

## 氷 VII 相におけるプロトンダイナミクス Proton dynamics in ice VII

飯高 敏晃<sup>1\*</sup>

IITAKA, Toshiaki<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> 理化学研究所

<sup>1</sup>RIKEN

水素結合中のプロトンダイナミクス、とくに水分子の解離・再結合反応は、多くの化学系、生命系における物理化学現象の基礎過程である [1]。本講演では、氷衛星に存在するかもしれない氷 VII 相 (Ice VII) [2] におけるプロトン電気伝導度 (拡散係数) を、氷中に生成されるイオン欠陥と回転欠陥の輸送に基づいた非平衡統計力学、および酸素原子と水素原子の運動に基づいた分子動力学計算を用いて検討した。二つの計算方法による伝導度の温度圧力依存性を図に示す。これらの結果に現れる伝導度のピークを、(1) イオン欠陥伝導と回転欠陥伝導の協働、(2) 「プラスチック相」 [3] から「結晶相」への遷移、の二つの観点から解釈する。これらの観点に基づいて、最近の高圧実験による Ice VII における電気伝導率の測定結果 [4] やプロトンケミストリーを議論する。

[1] M. Eigen and L. de Maeyer, Proc. R. Soc. Lond. A 247, 505 (1958).

[2] E. Sugimura et al., Phys. Rev. B 77, 214103 (2008).

<http://www.iitaka.org/>

[3] Y. Takii et al., J. Chem. Phys. 128, 204501 (2008).

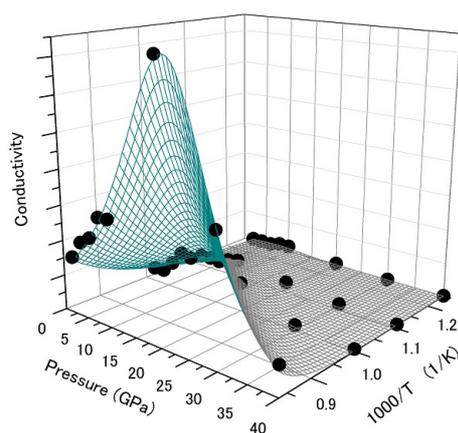
[4] T. Okada et al., Abstract of Japan Geoscience Union Meeting 2011, SMP045-18.

<http://www2.jpgu.org/meeting/2011/yokou/SMP045-18.pdf>

図：氷の高圧相 (Ice VII) の電気伝導率の温度・圧力依存性。黒丸は分子動力学による計算値、曲面は非平衡統計力学によるフィットを表す。

キーワード：氷, 高圧相, プロトンダイナミクス, 電気伝導度, 点欠陥, プラスティック相

Keywords: ice, high pressure phase, proton dynamics, electric conductivity, point defect, plastic phase



## 氷 VII 及び VIII のプロトン伝導率の圧力温度変化と相関係

## Pressure and temperature response of proton conductivity of ice VII and VIII, and their phase relations

岡田 卓<sup>1\*</sup>, 八木 健彦<sup>1</sup>

OKADA, Taku<sup>1\*</sup>, YAGI, Takehiko<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 東京大学物性研究所

<sup>1</sup>ISSP, Univ. of Tokyo

### 1. はじめに

約 2~60GPa で安定な H<sub>2</sub>O の固相は高温側で VII 相、低温側で VIII 相の 2 種類のみと一般的に考えられてきた。最近、X 線回折や分光学的手法に基づいて、約 14GPa 付近に相転移もしくは何らかの変化があることが指摘された [1-5]。本研究では、交流インピーダンス法により、約 2~40GPa・263~300K において、氷 VII と VIII のプロトン抵抗の圧力・温度変化を測定した。得られたプロトン伝導率変化の原因と、相関係について考察する。

### 2. 実験

立方晶 BN 絶縁層と組み合わせた Re ガスケットの試料室穴に、白金又は金電極を擬似四端子配置し、脱イオン蒸留水を詰め、キュレット径 0.35mm のダイヤモンドアンビルで加圧した。電極は LCR メーターに接続した。1V を印可し、各周波数 (20~1MHz) で、交流インピーダンスの実数部 (抵抗 R) と虚数部 (リアクタンス X) を得た。R-X プロットを半円でフィットし、その直径を試料バルクのプロトン抵抗値とした。各圧力で電極間の試料形状を測定し、抵抗値を補正して、プロトン伝導率を得た。発生圧力はダイヤモンドアンビル先端のラマンシフトから決定した。目標圧力でセルごと冷凍庫に入れて温度を変化させた。発生温度はアンビルテーブル面に密着させた K 熱電対によって決定した。一部のランでは KEK-PF-AR-NE1 にて X 線回折パターンを取得した。

### 3. 結果と考察

室温下加圧中のプロトン伝導率は、約 2.2GPa における VI-VII 転移で約 1 桁低下して約 3GPa で極小値を取った後、加圧に伴って上昇し、約 10GPa では 3GPa よりも 1 桁近く大きい極大値を取った。その後加圧に伴って低下し、約 20GPa では 3GPa と同程度の伝導率となった。以降 40GPa までほぼ変化は無かった。室温高圧下粉末 XRD 測定によって、[4] と同様の立方晶 VII 相ピークのわずかな分裂が、約 10GPa 以降で観察された。よって、高伝導率異常は、VII の圧力誘起構造変化 [4] に起因するものと推定される。

定荷重温度変化実験では、低温ほど低い伝導率を示し、水素秩序配列 VIII 相は無秩序配列 VII 相よりも低伝導率であった。よって、H<sub>2</sub>O 氷の伝導率変化では、プロトンの移動度 (平均自由行程) 変化よりも濃度変化が支配的であることを示唆する。従って、水素無秩序配列 VII 相よりも秩序度の高い不整合変調構造相 [1] の出現によって高伝導率状態を解釈することはできない。

定荷重下 VII-VIII 境界では、伝導率の明瞭な不連続や温度依存性の大きな変化は観察されなかった。即ち、約 10GPa の高伝導率異常は、VIII 相でも存在する。これは、より低温下・10~15GPa で観測された VIII 相の c/a 比変化の異常 [2,3] やラマンスペクトルの変化 [2,5] から推定された構造変化の存在と調和的である。

[1] Loubeyre et al. (1999) Nature 397, 503.

[2] Pruzan et al. (2003) J. Raman Spectrosc. 34, 591.

[3] Yoshimura et al. (2006) J. Chem. Phys. 124, 024502.

[4] Somayazulu et al. (2008) J. Chem. Phys. 128, 064510.

[5] Yoshimura et al. (2011) J. Phys. Chem. B 115, 3756.

キーワード: 氷, プロトン伝導率, 高圧, 低温, 相転移

Keywords: ice, proton conductivity, high pressure, low temperature, phase transition

## 水素ハイドレートの低温高圧相変化

### Phase change of hydrogen hydrate under low temperature and high pressure

平井 寿子<sup>1\*</sup>, 香川 慎伍<sup>1</sup>, 田中 岳彦<sup>1</sup>, 松岡 岳洋<sup>2</sup>, 大石 泰生<sup>3</sup>, 八木 健彦<sup>4</sup>, 山本 佳孝<sup>5</sup>, 大竹 道香<sup>5</sup>

HIRAI, Hisako<sup>1\*</sup>, KAGAWA Shingo<sup>1</sup>, TANAKA Takehiko<sup>1</sup>, MATSUOKA Takahiro<sup>2</sup>, OHISHI Yasuo<sup>3</sup>, YAGI Takehiko<sup>4</sup>, YAMAMOTO Yoshitaka<sup>5</sup>, OHTAKE Michika<sup>5</sup>

<sup>1</sup> 愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター, <sup>2</sup> 阪大極限センター, <sup>3</sup> JASRI, <sup>4</sup> 東大物性研, <sup>5</sup> AIST

<sup>1</sup>GRC, <sup>2</sup>KYOKUGEN, <sup>3</sup>JASRI, <sup>4</sup>ISSP, <sup>5</sup>AIST

Filled ice Ic 構造水素ハイドレートについてクライオスタットを用いて 30~300K および 5~55GPa の温度圧力範囲で低温高圧実験を行った。X 線回折によって理論予測された cubic から tetragonal への構造変化を観察し、相転移境界を推定した。また、ラマン分光による水素分子の振動モードの測定を行い、振動数の波数変化の傾きが相境界において変化することが示された。

キーワード: 水素ハイドレート, 相変化, 低温, 高圧

Keywords: hydrogen hydrate, phase change, low temperature, high pressure

## 第一原理計算による含水ケイ酸マグネシウムの圧縮機構の検討 Investigation of compressional mechanism of hydrous magnesium silicate by first-principles calculations

山本 知之<sup>1\*</sup>

YAMAMOTO, Tomoyuki<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> 早大理工

<sup>1</sup>Faculty of Science and Engineering, Waseda university

It is widely accepted that the atmosphere and the oceans of the Earth are formed by degassing of the Earth's mantle. Most of the water may have been lost or it may still be stored in the Earth's mantle. If considerable amounts of water are present in the Earth's mantle, such water plays a key role in the geodynamics of the Earth's interior, because it affects the melting temperature and the transport properties of minerals as well as their elastic properties. Recent high pressure experiments suggested that main components of the transition zone of the mantle, wadsleyite and ringwoodite, can store significant amount of water [1-4], and the lower mantle minerals, consisting of Mg-perovskite, magnesiowustite and Ca-perovskite, can potentially store considerable amounts of water [5]. More recently, the substitution mechanism of protons in wadsleyite was studied experimentally by using neutron diffraction technique [6] and theoretically by the first-principles calculations [7] within the density functional theory (DFT) [8]. However the effects of water solution on their physical properties have not yet been fully understood. Then the first principles DFT calculations are performed here to investigate change in compression mechanism of hydrous  $Mg_2SiO_4$ ,  $MgSiO_3$  and  $MgO$ , and influence of proton incorporation on the phase transitions between three polymorphs of  $Mg_2SiO_4$ , i.e. forsterite, wadsleyite and ringwoodite, and partitioning of  $Mg_2SiO_4$  into  $MgSiO_3$  and  $MgO$ . Calculated bulk moduli of hydrous  $Mg_2SiO_4$  have become significantly lower than that of water-free one, in which the calculated result of ringwoodite supports the high pressure experiment [9]. Calculated bulk moduli of hydrous Mg-perovskite and periclase are also much lower (-10%) than that of anhydrous one. Our free energy calculations suggest that partitioning pressure from hydrous ringwoodite to perovskite and hydrous periclase become significantly larger than that for anhydrous case. If water remains considerable amounts of water in the lower mantle, there has still been possibility that 660 km seismic discontinuity is derived from the partitioning between hydrous minerals.

### References

- [1] Inoue, T., Yurimoto, H. & Kudoh, Y., *Geophys. Res. Lett.* 22, 117-120 (1995).
- [2] Kohlstedt, D.L., Keppler, H. & Rubie, D.C., *Contrib. Mineral. Petrol.* 123, 345-357 (1996).
- [3] Yusa, H., Inoue, T. & Ohishi, Y., *Geophys. Res. Lett.* 27, 413-416 (2000).
- [4] Ohtani, E., Mizobata, H. & Yurimoto, H., *Phys. Chem. Minerals.* 27, 533-544 (2000).
- [5] Murakami, M., Hirose, K., Yurimoto, H., Nakashima, S. & Takafuji, N., *Science* 295, 1885-1887 (2002).
- [6] Sano-Furukawa, A., Kuribayashi, T., Komatsu, K., Yagi, T., and Ohtani, E., *Phys. Earth Planet. Interiors* 189, 56-62 (2011).
- [7] Tsuchiya, J., and Tsuchiya, T., *J. Geophys. Res.* 114, B02206 (2009).
- [8] Payne, M.C., Teter, M.P., Allan, D.C., Arias, T.A. & Joannopoulos, J.D. *Rev. Mod. Phys.* 64, 1045-1097 (1992).
- [9] Inoue, T., Weidner, D.J., Northrup, P.A. & Parise, J.B., *Earth Planet. Sci. Lett.* 160, 107-113 (1998).

キーワード: 第一原理計算, ケイ酸マグネシウム, 相転移, 弾性定数, 体積圧縮率

Keywords: first principles calculation, magnesium silicate, phase transition, elastic modulus, bulk modulus

## 高温高圧下におけるブルーサイト中の水素同位体の振る舞い Behavior of hydrogen isotopes in brucite at high pressures and temperatures

富岡 尚敬<sup>1\*</sup>, 奥地 拓生<sup>1</sup>, Narangoo Purevjav<sup>1</sup>, Guo Xinzhuan<sup>1</sup>  
TOMIOKA, Naotaka<sup>1\*</sup>, OKUCHI, Takuo<sup>1</sup>, NARANGOO, Purevjav<sup>1</sup>, GUO, Xinzhuan<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 岡山大学地球物質科学研究センター

<sup>1</sup> ISEI, Okayama University

Hydrogen plays important roles in chemical and physical properties of hydrous minerals such as rheology, electrical conductivity, and diffusivity. Brucite  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  is one of the representative hydrous minerals occurring in the earth's crust and mantle. It has a  $\text{CdI}_2$  structure (S.G.  $P-3m1$ ), which is consisted of edge-sheared  $\text{MgO}_6$  octahedra where OH-bonds are bound along  $c$ -axis (Zigan and Rothbauer 1967). The brucite layer is a fundamental building unit of hydrous phyllosilicate including micas, serpentines, clay minerals and dense magnesium hydrous silicates (DMHS). OH-bond possibly largely affects the nature of interlayer forces and the stability of such hydrous phases under geological pressure and temperature conditions. In the present study, we have performed X-ray powder diffractometry, micro-Raman spectroscopy and high pressure-temperature interdiffusion experiments of hydrogen isotopes in brucite to understand their behaviors at high pressures and high temperatures.

Protonated and deuterated water were mixed to be desired D/H ratios, and then added to MgO powder. The starting materials encapsulated in an autoclave were heat at 250 degC and under autogenic pressure as high as 40 bars for 168 h. The grain size of recovered brucite is smaller than 10 micron in diameter. In order to determine isotope effects on lattice parameters, the brucite powders were examined by X-ray powder diffractometer. In diffusion experiments, two semi-circular disks of pure  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  and  $\text{Mg}(\text{OD})_2$  were compressed in a diamond anvil cell and heated at 300 degC for 740 hours in a furnace in argon atmosphere. The pressures of the samples after cooling were ~1-2 GPa. H-D diffusion profiles of recovered samples were obtained on the basis of the intensity ratios of OH and OD stretching peaks by a micro-Raman spectroscopy.

An isotope effect on lattice parameters of brucite could be successfully recognized by precise XRD measurements in the present study. The  $a$ -axis of brucite is nearly constant with respect to the D/H ratio. However, the  $c$ -axis of  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  linearly decreases down to 99.7 % with increasing deuterium content. This tendency suggests that the OH- and OD-bonds oriented along  $c$ -axis constrain the spacing of basal plane of the brucite structure. Smaller amplitude of the stretching vibration of OD than that of OH causes the shrinkage of  $d_{0001}$ . Diffusion profile measurements of the recovered sample from 1.8 GPa and 300 degC tentatively clarified that the H-D interdiffusion coefficient ( $D_{H-D}$ ) is  $10^{-15}$   $\text{m}^2/\text{s}$  order. This value tends to be much larger than those of other cations in silicates. For instance, the  $D_{H-D}$  of brucite is more than ten orders of magnitude larger than the Si-self diffusion coefficient in forsterite estimated considering the same temperature and grain size with those in the present study (Brady 1983, Hallwig et al. 1982). It was also clarified that the  $D_{H-D}$  in  $\text{Mg}(\text{OH})_2$  is faster than that in  $\text{Mg}(\text{OD})_2$ . This fact is inconsistent with that small distance between nearest-neighboring hydrogen isotopes in  $\text{Mg}(\text{OD})_2$ , which is deduced from its  $c$ -axis length, could enhance exchange of hydrogen isotopes. The width of hydrogen-bearing layers is not simply related to the  $D_{H-D}$ . Higher frequency ( $3650 \text{ cm}^{-1}$ ) of OH stretching vibration than that of OD ( $2693 \text{ cm}^{-1}$ ) is a plausible explanation of high  $D_{H-D}$  in proton-rich brucite. OH-bond which is a majority of hydroxyl bonds in proton-rich brucite would cause high probability of hydrogen isotope exchange.

キーワード: ブルーサイト, 水素同位体, 拡散, ダイヤモンドアンビルセル, 格子定数  
Keywords: brucite, hydrogen isotopes, diffusion, diamond anvil cell, lattice parameters

## 水酸化カルシウムの室温高圧下での構造相転移と水素結合の圧力応答 Pressure-induced phase transition and high-pressure response of hydrogen bonds in portlandite

飯塚 理子<sup>1\*</sup>, 八木 健彦<sup>2</sup>, 後藤 弘匡<sup>2</sup>, 小松 一生<sup>1</sup>, 鍵 裕之<sup>1</sup>

IIZUKA, Riko<sup>1\*</sup>, YAGI, Takehiko<sup>2</sup>, Hirokata Gotou<sup>2</sup>, KOMATSU, Kazuki<sup>1</sup>, KAGI, Hiroyuki<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 東京大学大学院理学系研究科地球化学研究室, <sup>2</sup> 東京大学物性研究所

<sup>1</sup> Grad. School Sci. Univ. Tokyo, <sup>2</sup> ISSP Univ. Tokyo

水酸化カルシウム (鉱物名 portlandite) は、ブルーサイト型の金属水酸化物に属し、水素結合を有する層状の含水鉱物のアナログ物質である。同一構造をもつ金属水酸化物の中でも、室温下約 20 GPa でのアモルファス化のほか、約 6 GPa で構造未解明の高圧相に相転移し、特異的な圧縮特性を示すことが知られている。しかし、きわめて単純な構造でありながら、portlandite の数々の先行研究では実験条件の違いにより、圧力誘起相転移について未解明な点が多かった [1-4]。また、先行の中性子回折実験 [5, 6] によると、4.5 GPa まで水素原子での反発、水素結合が強まることが報告されているが、それ以上の高圧下での水素の振る舞いについての報告はなく、室温高圧相中の水素結合の寄与はいまだ明らかになっていない。本研究では、ダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用い、準静水圧条件における高圧下その場観察を行い、圧力応答の詳細と室温高圧相の結晶構造を明らかにした。

広角側のブラッグ反射が得られるように広開口に改良した DAC を用いて、高圧下での単結晶 X 線回折実験を行った。測定は AR-NE1 で DAC を少しずつ回転させながら行った。解析から、室温高圧相の空間群ならびに、格子定数を決定した。また、理論計算で推定した構造をもとに結晶構造を推定し、高圧下での粉末 X 線パターンから構造パラメータの精密化を行い、portlandite の室温高圧相の結晶構造を決定した。得られた構造は monoclinic の結晶系で隣り合う層の間で酸素共有が起きていることを突き止めた。これと他の多形 (低圧相、高温高圧相) との比較から、相転移のメカニズムおよび相関係について提案した。本研究で結晶構造の詳細が明らかになった室温高圧相は、低圧相から高温高圧相に至る中間的な相と位置づけることができる。また、水素の位置を推定すると、低圧相では層の間にだけ存在した水素は、相転移後の高圧相中で複数のサイトに存在しうることが分かり、これらは分光学的な結果と調和的であった。

また、J-PARC の MLF BL19 にて  $\text{Ca}(\text{OD})_2$  の予備的な高圧実験を行い、中性子実験において初めて高圧相の回折線が得られた。発表では、portlandite の室温高圧相の相転移メカニズムと、将来的な J-PARC の PLANET における中性子回折実験に向けて開発した高圧セルについても併せて紹介する。

[1] Meade and Jeanloz, *Geophys. Res. Lett.*, 17, 1157-1160 (1990)

[2] Ekbundit et al., *J. Solid State Chem.*, 126, 300-307 (1996)

[3] Catalli et al., *Geophys. Res. Lett.*, 35, L05312 (2008)

[4] Nagai et al., *Phys. Chem. Miner.* 27, 462-466 (2000)

[5] Xu et al., *Phys. Chem. Miner.*, 34, 223-232 (2007)

[6] Xu et al., *J. Solid State Chem.*, 180, 1519-1525 (2007)

キーワード: Paris-Edinburgh セル, 超高圧, 中性子回折, 含水鉱物, 相転移, 水素結合

Keywords: Paris-Edinburgh cell, high pressure, neutron diffraction, hydrous minerals, phase transition, hydrogen bond

## 含水石英ガラスの構造 X-ray diffraction study of vitreous hydrous silica

浦川 啓<sup>1\*</sup>, 小原真司<sup>2</sup>, 舟越賢一<sup>2</sup>, 三部 賢治<sup>3</sup>  
URAKAWA, Satoru<sup>1\*</sup>, Sinji Kohara<sup>2</sup>, Ken-ichi Funakoshi<sup>2</sup>, MIBE, Kenji<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 岡山大学大学院自然科学研究科, <sup>2</sup>(財)高輝度光科学研究センター, <sup>3</sup> 東京大学地震研究所

<sup>1</sup>Dept. Earth Sci., Okayama Univ., <sup>2</sup>JASRI, <sup>3</sup>ERI, Univ. Tokyo

マグマに水が溶解すると、粘度、密度、音速などの物性が変化する。このため含水マグマの物性は地球深部におけるマグマの関与する現象を理解するために欠かせない情報となる。含水マグマの物性は溶解した水が珪酸塩メルトの構造をどのように変化させるのかということと深く関係している。含水マグマの構造については、水の溶解機構の観点から、主に急冷ガラスを用いた分光学的手法による研究が進められている。一方、中性子は含水マグマ中の水素位置を見るのに優れたプローブである。我々はJ-PARCのPLANETビームラインで高温高压「その場」中性子回折実験による含水マグマの研究を計画している。その第一歩として、メルトから急冷した含水ガラスを用いた構造研究を始めた。本発表では含水石英ガラスについて放射光を使ったX線回折実験を行ったので報告する。

含水石英ガラスは岡山大学地球物質科学研究センターの内熱式ガス圧装置で作成した。石英と重水をモル比で9:1に混合した試料を200MPa, 1500℃で3時間保持したのち急冷した。回収ガラスのラマン分光から重水素の大部分が水素に置換されていることがわかった。実験中にPtカプセルを透して周りの水と交換反応したものと考えられる。

含水石英ガラスの粉末X線回折実験はSPring-8, BL04B2の非晶質物質用二軸回折計で行った。Q範囲0.3~25<sup>-1</sup>で得られた回折パターンからフーリエ解析により動径分布関数を得た。含水石英ガラスと無水の石英ガラスの動径分布の比較から、SiO<sub>4</sub>四面体は保持されていることがわかった。これは含水石英ガラスや含水アルミノ珪酸塩ガラスに対する第一原理計算などの先行研究の結果と一致する。一方、S(Q)からはFSDPの位置が含水ガラスでわずかに高Q側への移動が見られた。これは流紋岩質ガラスなどと動よりの傾向で、中距離構造が縮小していることを示す。今後、放射光を用いて圧力下でのX線回折を行う予定であり、その結果も併せて発表する。

ガラスの作成にあたっては岡山大学地球物質科学研究センター神崎正美教授に協力頂いた。本研究は東京大学地震研究所共同研究プログラムの援助を受けた。

キーワード: アモルファス, 含水マグマ

Keywords: amorphous, hydrous magma

## 高压下における遷移金属 - 水素系の融解 Melting of transition metal-hydrogen systems under high pressure

片山 芳則<sup>1\*</sup>, 齋藤寛之<sup>1</sup>, 青木勝敏<sup>1</sup>  
KATAYAMA, Yoshinori<sup>1\*</sup>, Hiroyuki Saitoh<sup>1</sup>, Katsutoshi Aoki<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 原子力機構量子ビーム

<sup>1</sup>QuBS, Japan Atomic Energy Agency

水素は多くの金属と反応し、金属水素化物を形成する。遷移金属では、一般に水素は金属格子の隙間に固溶して侵入型合金を形成し、結晶格子を大きく膨張させる [1]。チタンやバナジウムなどの前期遷移金属は、常圧でも水素化され TiH<sub>2</sub> や VH<sub>2</sub> といった高濃度の水素化物が形成される一方、鉄やニッケルは常圧ではほとんど水素化されない。しかしながら、鉄やニッケルでも、高水素圧下では水素化が起き、例えば鉄の場合は、融点が 5GPa 付近で約 500 程度低下する。我々は、高压下の液体金属が水素を多量に溶け込ませる可能性を調べるため、高水素圧下で遷移金属を融解させて X 線回折測定を行っている。今回はこれまで実験を行ったチタン、バナジウム、マンガン、鉄 [2]、コバルト、ニッケルの実験の結果を紹介する。

実験は SPring-8 の BL14B1 ビームライン設置のマルチアンビル型高压装置を用いて行った。チタンやバナジウムは水素化物を、その他の金属は純粋な金属を出発物質とした。これを水素源とともに高压セルに入れて、約 4GPa の高压下で昇温した。その結果、チタンやバナジウムは、高压下で容器として利用した NaCl の融点より低温では明確な融解が確認されず、常圧で水素を吸収しにくいマンガン、鉄、コバルト、ニッケルは、水素を吸収する高压下で融解が確認できた。融解が確認できた金属では、液体中の金属原子間の距離が、純粋な金属よりもわずかながら長くなっており、水素は結晶と同様、原子間に侵入型合金のような形で入っている可能性が高い。バナジウムの先行研究で提案された、比較的低温で、非常に多くの水素を含む液体合金が得られるという結果は、どの金属においても確認できなかった。

本研究は「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」のもと、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託を受けて行われた。

[1] 深井有、日本物理学会誌、55 (2000) 685.

[2] Y. Katayama, et al., J. Phys.: Conf. Ser., 215 (2010) 012080.

キーワード: 高压, 水素, 金属, 液体, X 線回折, 構造

Keywords: High Pressure, Hydrogen, Metal, Liquid, X-ray Diffraction, Structure

SMP48-09

会場:102A

時間:5月23日 16:00-16:15

## J-PARC 超高圧中性子回折装置 PLANET 発進 Take Off of the J-PARC High-Pressure Neutron Diffractometer PLANET

服部 高典<sup>1\*</sup>, 佐野 亜沙美<sup>1</sup>, 有馬寛<sup>2</sup>, 内海 渉<sup>1</sup>, 井上徹<sup>3</sup>, 鍵裕之<sup>4</sup>, 八木健彦<sup>4</sup>

HATTORI, Takanori<sup>1\*</sup>, Asami Sano-Furukawa<sup>1</sup>, Hiroshi Arima<sup>2</sup>, Wataru Utsumi<sup>1</sup>, Toru Inoue<sup>3</sup>, Hiroyuki Kagi<sup>4</sup>, Takehiko Yagi<sup>4</sup>

<sup>1</sup> 日本原子力研究開発機構, <sup>2</sup> 東北大学, <sup>3</sup> 愛媛大学, <sup>4</sup> 東京大学

<sup>1</sup>JAEA, <sup>2</sup>Tohoku Univ., <sup>3</sup>Ehime Univ., <sup>4</sup>The Univ. of Tokyo

超高圧中性子回折装置 PLANET は、東海村の J-PARC 物質生命科学実験施設 (MLF) に建設されている高圧専用の分光器である。「水素をよく見ることができる」という中性子の特徴を生かし、地球ダイナミクスに及ぼす水の影響を調べることを、その主たる目的としている。その最大の特徴は一軸あたり 500 トン重の最大荷重を持つ 6 油圧 6 軸型の大型高圧プレス (通称: 圧姫) を分光器室内に導入し、高圧高温 (20 万気圧、2000K 以上) における物質 (結晶・液体) の状態を、中性子回折、中性子イメージング技術を使って調べることができる点である。現在、新学術領域研究および学術創成研究の科研費を資金に建設が進められている。本発表では、その建設およびコミショニング状況に関して紹介する。昨年度、その目玉となる高圧プレス「圧姫」を無事導入し、分光器の建設をほとんど完了した。昨年度 1 月に先の地震以来のビームをうけいれ、コミショニングを始めた。本年夏までにコミショニングを終え、秋以降 Project メンバーによる共用が開始される予定である。

キーワード: 高圧, 中性子, J-PARC

Keywords: high pressur, neutron, J-PARC

