

日本鉱物科学会研究奨励賞

平成25度日本鉱物科学会研究奨励賞第13回受賞者

佐久間 博 会員 (物質・材料研究機構)

対象業績:「分子動力学計算, 表面 X 線散乱実験および表面力測定による, 鉱物表面/水界面の構造・物性に関する研究」



佐久間 博会員は, 分子動力学計算, 表面 X 線散乱実験および表面力測定を駆使し, 断層に含まれる雲母・粘土鉱物の摩擦強度と吸着水の関係, イオン置換によるカルサイト表面の親水性・新油性のスイッチ, 新たな H₂O モデルの開発による地殻内超臨界 H₂O-NaCl 流体の電気伝導度の予測など, 鉱物表面/水界面に関して, 独自性の高い多くの研究成果を上げている。

断層に含まれる雲母・粘土鉱物表面の吸着水に関する研究では, 表面力装置を用いて, 雲母表面間の薄膜水の厚みを 0.3 nm の分解能で制御・測定し, NaCl 水溶液の場合, 厚さ 1 nm 以下でも高い潤滑性があることを発見した。この実験事実の解釈のために, 表面 X 線散乱実験と分子動力学計算を実施し, 雲母表面に吸着した水和 Na⁺ の存在が不可欠であることを明らかにした。また第一原理電子状態計算から, 白雲母に吸着した水和 Na イオン中の水は自由エネルギー的に安定であり, 室温でギガパスカルに相当する高い差応力を支えることを明らかにした。

イオン置換によるカルサイト表面の親水性・新油性のスイッチに関する研究は, 石油の回収率増進や環境中の毒物の回収と直結している。ヨーロッパにおける石油貯留岩の主たる構成鉱物であるカルサイトの表面について第一原理電子状態計算を実施し, Mg²⁺ と SO₄²⁻ を含む塩水と接すると表面のイオン置換が起こり, カルサイト表面の性質が親水性から新油性になることを提案した。

最近の顕著な研究成果として, 地殻の温度・圧力条件で, 分子動力学計算に利用できる H₂O モデルの開発がある。地殻中の水・メルトは地震発生や火山噴火に影響を与えていると考えられており, その分布を知ることが重要である。地殻中に多く存在するであろう塩水は, 岩石に比べて大きな電気伝導度を示し, マグネトテリック (MT) 法で観測されている高電気伝導度領域は塩水の存在を示している可能性が高い。しかしながら, 実験の困難さから, 地殻の高温・高圧条件における塩水の電気伝導度の実測値が存在せず, MT 観測を説明する構造モデルの構築が難しかった。そこで, 独自に開発した H₂O モデルを用いた分子動力学計算から電気伝導度を導出する研究に取り組み, 地殻における H₂O-NaCl 流体の状態方程式・電気伝導度, および分子論的描像を明らかにした。この成果はナノスケールの分子挙動とキロメートルスケールの観測をつなぐ独自性の高い研究成果である。

以上の様に, 佐久間会員は, 鉱物科学で主要な研究課題である鉱物表面/水界面の構造・物性の分野で独自性の高い研究業績を挙げ, 今後も鉱物科学の発展に大きな貢献が期待される。よって, 佐久間会員を日本鉱物科学会研究奨励賞受賞者として推薦する。

佐久間 博 会員の主要論文

1. H. Sakuma, M. Andersson, K. Bechgaard, S. Stipp (2014) Surface Tension Alteration on Calcite, Induced by Ion Substitution. *Journal of Physical Chemistry C*, 118, 3078-3087, doi: 10.1021/jp411151u.
2. H. Sakuma (2013) Adhesion Energy between Mica Surfaces: Implications for the Frictional Coefficient under Dry and Wet Conditions. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 118, 6066-6075, doi: 10.1002/2013JB010550.
3. H. Sakuma, M. Ichiki, K. Kawamura, K. Fuji-ta (2013) Prediction of Physical Properties of Water under Extremely Supercritical Conditions: A Molecular Dynamics Study. *Journal of Chemical Physics*, 138, 134506, doi: 10.1063/1.4798222

佐久間 博 会員の略歴

- 1999年 3月 東北大学理学部地圏環境科学科卒業
2001年 3月 東北大学大学院理学研究科博士前期課程修了
2004年 3月 東北大学大学院理学研究科博士後期課程修了 (博士: 理学)
- 2004年 4月 東北大学多元物質科学研究所 CREST 研究員
2005年 4月 東北大学多元物質科学研究所 助手
2006年 4月 東北大学多元物質科学研究所 助教 (名称変更による)
- 2008年 4月 東京工業大学大学院理工学研究科地球惑星科学 専攻 研究員
2010年 4月 東京工業大学大学院理工学研究科地球惑星科学 専攻 特任助教
2011年 6月-12月 コペンハーゲン大学ナノサイエンス センター 客員准教授
2014年 1月 物質・材料研究機構 環境再生材料ユニット 主任研究員
2014年 9月 現在に至る