

## 高圧下の水の構造：中性子への期待

## Structure of water under high pressure: expectations for neutron scattering

# 片山 芳則 [1]

# yoshinori katayama[1]

[1] 原子力機構 量子ビーム

[1] JAEA QuBS

水は我々にとって最も重要な液体であり、生物、地球、環境、医学、工学、化学、物理など様々な面から研究がなされている。水は、また、普通の分子性液体とは違った特異な性質を持つことでも知られている。これは、水に水素結合による4配位のネットワーク構造が残っているためである。このような隙間の多い構造は、加圧によって大きく変化すると考えられる。我々は液体（流体）の水の構造を、放射光施設 SPring-8 の BL14B1 および BL04B1 のマルチアンビル型プレスを用いた高温高圧 X 線回折実験によって調べ、約 4GPa までに水分子の配位数は 10 程度へ急激に上昇し、剛体球で表されるような単純な液体の構造へと近づくことを見出した。

X 線回折実験では、電子が 1 個しかない水素はほとんど回折に寄与しない。そのため、酸素-酸素間の動径分布関数しか得ることができない。これは水の構造を考える上で最も重要な水素結合に関してほとんど情報が得られないことを意味する。これに対し中性子回折では、水素原子が大きな散乱断面積を持つため、水素に関する情報を得ることができる。実際、常圧や比較的低压 (< 1GPa) の水は中性子回折によって詳しく調べられている。本発表では、我々の放射光実験、過去の中性子実験、シミュレーションによる高圧下の水の構造研究などを紹介し、高温高圧下の水の中性子回折によって何がわかるのかを述べる。