



2024 年 6 月 24 日

報道関係者各位

慶應義塾大学

## 氷はなぜ滑る？ 分子動力学計算と機械学習手法により氷表面の 擬似液体層における分子運動の不均一性を解明

慶應義塾大学大学院理工学研究科の安田一希（博士課程 2 年）、遠藤克浩（研究当時博士課程 2 年）、同大学理工学部荒井規允准教授、泰岡顕治教授の研究チームは、氷の表面に存在する液体様の膜に着目し、分子動力学シミュレーションと機械学習によりその分子的特徴を明らかにしました。

ウィンタースポーツや凍結した路面での運転などを通して、氷が滑りやすいということは誰しもが経験します。この滑りやすさは、氷の表面に薄い水の膜である擬似液体層が形成されていることに起因します。

本研究では、大規模な分子動力学計算と機械学習を用いて、擬似液体層に含まれる分子運動を解析しました。その結果、擬似液体層の分子運動は固体の氷と液体の水のいずれとも異なっており、また動きやすい分子と動きにくい分子が空間的に不均一に存在していることを明らかにしました。この成果は、氷が示す特異的な性質の理解を深める上での重要な一歩となります。

本成果は、2024 年 5 月 29 日に Nature 出版社の『*Communications Chemistry*』に掲載されました。

### 1. 本研究のポイント

- 氷の表面に形成される擬似液体層（注 1）では、分子運動が固体や液体の内部で見られる分子運動とは異なることを示した。
- 分子動力学計算により得られる分子運動データが、氷内部での分子運動に類似しているかを機械学習により評価した。
- 擬似液体層における分子の動的不均一性を明らかにし、不均一性が氷の結晶面の種類および温度に依存することを示した。

### 2. 研究背景

氷を滑りやすくしている擬似液体層について長年多くの研究がなされてきました。近年のシミュレーション研究では、グラスに水と氷を入れると分かれるように、擬似液体層は原子レベルでは氷のような構造と水のような構造に分かれていることが提案されてきました。しかし、擬似液体層の分子的特徴については未解明な部分が多く残っています。

### 3. 研究内容・成果

本研究では、大規模な全原子分子動力学計算（注 2）と分子運動を解析する機械学習（注 3）を用いて、擬似液体層に含まれる分子の運動を解析しました。その結果、氷と水を入れたグラスで見られるように氷と水の部分が明確に分かれているのではなく、動きやすい運動と動きにくい運動が頻繁に切り替わるような性質があることを明らかにしました。また、動きやすい運動をする分子が集まりやすい性質があり、空間的に分子運動が不均一であることを明らかにしました。さらに、異なる結晶面を表面にした場合についても計算を行い、この不均一性が結晶面に応じて異なることを示しました。

#### 4. 今後の展開

氷の擬似液体層は、表面の滑りやすさの他にも、隕石や彗星でみられる化学反応といった多様な現象に影響を与えています。この成果は、氷が示す特異的な性質の理解を深める上での重要な一歩となり、物理学、化学、材料科学などの分野において重要な貢献を果たすことが期待されます。

##### <原論文情報>

論文タイトル: In-layer inhomogeneity of molecular dynamics in quasi-liquid layers of ice

著者: Ikki Yasuda, Katsuhiko Endo, Noriyoshi Arai, and Kenji Yasuoka

雑誌名: *Communication Chemistry*, **7**, Article number: 117 (2024)

DOI: <https://doi.org/10.1038/s42004-024-01197-0>

##### <研究費>

本研究は、JST CREST「革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明」(JPMJCR2093)の支援を受けたものです。

##### <用語説明>

- (注 1) 擬似液体層: 氷の表面に形成される薄い液体の層。氷の表面では水分子が十分な数の結合を作れず結晶構造を保つことができないため、不規則な構造をもつと考えられている。
- (注 2) 分子動力学計算: 運動方程式にしたがって原子の振る舞いをシミュレーションする手法
- (注 3) 分子運動を解析する機械学習: 擬似液体層の分子運動データが氷内部での分子運動に類似しているかを評価している。

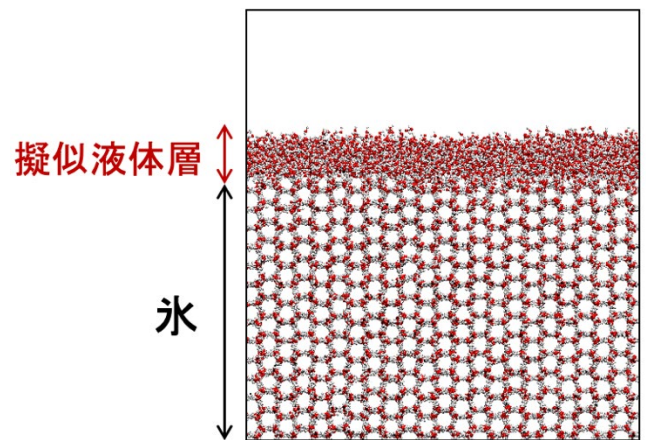
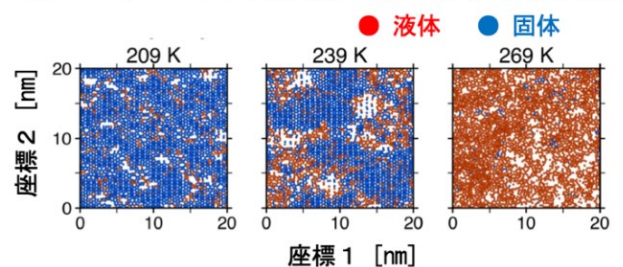


図 1. 氷の表面に形成される擬似液体層

##### 第一プリズム面の表面第一層における分子構造



##### 固体様分子が示す長距離秩序性

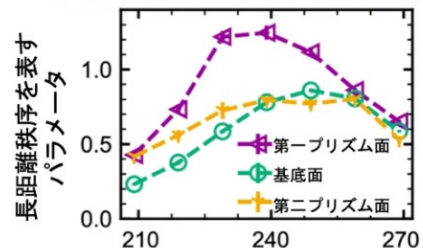


図 2. 界面垂直方向から見た表面第一層における分子構造。分子運動を解析する機械学習により固体・液体の分類をしている

※ご取材の際には、事前に下記までご一報くださいますようお願い申し上げます。

※本リリースは文部科学記者会、科学記者会、各社科学部等に送信させていただいております。

##### ・研究内容についてのお問い合わせ先

慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 教授 泰岡 顕治 (やすおか けんじ)

TEL : 045-566-1523 FAX : 045-566-1495 E-mail : [yasuoka@mech.keio.ac.jp](mailto:yasuoka@mech.keio.ac.jp)

##### ・本リリースの配信元

慶應義塾広報室 (望月)

TEL : 03-5427-1541 FAX : 03-5441-7640

E-mail : [m-pr@adst.keio.ac.jp](mailto:m-pr@adst.keio.ac.jp) <https://www.keio.ac.jp/>