



PRESS RELEASE

岡山大学記者クラブ
文部科学記者会
科学記者会 御中

平成29年9月8日
岡山大学

空気よりも軽い氷?! 極めて密度の低い氷「エアロアイス」を予測

岡山大学大学院自然科学研究科の松井貴宏大学院生、平田雅典大学院生（ともに博士前期課程1年）、岡山大学異分野基礎科学研究所の矢ヶ崎琢磨講師、松本正和准教授、田中秀樹教授の研究チームは、通常の氷よりも密度が低い氷の結晶構造について、分子シミュレーションによって網羅的な調査を実施。まだ実験で発見されていないいくつかの安定な結晶構造が存在することや、理論的に予測される低密度氷「エアロアイス」には密度に下限がなく、空気よりも軽い氷も作りうることを初めて解明しました。

本研究成果は9月5日、米国物理学協会（AIP）の国際科学雑誌「*The Journal of Chemical Physics*」に掲載されたほか、同誌の表紙を飾りました。

水は、単成分の物質としては、固体結晶の種類が異常に多く、これまでに17種類が発見されています。本研究成果によって、今後、低密度領域を探れば、さらに多数の結晶構造が見つかるかもしれません。

<業績>

岡山大学の研究チームは、通常の氷よりも密度が低い氷の結晶構造を分子シミュレーションによって網羅的に調査し、まだ実験で発見されていないいくつかの結晶構造が存在することや、理論上は水の結晶の密度に下限がなく、空気よりも軽い氷すら作りうることを初めて明らかにしました。

<背景>

氷を圧縮すると、だんだん密度が高くなり、次第に結晶構造が変化します。常圧で、冷凍庫でできる氷は、雪と同じ六角形の分子配列を持つ氷Ⅰ（「こおりⅠ」、密度 0.92 g/cm^3 ）ですが、2000気圧を加えると氷Ⅲ(3)に変わり、約4000気圧で氷Ⅴ(5)に、約6000気圧で氷Ⅵ(6)へと構造が変化します。実験研究により、氷Ⅰより高密度な結晶は13種類見つかっています。逆に、負の圧力で氷を伸長した場合にも、氷の構造は変化すると考えられています。これまで実験で発見されている氷Ⅰよりも密度の低い氷はわずか2種類だけです。本研究チームは、もっとほかに種類がないかを調べました。

<内容>

負圧の氷構造を実験で調査することは極めて難しいため、研究チームは理論的にこの問題に挑戦しました。氷と幾何構造が良く似ている、ゼオライト*¹⁾ という酸化ケイ素無機結晶の構造をもとに、新しい氷の構造を設計し、分子シミュレーションによって、それぞれ



PRESS RELEASE

の構造の安定性を評価して、与えられた圧力で一番安定な氷を網羅的に調査しました。調査した構造は 300 種類に及び、その全てが氷 I よりも低密度(密度 $0.5\sim 0.9\text{ g/cm}^3$)です。

その結果、ある種のゼオライトの構造をもとに設計した氷は、実験で発見されている低密度の氷よりも格段に密度が低く、しかも安定になりうることがわかりました。また、これらの低密度で安定な氷の構造の特徴をもとに、仮想的な氷の構造を設計したところ、さらに低密度な氷もありうることを初めて示しました。この氷の構造は、エアロゲル*²⁾ と呼ばれる酸化ケイ素素材に似ていることから、エアロアイスと名付けました。エアロアイスの密度は非常に低くすることができ(密度 $0\sim 0.5\text{ g/cm}^3$)、100xFAU と名付けられたエアロアイス結晶の密度は、空気よりも軽くなります。

<今後の発展>

現実にエアロアイスを作る方法は今のところ不明ですが、理論上は氷の密度に下限がないことが示されたことで、今後も実験的に新しい低密度な氷を見付けだす挑戦が続くと期待されます。また、水が作りうる結晶構造が(現実に実験的に作られた 17 種類に比べて)極めて多様であることが本研究で明らかになりました。このことは、ゼオライトやカーボンナノチューブ、生体高分子などに存在する、ナノサイズの空孔にとらえられた水の構造や機能を理解する上での大きな手掛りになります。

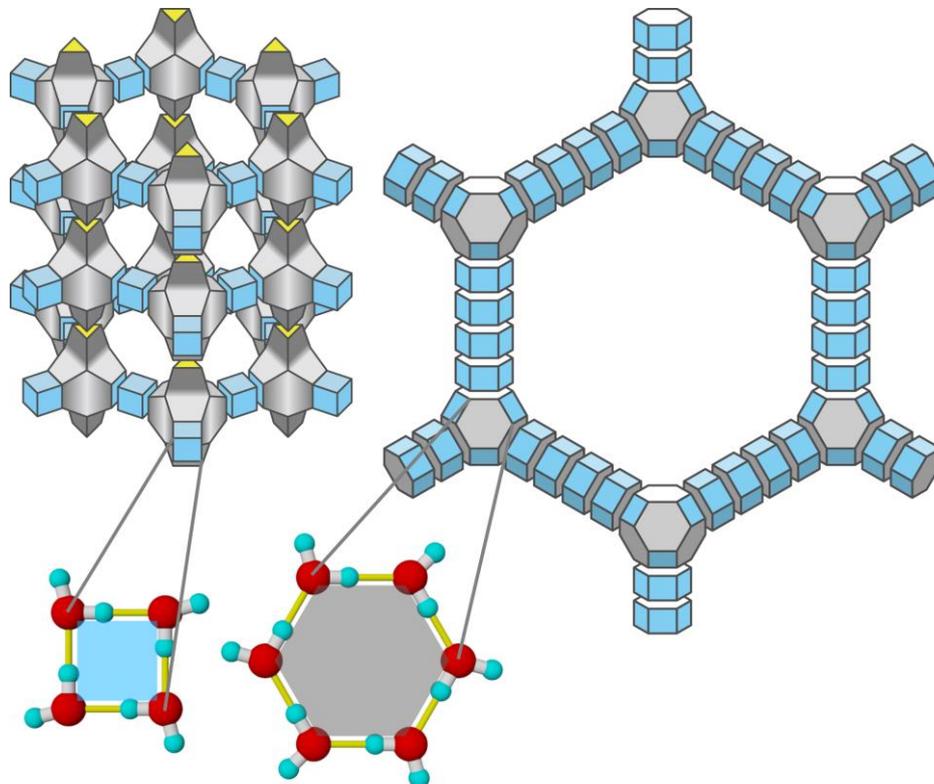


図 1 新しく発見された、ゼオライト類似の構造を持つ氷(左)と、エアロアイス(右)の結晶構造。幾何構造がわかりやすいように、氷の構造をいくつかの多面体に分割して表現した。水分子は描いていない。小さな正方形と六角形はそれぞれ 4 個、6 個の水分子から構成される(左下)。

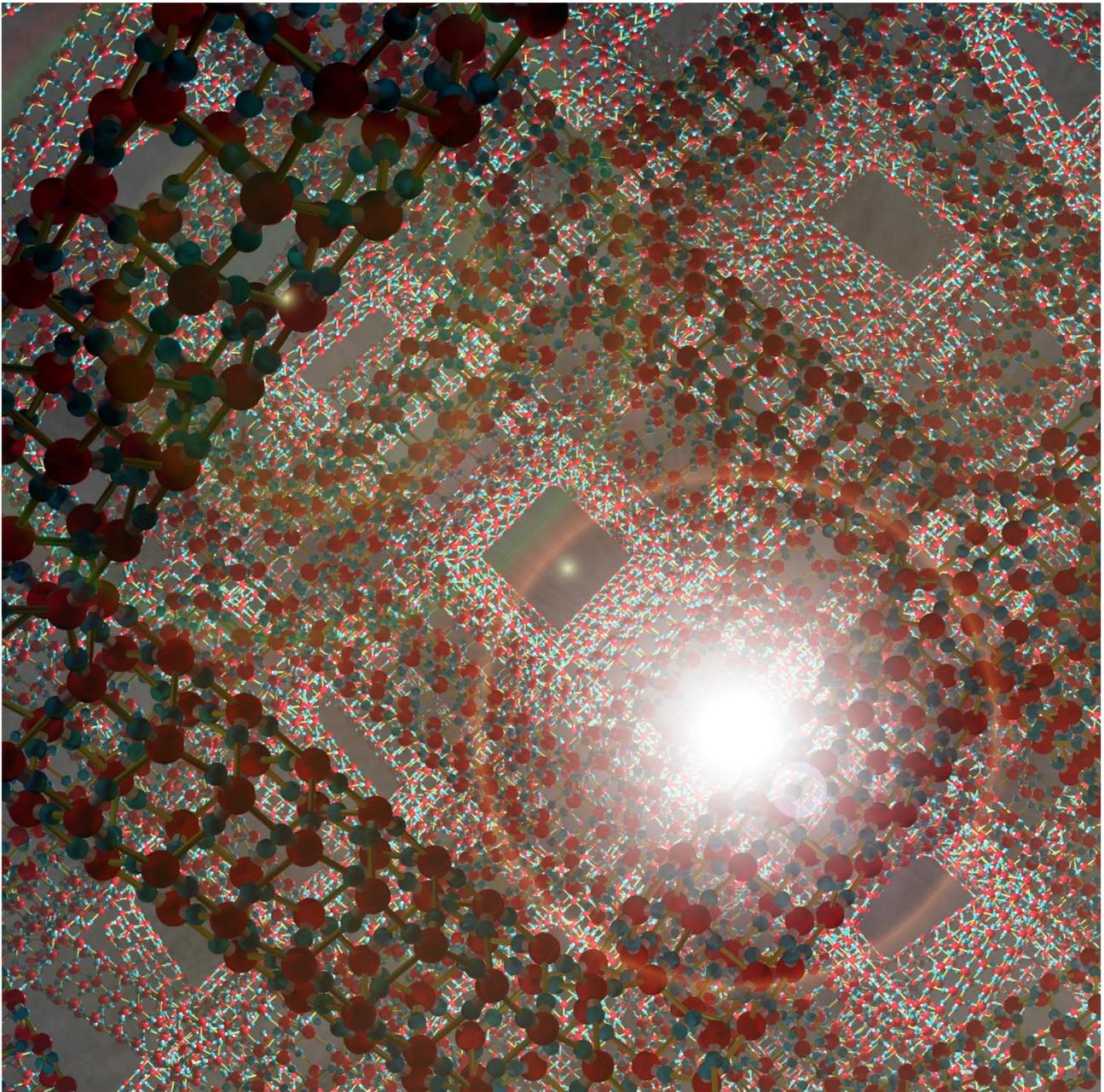


図2 エアロアイス 8xFAU の想像図 (コンピュータ・グラフィックス)



PRESS RELEASE

<用語解説>

1) ゼオライト

主にケイ素とアルミニウムの酸化物でできた、すきまの多い結晶構造を持つ無機固体。沸石。触媒や吸着剤、分子ふるいなど用途は多岐に渡る。これまでに 200 種類以上の結晶構造が発見されている。

2) エアロゲル

主に酸化ケイ素でできた、スポンジ状の固体。ほぼ透明の、雲のような外観で、同じ体積の通常の酸化ケイ素(石英)と比べると 1/100 程度の重さしかなく、極めて断熱性が高い。

本研究は、独立行政法人日本学術振興会（JSPS）科学研究費補助金（JP16K17857 および JP16K05658）の助成を受け実施しました。本研究の一部は HPCI システム利用研究課題の成果によるものです。

発表論文はこちらからご確認いただけます

<http://dx.doi.org/10.1063/1.4994757>（オープンアクセス。どなたでもご覧になれます。）

<論文情報等>

論文名：Hypothetical ultralow-density ice polymorphs

掲載誌：The Journal of Chemical Physics, Volume 147 issue 9, page 091101 (2017). (Cover Article, Featured Article) DOI: 10.1063/1.4994757

著者：T. Matsui, M. Hirata, T. Yagasaki, M. Matsumoto, and H. Tanaka

米国物理学協会からのプレスリリース：“Aeroices: Newly Discovered Ultra-low Density Ice Crystals” (Journal Highlights),

<https://publishing.aip.org/publishing/journal-highlights/aeroices-newly-discovered-ultralow-density-ice>

<お問い合わせ>

岡山大学異分野基礎科学研究所

理論化学研究室

准教授 松本 正和

（電話番号）086-251-7846

（メール）matsu-m3@cc.okayama-u.ac.jp

（URL）<http://theochem.chem.okayama-u.ac.jp>