

シュウ酸カルシウム一水和物 (100) 面上での氷核生成機構：分子動力学シミュレーション研究
Mechanism of ice nucleation on (100) plane of calcium oxalate monohydrate: a molecular dynamics simulation study

灘 浩樹^{1*}; 石川 雅也²; 越後 拓也³
NADA, Hiroki^{1*}; ISHIKAWA, Masaya²; ECHIGO, Takuya³

¹ 産業技術総合研究所環境管理技術研究部門, ² 農業生物資源研究所, ³ 滋賀大学
¹EMTECH, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), ²National Institute of Agrobiological Sciences, ³Shiga University

シュウ酸カルシウム一水和物 (Calcium Oxalate Monohydrate, COM) はシュウ酸カルシウム多形の中で熱力学的に最も安定である。COM は、地表、海底、大気中、隕石中、植物中、腎結石中などに存在する有機鉱物として知られている。これまで、COM は鉱物学や生物学、医学の分野における研究対象としてよく取り上げられてきた。

最近、石川らの実験により、ヨウ化銀や氷核バクテリアと同じように COM が氷核物質であること、COM 結晶の (100) 面が高い氷核性を示す面であることがわかってきた。COM の氷核生成促進機構の研究は、人工降雪剤の開発などとも関連して学問的にも実用的にも重要である。分子動力学 (MD) シミュレーションは、分子レベルでの氷核生成促進機構を調べるにあたり最適な手段である。そこで我々は、COM(100) 面による氷核生成促進機構を解明するための MD シミュレーションを行った。

シミュレーションにおいて、水分子間相互作用は Six-site model を用いて計算した。水分子-COM 間相互作用は Tommaso らが提案する COM モデルを用いて計算した。COM の <100> 方向には、二つの異なる分子層が交互に積み重なっている。一つはカルシウムイオンとシュウ酸イオンからなる正に帯電した Ox-1 層で、もう一つはシュウ酸イオンと水分子からなる負に帯電した Ox-2 層である。シミュレーションは、Ox-1 層と Ox-2 層に挟まれた過冷却水に対して実施した。温度は 268 K に設定した。合計で 4 ns 以上のランを実施した。シミュレーションは、Ox-2 層周辺における極性立方晶氷構造の形成を示した。しかし、六方晶氷構造の形成は見られなかった。詳しいシミュレーション結果は講演時に示す。

本研究は文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「融合マテリアル」(領域 No. 2206, 課題 No. 22107004) の支援を受けて実施している。

キーワード: 結晶成長, 核生成, 氷, 有機鉱物, 計算機シミュレーション, シュウ酸カルシウム
Keywords: crystal growth, nucleation, ice, organic mineral, computer simulation, calcium oxalate