

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%



The Not-Planets

Many large round worlds are not currently classified as planets: the solar system's major moons, the largest asteroids, and large Kuiper belt objects. These are the ones spacecraft have visited.

Images from Galileo (Jupiter's moons), Cassini (Saturn's moons), Voyager 1 (Uranus and Neptune), and various Mars rovers (Mars). Other spacecraft: Europa (ESA's Galileo), Callisto (ESA's Galileo), Titan (ESA's Cassini), and Ceres (NASA's Dawn). Credit: NASA/JPL, ESA, JAXA, and various spacecraft operators.

Earth's Moon:



The Moon

Jupiter satellites:



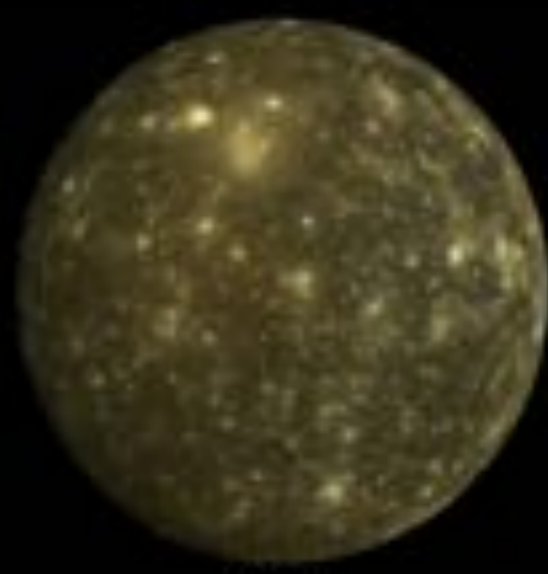
Io



Europa



Ganymede



Callisto

Saturn satellites:



Mimas Enceladus

Tethys

Dione

Rhea



Titan

Uranus satellites:



Miranda

Ariel

Umbriel

Titania

Oberon

Neptune satellites:



Triton

Pluto system:



Pluto



Charon

Asteroids:



Vesta



Ceres

Proteus

Vesta

Ceres

Proteus

Vesta

Ceres

ほとんどの衛星は水(氷)に覆われている

小惑星 Ceresには地球とほぼ同じ量の水がある!



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。

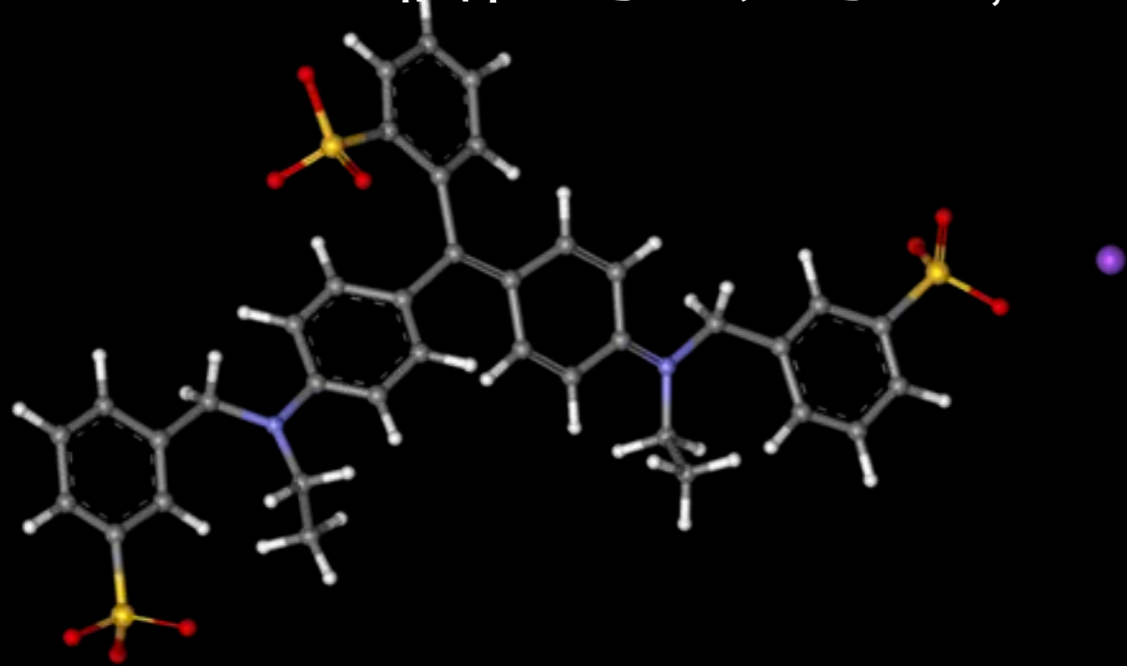
5. 粘度が大きい。

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。

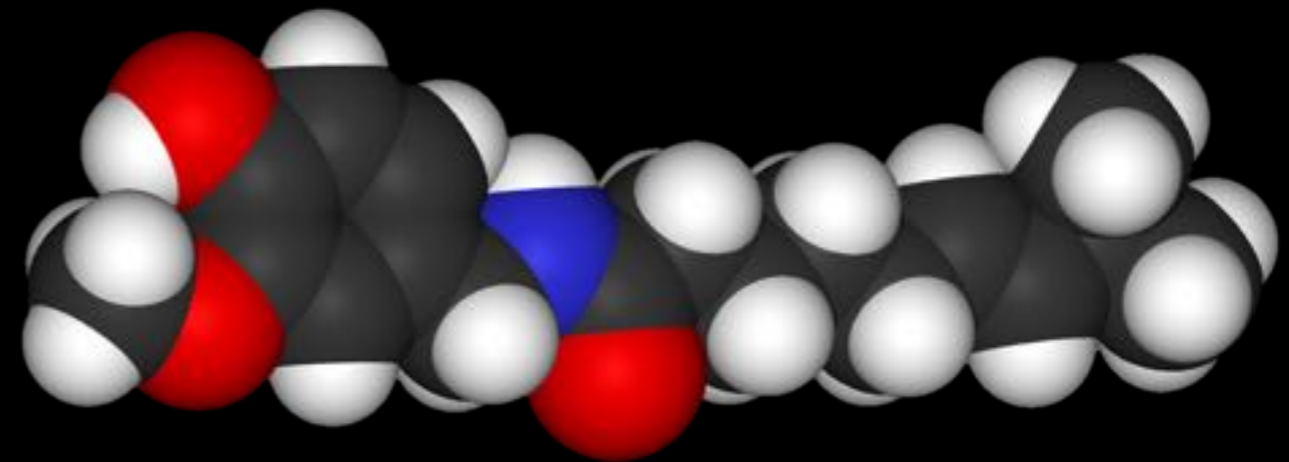
なぜ水にはこんな性質があるの？

7. 融ける時に収縮する/凍る時に膨張する

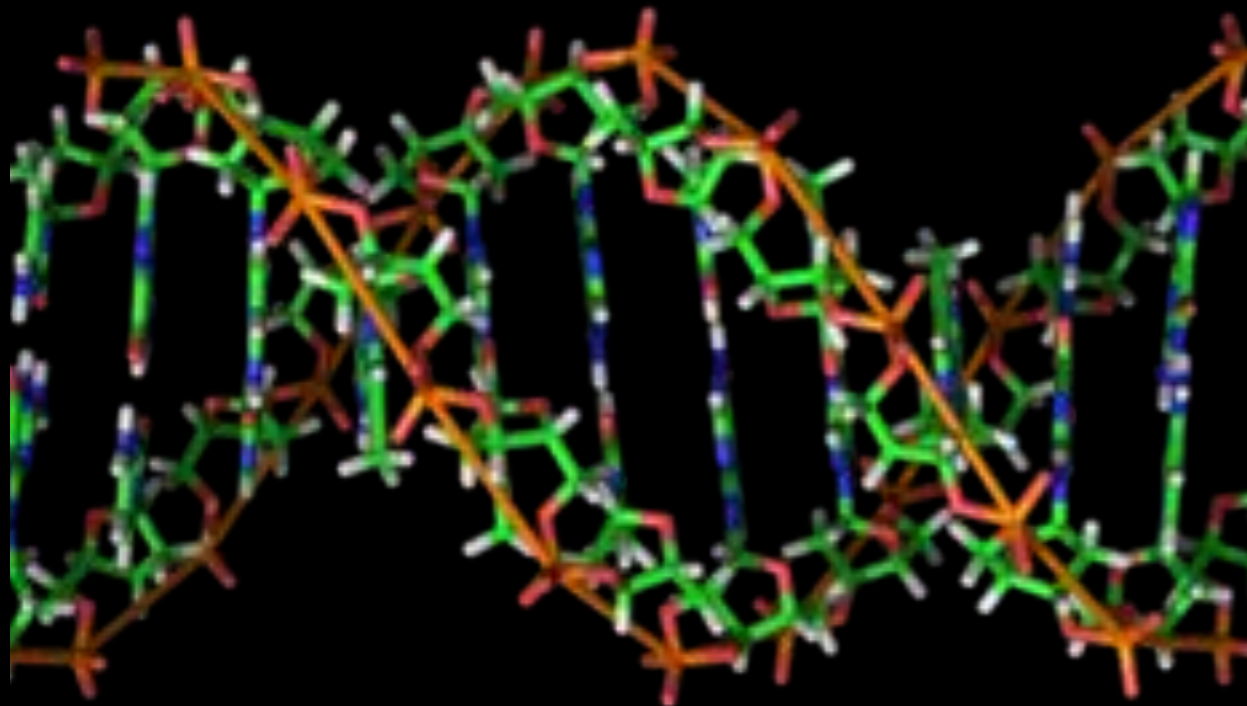
個性的な分子は、それぞれ独特の性質を持つ



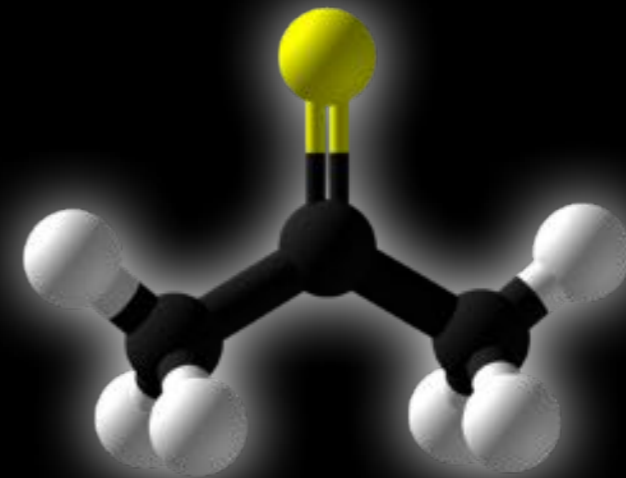
青い分子 $C_{37}H_{34}N_2Na_2O_9S_3$



辛い分子 カプサイシン

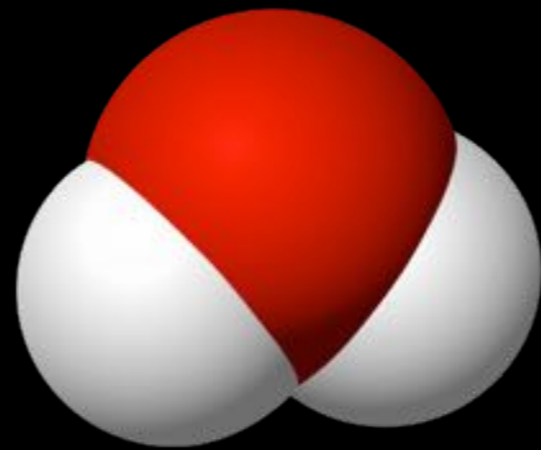


情報を記録する分子 DNA



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」



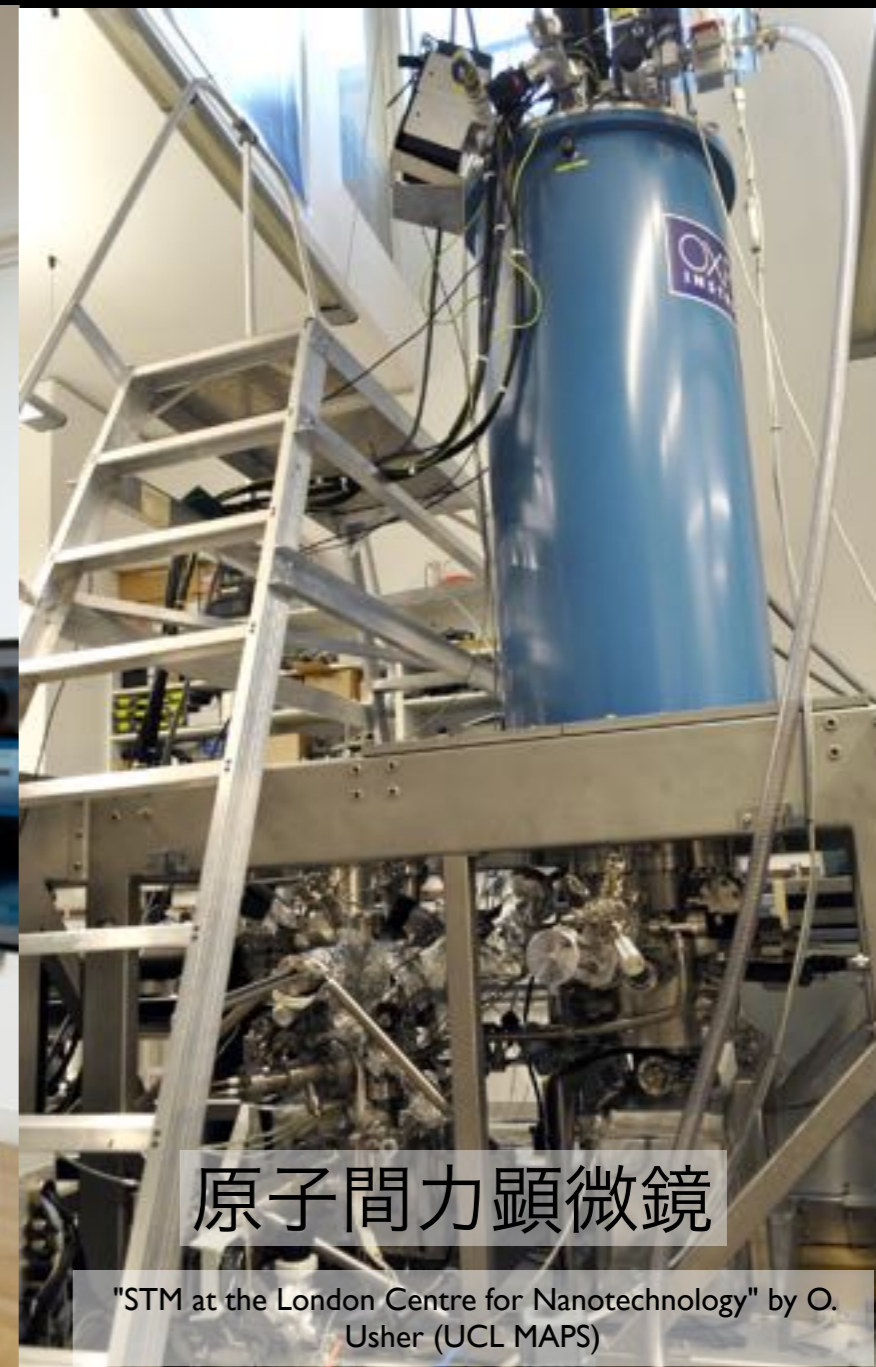
光学顕微鏡

"Microscope" by Original uploader was Zephyris



電子顕微鏡

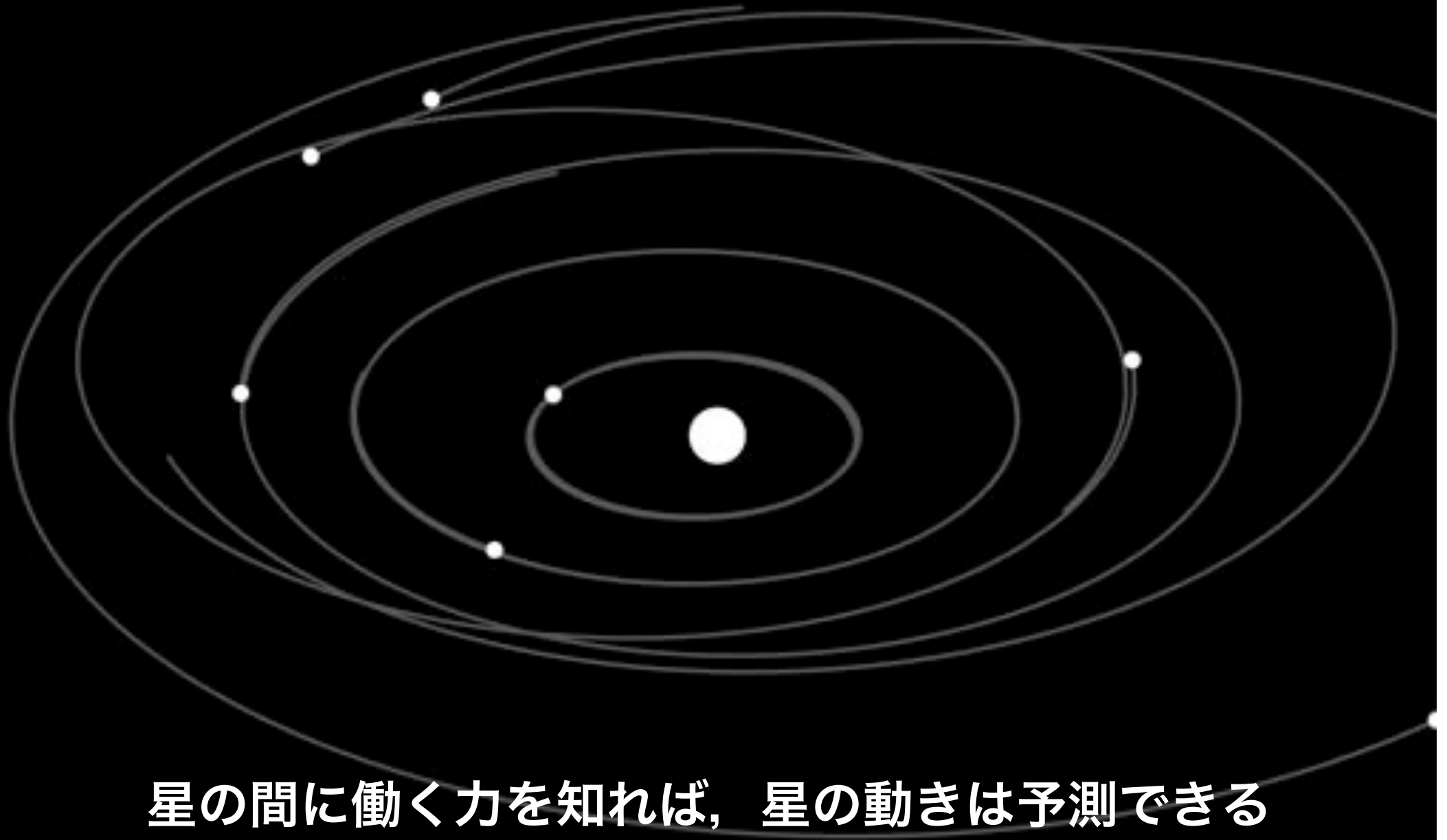
"Microscope-IMG 0518" by Work by Rama



原子間力顕微鏡

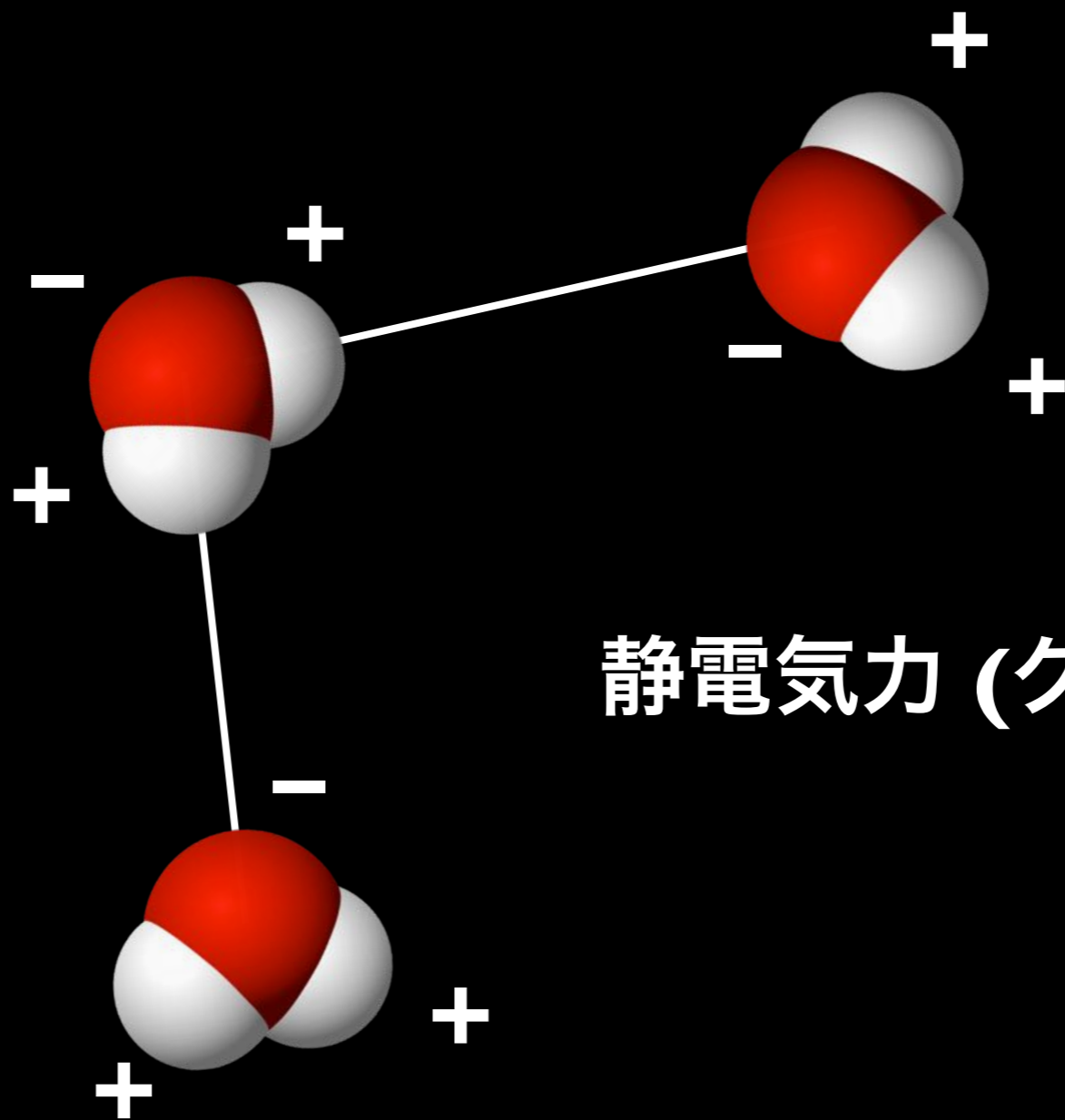
"STM at the London Centre for Nanotechnology" by O. Usher (UCL MAPS)

動く水分子が見える顕微鏡は ない

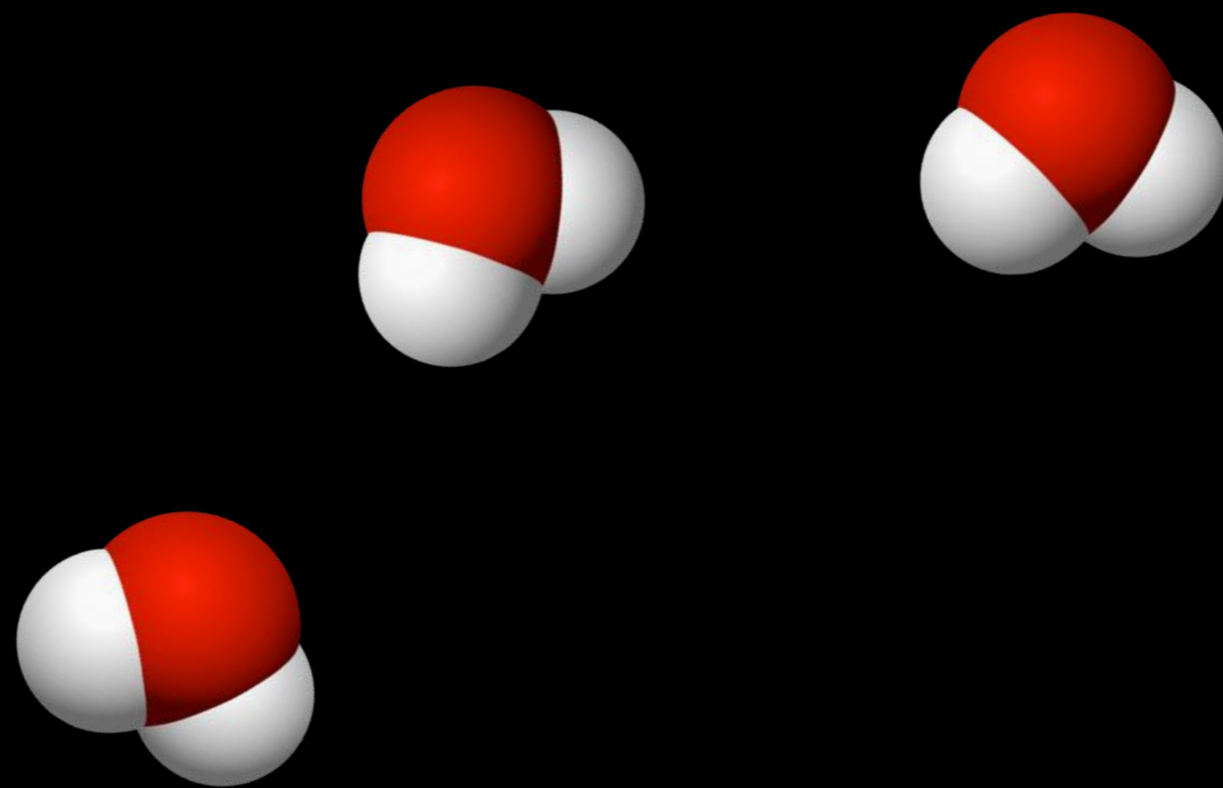


星の間に働く力を知れば，星の動きは予測できる

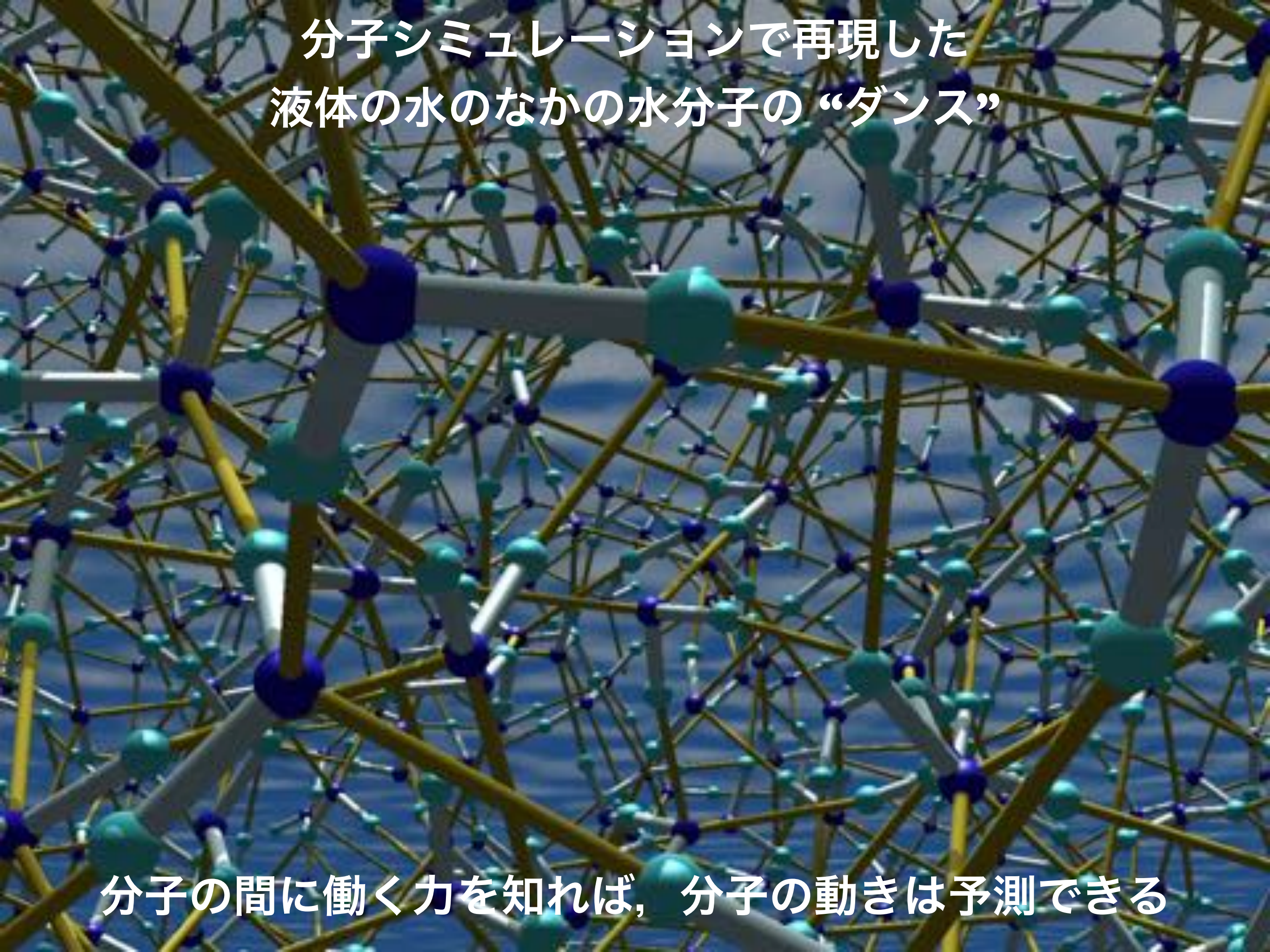
||
シミュレーション



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

The image shows a side-by-side comparison of molecular simulations. On the left, the water molecules are arranged in a regular, hexagonal lattice, representing the solid state of ice. On the right, the water molecules are in a disordered, fluid state, representing liquid water. The molecules are depicted as small spheres connected by lines, with a color palette of blue, red, and white.

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」

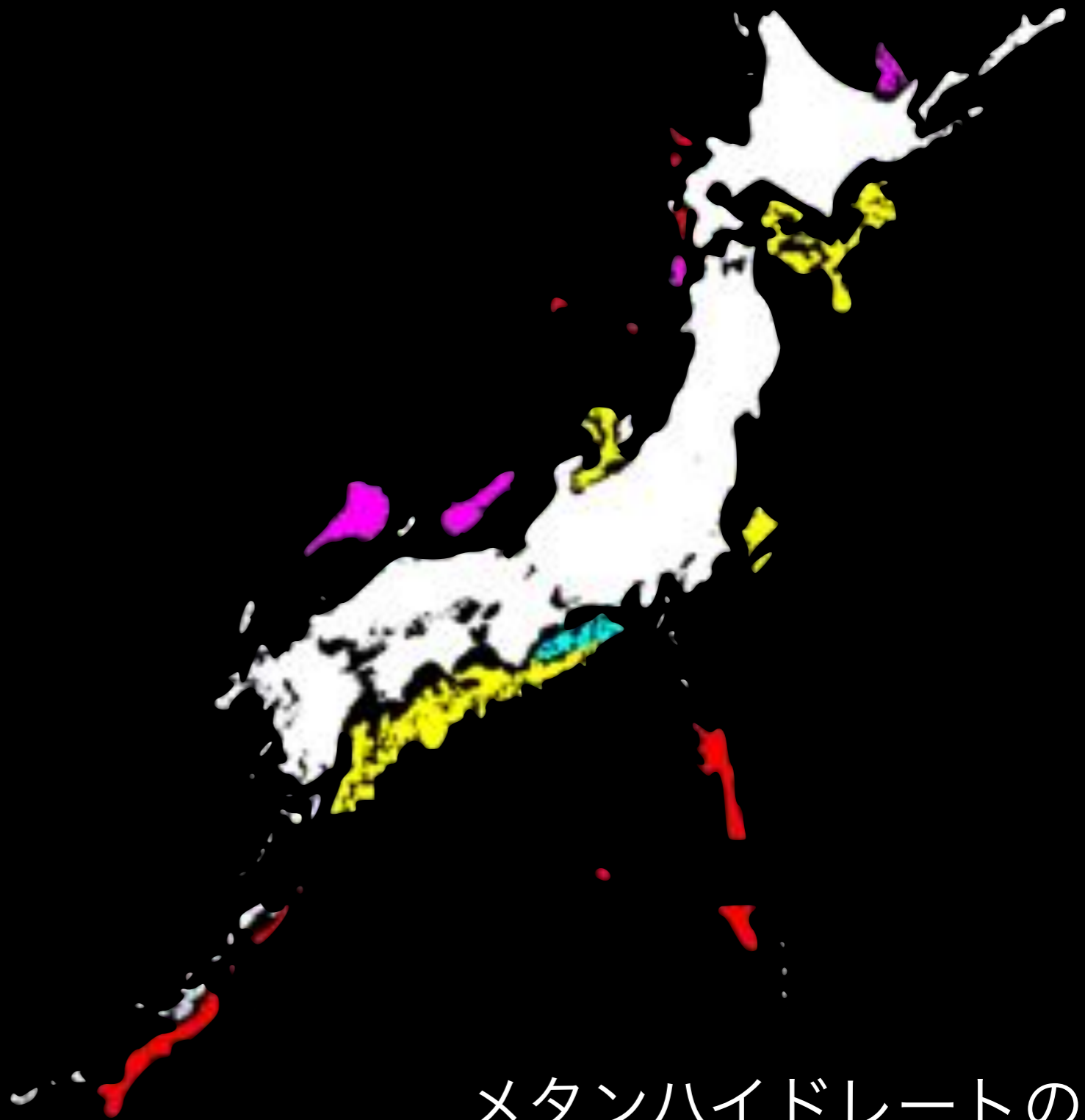
なぜ、水？

- 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”



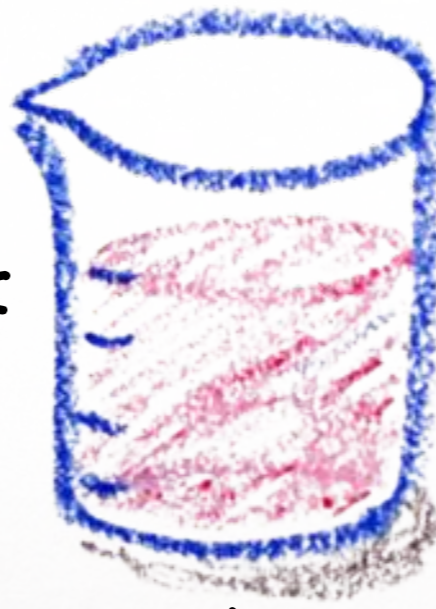
メタンハイドレートの
推定埋蔵域

メタンハイドレートのふしぎ

食塩

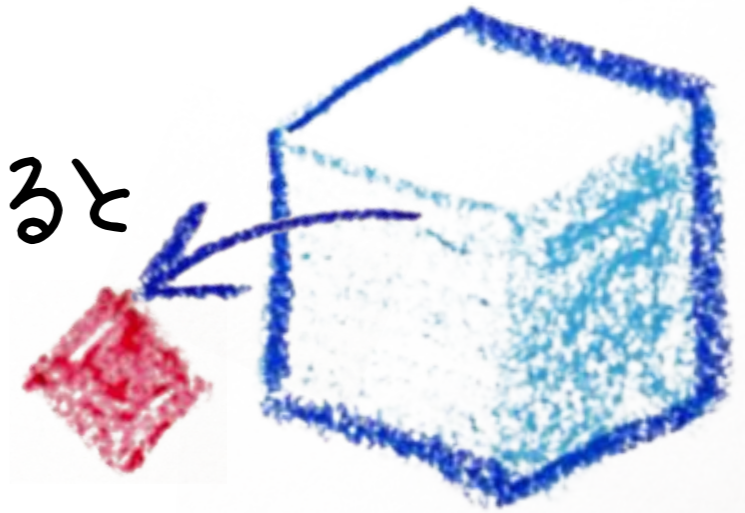


溶かすと



食塩水

凍ると



水だけが凍る

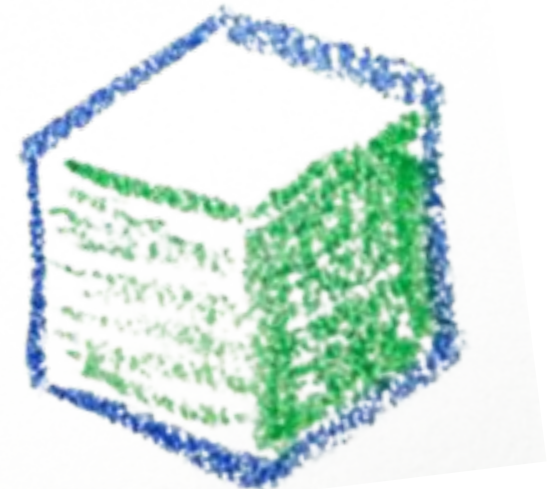
メタンガス



溶かすと



凍ると



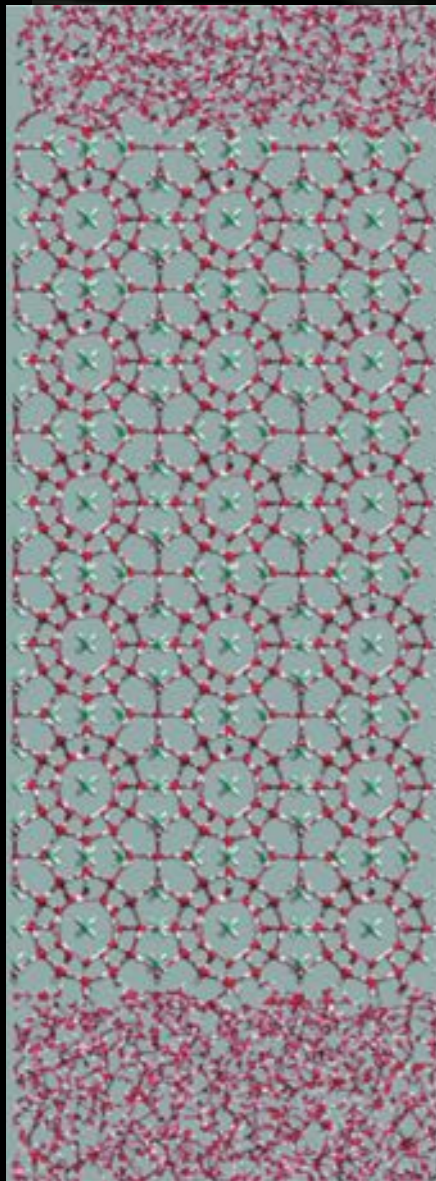
水に溶ける量の1万倍
炭酸の1/10も とけない 溶けていっしょに凍る!

10 ナノメートル = 0.000 01 mm

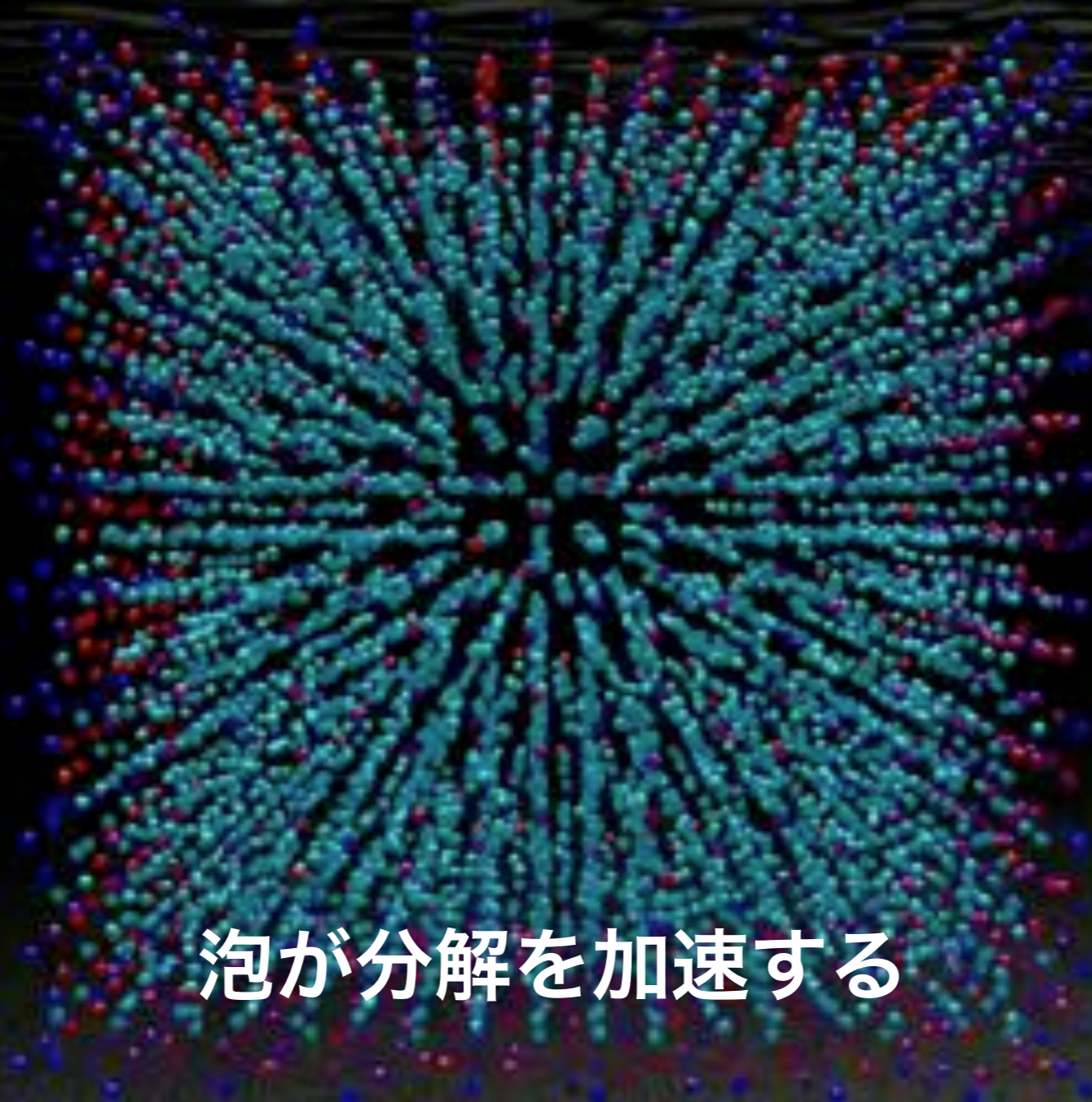


矢ヶ崎 (岡山大学)

(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

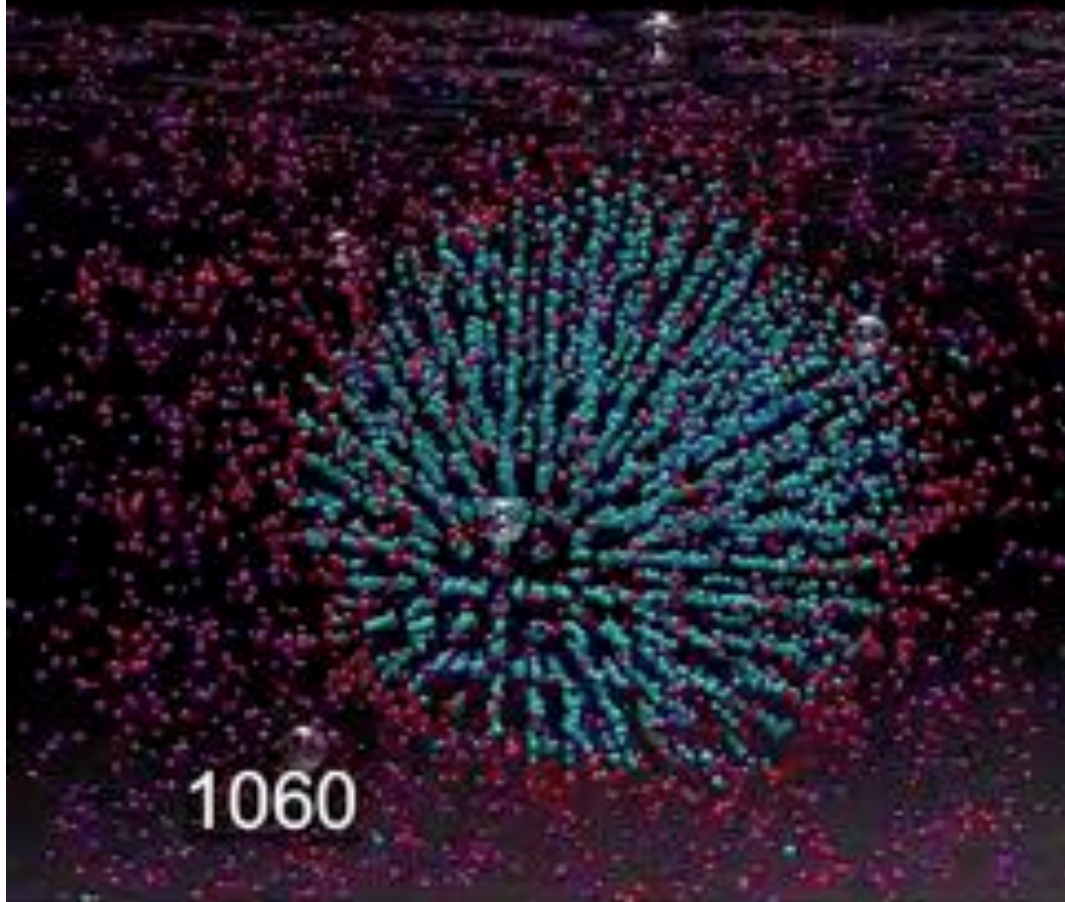
泡が分解を加速する



K computer

矢ヶ崎 (岡山大学)

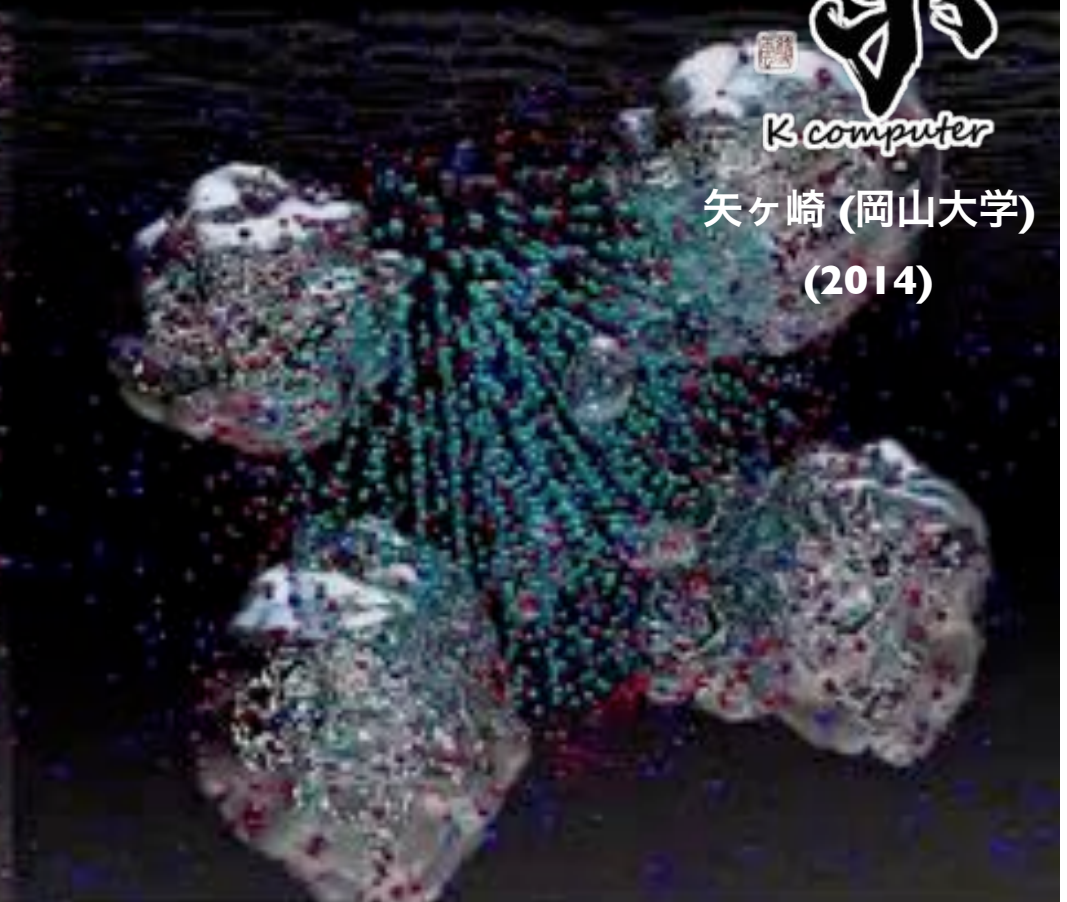
(2014)



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

顕微鏡 (実験) の進化

サイズ

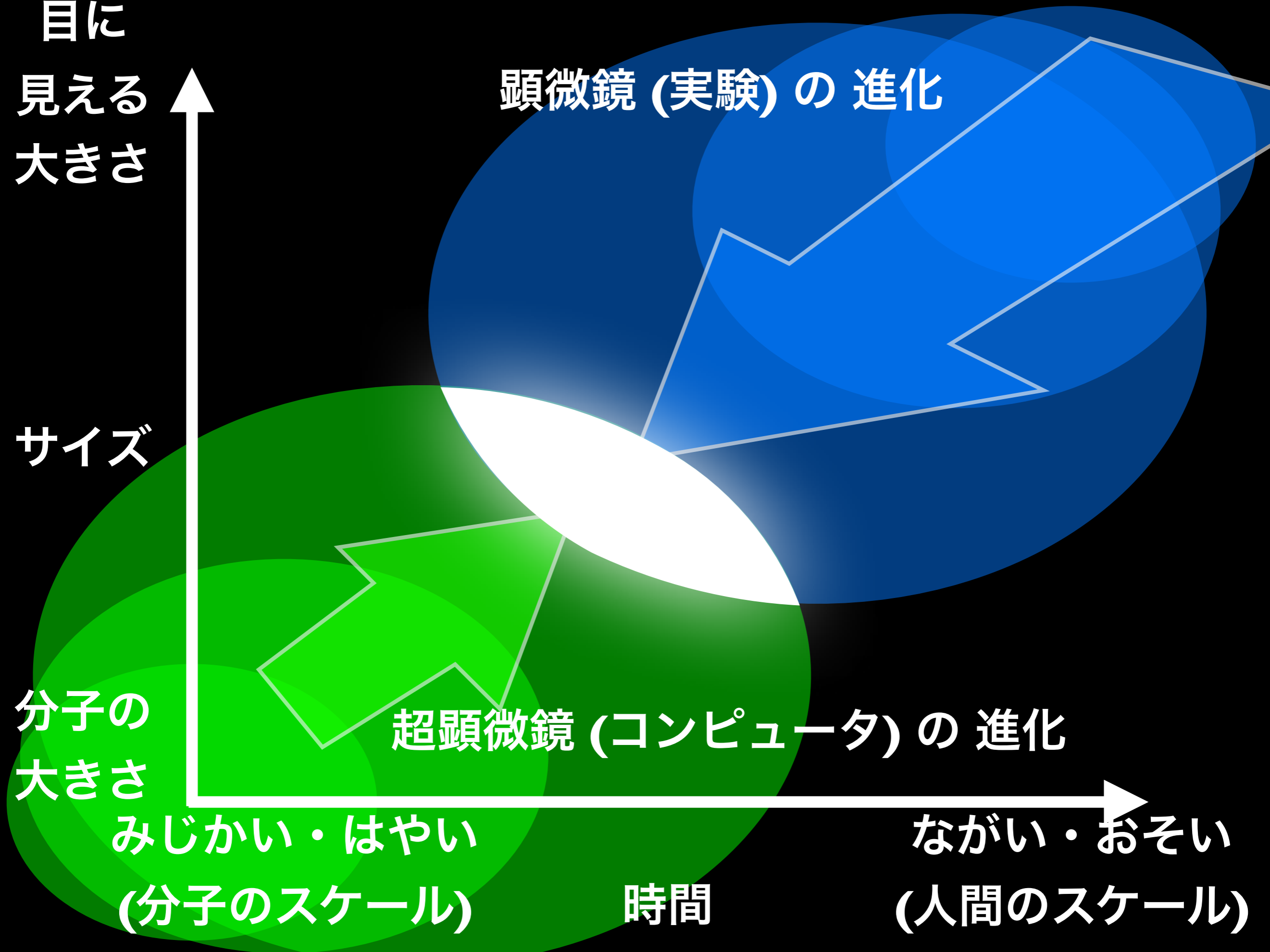
分子の
大きさ

超顕微鏡 (コンピュータ) の進化

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)



終

