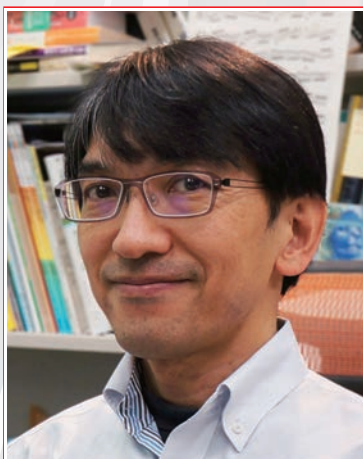


スーパーコンピュータによる
水・氷・ハイドレートの科学

松本 正和 (まつもと まさかず)

岡山大学理学部
准教授

研究分野

理論分子科学

私たち分子を研究する者にとって、スーパーコンピュータは、いわば「超」顕微鏡です。分子シミュレーションによって、ひとつひとつの分子を見分けるほどの解像度が得られ、しかも速い分子の動きもゆっくりに見せられます。そして、私が観察している分子は、水です。

水は生命に欠かせない物質であり、地球の環境を支配しています。水分子は数ある分子の中でも最も単純なもののひとつですが、水の性質を詳しく調べていくと、他の物質にはない性質がいくつも見付かります。氷が水に浮かぶ(固体のほうが体積が大きい)、雪を固めて雪ダルマが作れる(氷の表面は氷点下でも融けていくっつきやすい)、といった性質は、実はそれほど一般的な性質ではありません。これらは、つきつめていくと、分子の集まり方に原因があります。水分子が多数集まることで、どうして変わった性質が生まれてくるのかを、スーパーコンピュータを使って調べています。

新たなエネルギー源として注目されているメタンハイドレートは、メタンと水がいっしょに凍った氷の一種で、見た目にも氷そっくりです。この結晶の中では、水分子でできた玉子のケースのような構造が、メタンを一分子ずつくるみ、莫大な量のメタンガスを含んでいます。これをいかに効率よく分解してメタンをとりだすか、という研究にもスーパーコンピュータが活用されています。

コンピュータの性能が上がることは、超顕微鏡の性能が向上し、観察できる分子数が増え、現象の幅が広がり、解像度が増すことを意味します。世界的に見ても、21世紀以降、水に関するさまざまな未解決問題がこの超顕微鏡によって解き明かされました。その中には氷がどうやって凍るのか、いかに融けるのかといった、基本的かつ普遍的で極めて重要な問題が含まれています。水分子でさえもこうですから、より大きな分子が集まって起こる現象はまだまだ不明な点が多く、超顕微鏡の活躍が大いに期待されます。