

## 表紙の図について

### 「水の氷化」

水を冷やすと氷になる。この誰でも知っている相転移はごく普通に目にすることができる。しかし、このなじみ深い変化の計算機上でのシミュレーションには、これまでだれも成功していなかった。約40年前、液体系に対するはじめての計算機シミュレーションが行われ、シミュレーションにより分子スケールの挙動を目の当たりに観測することが可能となり、現在ではシミュレーションは実験・理論とならぶ3番目の研究手法ともいわれている。

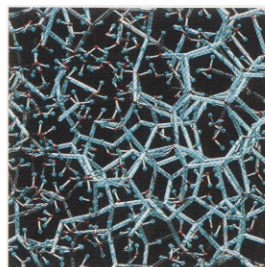
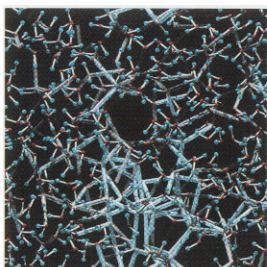
この計算機シミュレーションが行われはじめたころから、研究者たちは固体-液体の相転移の研究を進めてきたが、水の結晶化は困難であった。その理由としては、まず、水分子間の水素結合によって3次元的な乱れたネットワーク構造が形成され、ポテンシャルエネルギー面が複雑に凸凹になること。ゴルフにたとえれば、きれいに整備されたグリーンでさえホールアウトすることは簡単ではない。まして、地面が凸凹で芝も荒れたグリーンでのゴルフでは、ホールに近づけることすらままならないことと同じである。

さらに、3次元であるためにネットワークのパターンは途方もなく多く、きれいな水素結合ネットワーク構造をもつ氷構造を見つけにくく、純粋な水の結晶化のシミュレーションは非常に困難なものとなっている。

理論化学研究室では、6年前からこの問題に取り組んできた。過冷却状態(230 K = -43°C)の水からどのように結晶化するかを計算機シミュレーションにより解析した。水のなかには、比較的寿命の長い水素結合があつまった「核」が間欠的に形成されるが、それらはしばらくすると消失する。そのなかで、ある時に形成された比較的長い寿命をもつ水素結合が、ある場所に十分多数うまれ、比較的コンパクトな初期核が形成され、壊れずに生き残り、次第にそのサイズを大きくしていくことを見出した。

このときの核内部の分子は、最終的に得られる結晶のような秩序をもたず、アモルファス的な特徴があることがわかった。この核がある時点から急激な結晶成長に転じて、最終的に系全体が結晶となることがわかった。

表紙の図は、300 K (室温) から 230 K (-43°C) に、突然温度を下げ過冷却状態にしてからの180 ナノ秒後(左図)と320 ナノ秒後(右図)である。途中の状態は、下図に示す。この過程は、本研究室のWEB (<http://www.chem.nagoya-u.ac.jp/og/freezing/>) で公開している動画を参照いただくと、より理解しやすい。



(名古屋大学理学研究科：松本正和 斉藤真司 大峯巖)