

# 固体界面近傍における水の分子動力学シミュレーション

講師 古石 貴裕 (福井大工学研究科・准教授)

日時 平成 28 年 9 月 15 日 (木) 16 時

場所 自然科学 5 号館 2 講

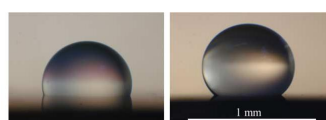
## 概要

疎水性の固体界面近傍における水及び水滴の性質を、分子動力学シミュレーションを使って調べた結果について紹介する。

(1) タンパク質の表面にはある程度の面積を持つ疎水部がある。タンパク質及び複数のタンパク質による構造体は、この疎水部を会合させることでその構造を安定化させている。水中における疎水部の会合について詳しく調べるために、2つの疎水板と水からなる系で分子動力学シミュレーションを行った。2つの疎水板の面積やその間の距離を変化させ、その間にある水の挙動を調べたところ、 $1 \text{ nm}^2$ 程度の面積の疎水部があるとその間から水が排出され、疎水部間に引力が働くことが分かった。

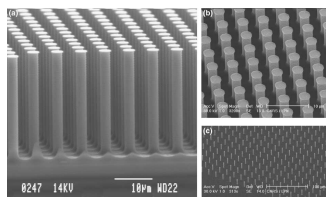
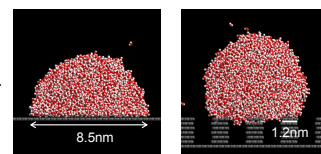
### 分子動力学シミュレーションを用いた固体表面の水滴の再現

実験

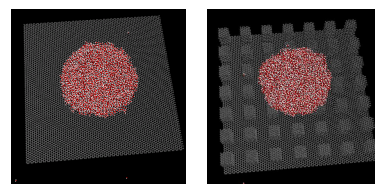


M. Callies et al. Microelectronic Engineering 78-79 (2005) 100-105

シミュレーション



シリコン表面の $\mu\text{m}$ オーダーの構造



グラファイト表面の $\text{nm}$ オーダーの構造

(2) 凹凸構造を持つ疎水性の固体表面に水滴を配置したとき、水滴の平衡位置は凹凸の上部と下部に存在することが分かっている。水滴が凹凸上部の平衡位置にあるときは水滴と凹凸の底面間に空隙が存在し、下部にあるときは凹凸内に水が浸透した状態となっている。これらの2状態間には自由エネルギー障壁が存在し、その大きさを分子動力学シミュレーションを用いて求めた。また、凹凸の高さを変化させて自由エネルギー障壁の大きさを求めたところ、その大きさは凹凸の高さに比例することが分かった。

(3) 固体表面における水滴の接触角は、その表面が親水性であるか、疎水性であるかの指標となる。また、固体表面上を水滴が移動するときの水滴の前方の接触角を前進接触角、後方の接触角を後退接触角と呼び、それらの差である接触角ヒステリシスは、表面における水滴の移動しやすさの指標となる。疎水性の凹凸面上で様々な大きさの水滴の分子動力学シミュレーションを行い、水滴の接触角ヒステリシスを求めたところ、通常の接触角ヒステリシスの他に、水滴の接触状態により接触角が異なる状態ヒステリシスが存在することが分かった。

問合せ先 数物科学類 計算科学コース 計算分子科学研究室 三浦 伸一  
後援 金沢大学先魁プロジェクト