

水素と水のクラスターに関する理論的研究

¹長崎西高校, ²岐阜大・地域科学, ³慶大・理工
○斉藤暖人¹, 雪野真慧¹, 権藤好信¹, 橋本智裕², 岩田末廣³

Theoretical Study of Hydrogen and Water Cluster

○Saito Haruto¹, Masato Yukino¹, Yoshinobu Gondoh¹,
Tomohiro Hashimoto², Suehiro Iwata³

¹*Nagasaki Nishi High School, Japan*

²*Faculty of Regional Studies, Gifu Univ, Japan*

³*Faculty of Engineering Science, Keio Univ, Japan*

【Abstract】

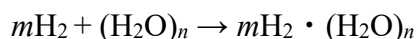
We were interested in the pseudo-science, so we paid an attention to the “hydrogen water”, which is said to be good for our health and beauty. We searched the internet for the structure of “hydrogen water” and found a site^[b] which claims that the “hydrogen water” exists in the form of H₁₄O. Obviously, the structure is impossible to exist because an oxygen atom has two unpaired electrons. Nonpolar molecules are also difficult to dissolve in polar solvent. Therefore, we examined the interaction between hydrogen and water clusters, and computed how much binding energies they have.

【序】

疑似科学というものに関心を抱いた。そこで、美容や健康に良いとされている^[a]水素水に注目した。インターネットで水素水の構造について調べてみたところ H₁₄O という形で存在しているとされていたが^[b]、酸素原子の不対電子は2つのため、有り得ない。また、常温常圧において水中に水素が多量に溶解して存在することも、極性溶媒に無極性分子が溶けにくいということから考えて、有り得にくいことである。そこで、水素と水クラスターの相互作用について調べ、水素と水のクラスターが安定して存在し得るかについて量子化学計算を行った。

【計算方法】

本研究では下記の反応：

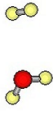
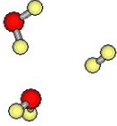
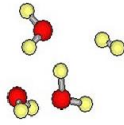
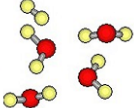
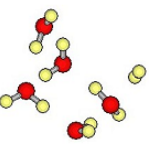
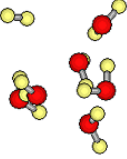
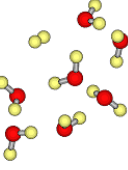
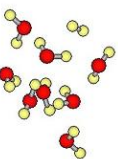


において、MP2法を用いて構造最適化を行った。基底関数はO原子にはaug-cc-pVDZ、H原子にはcc-pVDZを使用し、計算ソフトとして石村のSmashを利用した。相互作用の解析にはmolyxを使用した。

【結果・考察】

主なクラスターの構造は次のようになる。

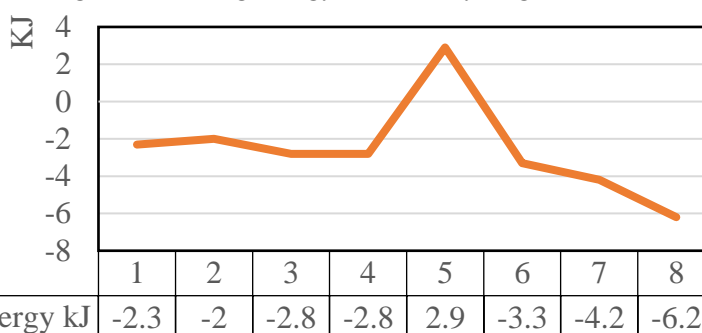
<表面吸着型の構造>

(<i>m,n</i>)	1,1	1,2	1,3	1,4
Structure				
(<i>m,n</i>)	1,5	1,6	1,7	1,8
Structure				

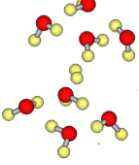
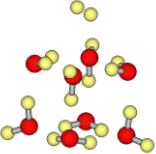
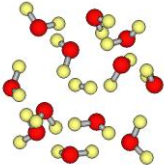
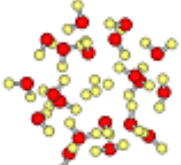
水素と水の間の結合エネルギーは次のグラフ Figure 1 に示す通りである。

表面に水素分子が吸着した形の水クラスターでは、 $\text{H}_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_5$ を除いてクラスターを形成した方が安定になる。

Figure 1 Binding energy between hydrogen and water



<メタンハイドレード型>

(<i>m,n</i>)	1,8	1,8	1,12	2,20
Binding energy(kJ)	37.2	-2.3	2.1	0.0
Structure				

経験的相互作用ポテンシャルを使って見いだされているメタンハイドレード型^[c] ^[d]の構造をとった安定なクラスターを、これまでの本研究では見つける事ができていない。特に $\text{H}_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_8$ のクラスターについては、立方体の水素結合が切れ、かなり不安定となる。立方体の表面に吸着した構造のものは安定化してはいることから、水クラスターの内部に取り込まれるということは考えにくい。水 1 L における水素分子の^[e]常温常圧での溶解度は、1.6 mg と非常に小さく、1 分子を水和するために約 7 万個の水分子が必要なことを意味する。このことからより大きなクラスターについて研究をしていく必要性がある。

【参考文献】

- [a] <https://ja.wikipedia.org/wiki/水素水>
- [b] <http://www.h14o.com/process/manufacture.html>
- [c] P. Diep, J. K. Johnson, J. Chem. Phys. **112**, 10 (2000)
- [d] M. Xu *et al.*, J. Chem. Phys. **128**, 244715 (2008)
- [e] F. Sebastianelli *et al.*, J. Chem. Phys. **129**, 244706 (2008)
- [f] 第一学習社 スクエア最新図説化学