

近畿大学理工学部理学科物理コース ソフトマター研究室セミナー
松本正和氏（岡山大学大学院理学研究科）

講演：「ガスハイドレートの結晶化ダイナミクスと、(準)結晶構造設計の可能性」

日時：11月12日（金）16時30分～17時45分 （1時間講演+質問）

場所：近畿大学理工学部31号館303室

概要：ガスハイドレートは、メタンなどの疎水性分子が、水の水素結合の作るカゴ状構造に大量にとらえられてできる、結晶固溶体である。昨年、米国のグループにより、メタンハイドレートが均一核生成を経て結晶化する過程が、大規模超長時間分子シミュレーションにより再現された。我々は、この結果をてがかりに、ガスハイドレート構造に通底する構造形成規則を明らかにし、新奇なガスハイドレート結晶構造を設計する指針を検討した。

疎水性分子は本来水にはほとんど溶けないが、水同士の水素結合の安定性を高めることで、疎水性分子の間に実効的な短距離引力が働き、疎水性分子は水の中で凝集して四面体型充填構造(Frank-Kasper構造)となる。四面体型充填構造の結晶構造は本来無数の多様性があり、ガスハイドレートが作りうる結晶構造も無数にあるはずだが、これまでガスハイドレートの安定構造は主に2種類(例外的な臭素ハイドレートを含めると3種類、高圧相は除く)しか見付かっていない。なぜ結晶の種類が少ないのかを理論的に明らかにし、限界を乗り越えて新たな結晶構造を設計する方法を提案する。Frank-Kasper相の結晶族には準結晶相が含まれているので、結晶制御ができれば、準結晶ガスハイドレートを発見できるかもしれない。

疎水性相互作用、コロイド結晶化、準結晶、アモルファス、核生成と一次相転移、準安定相転移、Frank-Kasper相などのキーワードにピンとくる人はぜひ議論にお越し下さい。

連絡先 堂寺知成 06-6721-2332 ext.4086
dotera@phys.kindai.ac.jp