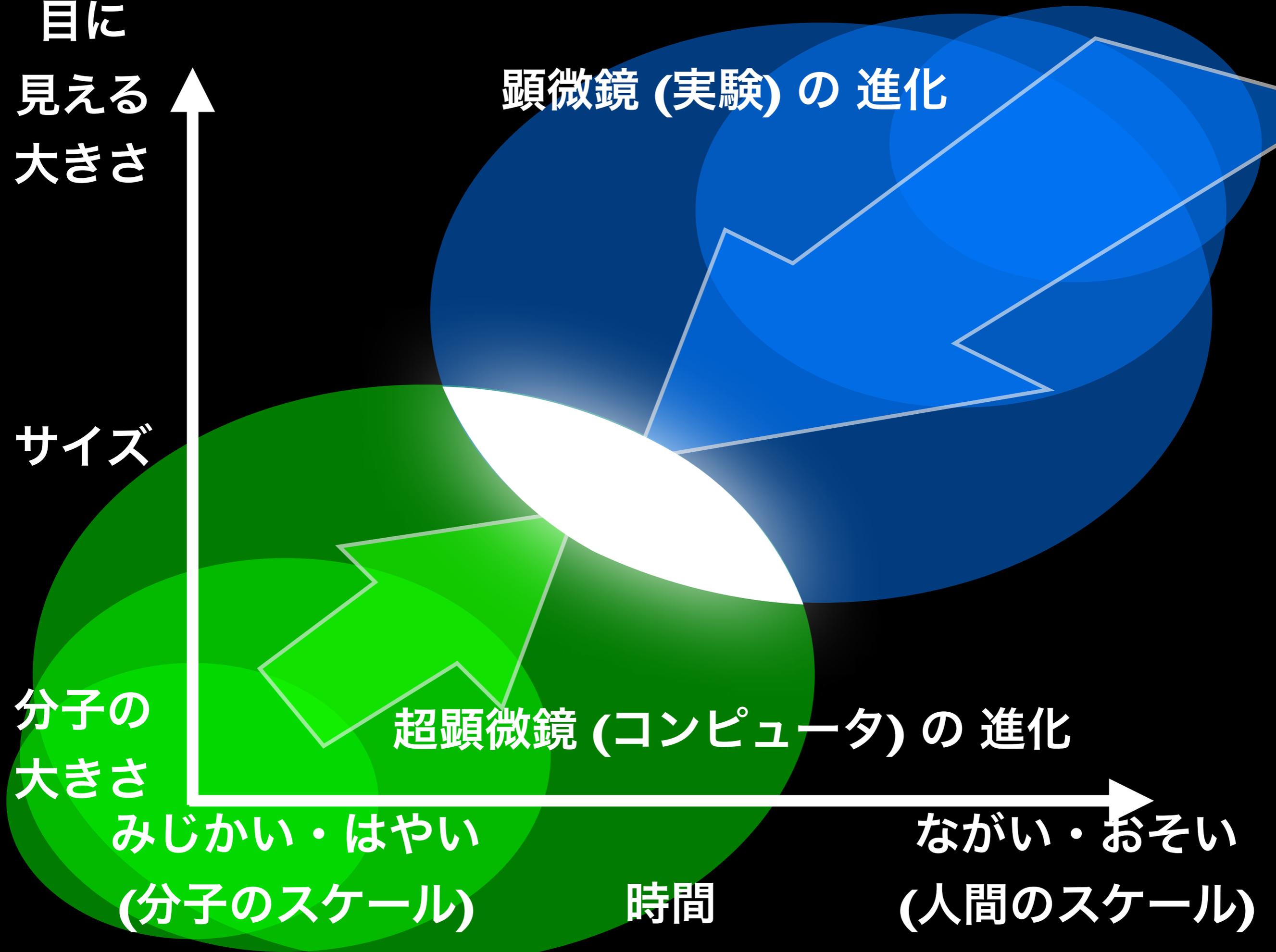
みじかい・はやい
(分子のスケール)

顕微鏡 (実験) の 進化

超顕微鏡 (コンピュータ) の 進化

時間

ながい・おそい
(人間のスケール)



終



岡山大学

