

「高分子」の中での「水」の研究

私はマックスプランク高分子研究所の分子分光部門 (Director: Prof. Mischa Bonn) という実験主体の部門の中で、界面分光理論のグループを形成しております。実験の部門の中に理論のグループが存在するわけですが、実験のグループと緊密に連携し常に最新のデータやアイデアを実験と理論で共有できる環境は、あまり他に例を見ない特色であると思います。共同研究が推進されており、いつでも活発な議論がグループ間のバリアがない状態でできるのは、研究者にとって非常に刺激的だと僕自身は考えています。

私の研究は**界面**の水分子の構造や運動を分子動力学シミュレーションで「見る」ことです。ただシミュレーションだけでは、現実に界面の構造が本当に予想した構造になっているのか分かりません。実験で測定したものとシミュレーションで再現できるかテストするのが、**分光理論**です。そういうことで**界面分光理論**グループでは予測だけでなく、それを実験との比較によって実証することが大切だと考えています。シミュレーションの信頼性を確保した上で、どうやって水は界面から蒸発するのか？、なぜ氷の表面はすべるのか？、そもそも氷は0度で溶けるが、氷の表面は何度で溶けるのか？といった疑問に答えています。

ここでは私達の研究についていくつか例を紹介したいと思います。例えば、一つの疑問として、蒸発が起こるプロセスはランダムなプロセスなのかということがあります？即ち、確率的にごく少数の極端に「熱せられた」水分子が界面に存在し、その熱い水が水素結合を断ち切って蒸発するのでしょうか？実はこの描像は間違っていて、ランダムではなく、特定の水の分子が連鎖的に相互作用することで蒸発が起こるのです。もう少し詳しく書きますと、水の中では水の水素結合は切れたり、新たに作られたりというイベントが頻繁に起こっています。水素結合が作られると、その分だけ位置エネルギーが余剰に生成され、位置エネルギーは90度位相がずれると運動エネルギーとなります。その余剰の運動エネルギーが、たまたま他の水分子に移されることで、界面付近の水分子が界面から離れていく現象が、僕らが普段目にする「蒸発」という現象なのです (Nagata, *et al.*, Phys. Rev. Lett. 2015)。

もう一つの例は、氷の界面でなぜすべりやすいのかという疑問があります。一般に氷の界面では、融点以下でも水が準液体状態になっているのですが、その準液体状態の水についての挙動は未だに謎が多くあります。例えば、準液体状態の水が温度変化に対してどのような挙動を取るのか、よく分かっていません。私達は振動分光実験と振動分光シミュレーションの融合により、振動スペクトルを解析し、200Kあたりで、界面水が水素結合の数を最大にすることを見つけました

(Smit, *et al.*, Phys. Rev. Lett. 2017)。温度が上がれば、エネルギーの寄与よりもエントロピーの寄与が大きくなるので、水素結合の数は温度が上がれば減っていくというのが一般的に思いつくわけですが、氷の界面では、6-Ring 構造ではなく、変形した 5-Ring や 7-Ring 構造を作って、6-Ring の結晶構造を壊しながらエントロピーを稼ぎ、更に水素結合を増やそうとする界面水の「二兎を得る」ような挙動が現実には起こっているわけです。

分かりやすい研究例を挙げましたが、私達のアクティビティに興味を持っていただければ幸いです。

永田勇樹

マックスプランク高分子研究所・グループリーダー

1998年灘高校卒業、2002年東京大学工学部化学システム工学科学士卒業、2004年修士卒業、2007年京都大学理学研究科博士取得。2007年よりBASF本社に勤務、その後退職。2009年よりカリフォルニア大学アーバイン校でポストドク、2011年よりドイツ・マインツにある現マックスプランク研究所へ赴任。2016年にテニユアを得る。2016年から2年間分子科学研究所で客員を兼務。振動分光理論とシミュレーションを融合し、実験にフレンドリーな理論を展開することを目指している。