

令和 8 年 2 月 20 日

報道関係者 各位

国立大学法人静岡大学
国立大学法人東京大学
国立大学法人岡山大学
国立大学法人広島大学
公益財団法人高輝度光科学研究センター
学校法人東京理科大学
国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学
学校法人芝浦工業大学

単層の氷の構造を初めて可視化 — 渦状に並んだ水分子がつくるフェロアキシャル秩序を実証 —

静岡大学理学部の野村肇宏講師の研究グループは、東京大学大学院新領域創成科学研究科の鬼頭俊介助教・有馬孝尚教授、岡山大学の小松寿式千大学院生(当時)・木村純大学院生・甲賀研一郎教授、広島大学の長谷川巧准教授・荻田典男教授、高輝度光科学研究センターの中村唯我研究員、東京理科大学の石川孟講師、名古屋大学の矢島健准教授、東京大学物性研究所の松尾晶技術専門職員・古府麻衣子教授・廣井善二教授、芝浦工業大学の富田裕介教授、大阪大学の松尾隆祐名誉教授と共同で、2次元に閉じ込められた単層の水分子が渦状の秩序構造(フェロアキシャル秩序)を示すことを発見しました。

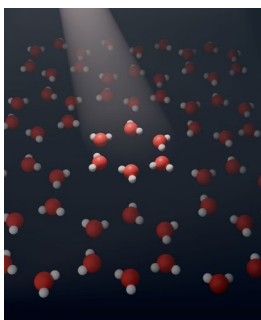
【研究のポイント】

- ・ 鉱物中に閉じ込められた単層の水分子(単層氷)が研究の舞台
- ・ ハニカム格子上に並んだ水分子は室温で定まった方向を向かずに回転
- ・ 低温で水分子が渦状に並んだ、フェロアキシャル秩序状態の新しい氷を発見

本研究では、2次元に閉じ込められた水分子の秩序構造を、放射光 X 線回折と分子動力学計算によって調べました。マーティアイトという鉱物中で、水分子はハニカム格子上に並んでおり、単層氷とみなすことができます。研究グループはこの単層氷が低温で渦状のモチーフを形成し、フェロアキシャル秩序と呼ばれる特異な秩序を示すことを明らかにしました。

この2次元氷の秩序構造は過去に予言されておらず、水という身近な研究対象がいかに複雑で謎に包まれた存在かを物語っています。2次元氷に関する知見は3次元氷を研究する礎となるものであり、今後人類が水に関する研究を進める上で重要なマイルストーンとなることが期待されます。

なお、本研究成果は、2026年2月13日に、アメリカ化学会の発行する国際雑誌「Journal of the American Chemical Society」に掲載されました。



研究者コメント

静岡大学理学部 講師・野村肇宏

水是我々生命の源とも言える物質であり、その秩序構造は人類が長年取り組んできた研究課題です。2次元氷を研究する過程で水の新たな姿を明らかにできたことはこの上ない喜びです。

【研究概要】

マーティアイトという鉱物中の水分子は、氷を一層だけ取り出して2次元に閉じ込めた、いわば単層氷とみなすことができます。本研究では、この単層氷が渦状の秩序構造(フェロアキシャル秩序)を示すことを発見しました。

【研究背景】

雪の結晶は六角形をモチーフとした形をとります。これは氷の結晶中で、水分子がハニカム格子上に整列した3次元構造をとるためです。それでは、極薄の氷を一層だけ取り出したときにどんな構造をとるでしょう？本研究はそんな単純な興味から始まりました。

研究グループはマーティアイト[martyite, $\text{Zn}_3(\text{V}_2\text{O}_7)(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$]という層状の結晶構造を持つ鉱物に着目しました(図1)。マーティアイトのフレームワーク中で水分子はハニカム格子を形成しています。つまり、氷を一層だけ取り出して、それを2次元に閉じ込めたような状況が鉱物中で自然と実現しています。ハニカム格子上に配置された水分子は定まった方向を向くのではなく、面内をくるくる回転しています。これは幾何学的なフラストレーション*^{注1}により、全ての水分子を同時に安定に並べることができないためです。マーティアイトを室温から冷却したときに、回転していた水分子がどのようにお互いを配慮しながら整列するかは容易には予測できません。

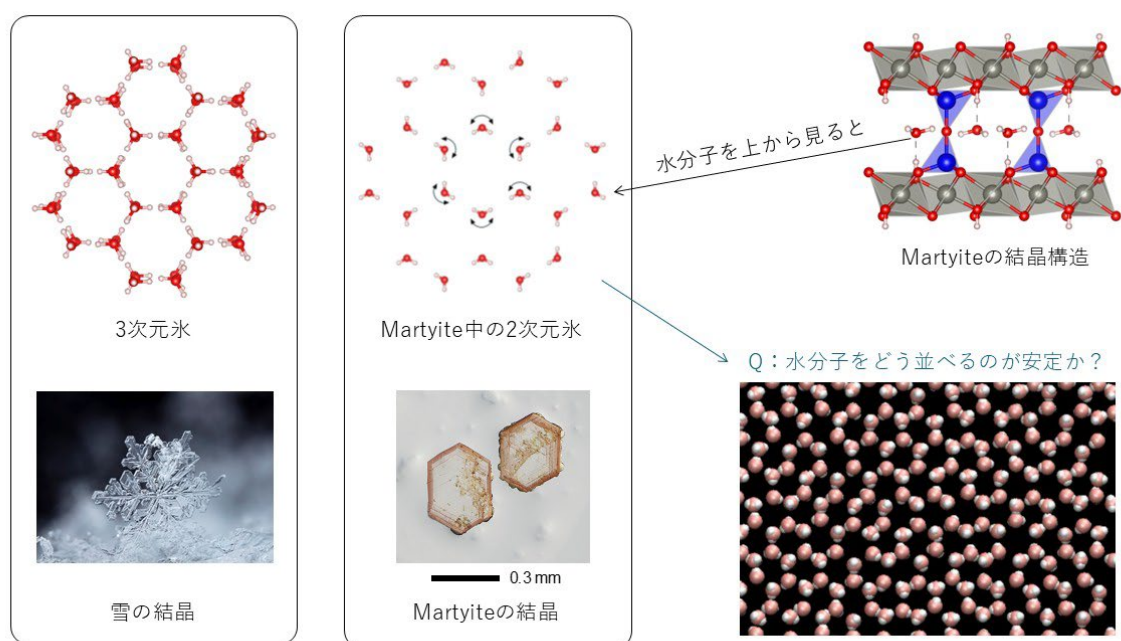


図1: 3次元氷と2次元氷のハニカム格子(水分子の蜂の巣状配列)。

マーティアイト中で回転する水分子がどう整列するかは非自明。

【研究の成果】

大型放射光施設「SPring-8」*^{注2}のBL02B1で単結晶X線回折実験の結果、マーティアイト中の水分子の低温構造では、6個の水分子がまとまった渦状のモチーフ(六量体)を形成していることがわかりました(図2)。分子動力学計算を用いた単層氷のシミュレーションからも同様の水六量体が形成されることが明らかになり、マーティアイト中の水分子がたしかに単層氷とみなせることがわかりました。この水六量体では、水分子が電気分極を持つことから、電気双極子モーメントの渦が形成されることになります。このような多極子は電気トロイダルモーメントと呼ばれ、それらがそろった状態をフェロアキシャル秩序と呼びます。本研究から単層氷の安定構造がフェロアキシャル秩序であることが明らかになりました。

これまで20種類以上の氷の結晶構造*^{注3}が報告されてきましたが、本研究で明らかになったフェロアキシャル秩序は理論的にも提案されたことがありませんでした。2次元に配置された水分子が作る渦状のモチーフは雪の結晶に劣らず美しく、自然の偉大さを再認識させられます。

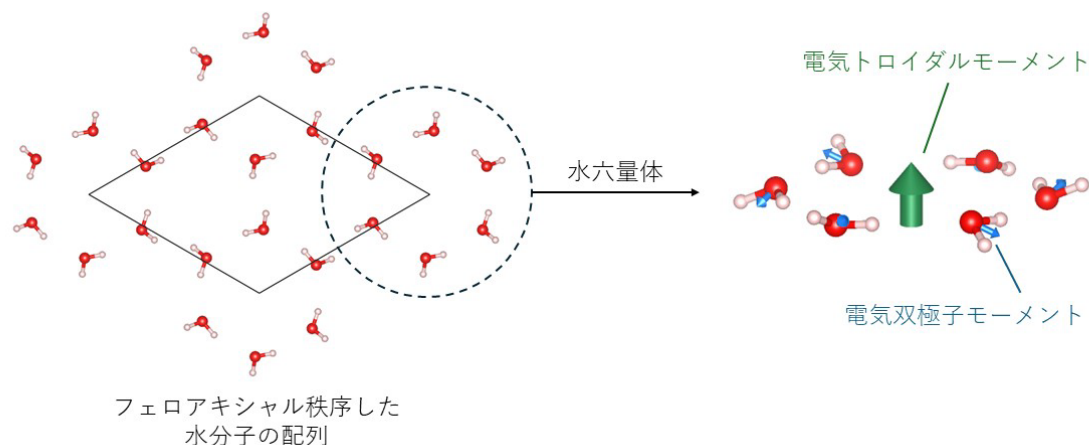


図 2：水分子のフェロアキシアル秩序と水六量体。
渦状の電気双極子が電気トロイダルモーメントを作る。

【今後の展望と波及効果】

水分子がどのような安定構造をとるのかという問いは、氷・水・界面現象を理解する上で人類にとって不可欠な問題です。それは氷が水に浮くことや、凍結した路面が滑るといった日常的な現象を理解する上でも重要な知見です。他方で、3次元氷の秩序は複雑かつ微妙な問題であり、人類が完全に理解したと言うには遠い状況です。本研究で明らかになった2次元氷の構造を足がかりに、水の理解が進展する可能性があります。

【論文情報】

掲載誌名: Journal of the American Chemical Society

論文タイトル: Ferroaxial order of the monolayer ice in martyite

著者: T. Nomura, S. Kitou, J. Komatsu, J. Kimura, K. Koga, T. Hasegawa, N. Ogita, Y. Nakamura, H. Ishikawa, T. Yajima, A. Matsuo, M. Kofu, O. Yamamuro, Z. Hiroi, Y. Tomita, T. Arima, T. Matsuo

DOI: 10.1021/jacs.5c19407

【研究助成】

本研究は日本学術振興会 科学研究費助成事業 (22K14010, 23H04861, 24K06944, 24H01644, 24H01650, 25K00969) による助成を受けたものです。

【用語説明】

注 1 幾何学的なフラストレーション: 格子の幾何学的配置のために、すべての相互作用を同時に満たせない状態。ハニカム格子上的水分子の場合、全てのペアで水素結合を形成することができず、不安定なペアが必ず存在してしまう。

注2 大型放射光施設 SPring-8: 理化学研究所が所有する兵庫県の播磨科学公園都市にある世界最高性能の放射光を生み出す大型放射光施設で、利用者支援等は高輝度光科学研究センター (JASRI) が行っています。SPring-8 (スプリングエイト) の名前は Super Photon ring-8 GeV に由来。SPring-8 では、放射光を用いてナノテクノロジー、バイオテクノロジーや産業利用まで幅広い研究が行われています。

注3 氷の結晶構造: 圧力と温度を制御することで多種多様な氷の結晶構造が出現することが知られている。これまでに 20 種類が確認されており、今後も増える可能性がある。