

## 水のマイクロレベルでの揺らぎ、その相転移・反応の影響

（平成 14～17 年度 特別推進研究「水の多様性の発現機構」）

所属（当時）・氏名：名古屋大学大学院理学研究科・教授・大峯 巖  
（現所属：分子科学研究所・所長）

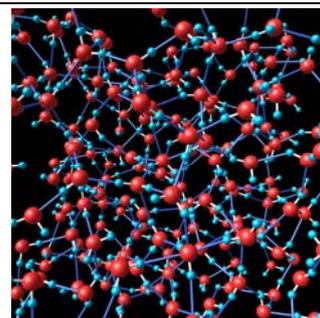
### 1. 研究期間中の研究成果

#### ・背景

水は最も身近な液体であるとともに、他の液体には見られない多くの熱力学的性質や動的性質を示す。このような水の特異性は、水分子間の強い水素結合とその3次元的構造と変化の特性に由来する。さらに、このような水素結合の特性は、水の物性だけでなく、生体分子の安定性や反応性、また気象、エネルギー・環境問題などにも深く関わっている。

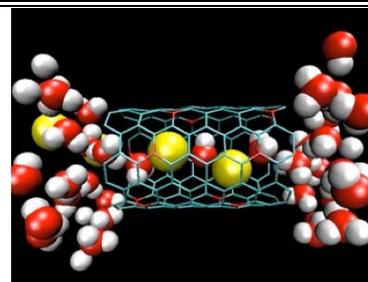
#### ・研究内容及び成果の概要

水の中の水素結合ネットワークの集団運動・揺らぎを解析する手法として、三次元ネットワークの特性を調べるフラグメント法などのいくつかの理論法の開発を行い、また水の中の運動の特性を解明するために新しい高次非線形分光法の計算・解析手法を開発した。その結果、水の物理化学的性質および運動の特性である密度・構造の不均一性、またそれから生ずる水の大きな揺らぎの原因を明らかにした。さらにそのような揺らぎが、水のかかわる化学反応へ及ぼす影響を調べた。新しい実験法である二次元ラマン分光法の理論を確立し、そのシグナルやスペクトルに現れる水のダイナミックスの解析をおこなった。



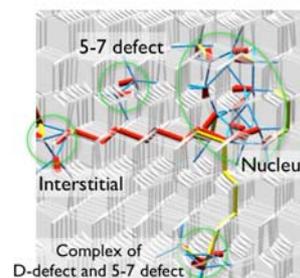
水のスナップショット

10%の水素結合が切れるだけで大きなネットワークの乱れができ、その構造が階層的に揺らぎ、その結果、水の大きな熱容量等、水の特性が生ずる



#### モデル系イオンチャンネルにおけるイオン輸送の機構の解明

イオン—水分子—チャンネルの間のエネルギー・エントロピーの微妙なバランスの時間変化で効率のよいイオン輸送が起きていることを示した。



#### 氷の融解における欠損の絡み合いのようす

融解初期にできる欠損対は一端距離が離れるとネットワークの拘束のためになかなか消えず、そのために融解が加速する。

### 2. 研究期間終了後の効果・効用

#### ・研究期間終了後の取組及び現状

水の相転移（氷化、氷の融解）における水の揺らぎの役割、またネットワークの“絡み”などネットワーク系液体特有の相転移機構を明らかにした。水の大きな比熱を生み出す、水の揺らぎの時間および空間スケールを解明した。また、イオンチャンネル、光合中心におけるイオン輸送の分子機構、光によるトリガーから大きなタンパク質構造変化を起こす機構、など生体高分子反応における水和とその揺らぎの役割を明らかにした。

#### ・波及効果

本研究で明らかになった、水の水素結合特性（揺らぎ）は、化学反応、イオン輸送、生体高分子反応など多くの現象と深く関係している。開発された幾つかの方法、例えば、フラグメント法などのネットワーク解析、また多時間相関関数に基づくダイナミックスの解析手法などは汎用性が広く、二次元電子スペクトルの解析やガラスダイナミックスの解析にも用いられている。今後その応用範囲はさらに広まると期待される。