

SMP057-05

会場: 301A

時間: 5月23日14:37-14:50

水の構造の温度変化

Temperature dependence of structure of water

片山 芳則^{1*}, 齋藤寛之¹, 青木勝敏¹

yoshinori katayama^{1*}, Hiroyuki Saitoh¹, Katsutoshi Aoki¹

¹日本原子力研究開発機構

¹Japan Atomic Energy Agency

常圧の水は、水分子が水素結合によるネットワーク構造を作るため特異な性質を示す。このような4配位が残った隙間の多い構造は、加圧によって密な構造へと変化する。我々は、大型放射光施設SPring-8で17GPaまでの高温高压X線回折実験を行い、水の構造が、低圧では、配位数が増加して単純液体のような構造へと変化する事、4GPa以上では分子間距離が減少することを報告した[1]。しかし、これらの測定は融点直上で行ったので、圧力とともに温度も上昇する。そのため、構造におよぼす圧力（密度）と温度の効果を独立に議論することができない。そこで、SPring-8のビームラインBL14B1に設置されているキュービック型プレスを用いて、高压下で温度を変えてX線回折測定を行った。密度をほぼ 1g/cm^3 に保つ条件で、温度を上げた。常温常圧の構造因子 $S(Q)$ の第1ピークの高波数側にはもう1つピークがあり、ダブルピークの構造を持つ。これは常温常圧での特異な局所構造によるものと考えられる。温度を上げると、 200°C ではほぼ単一のピークとなる。すなわち、温度によっても、水の構造は単純な構造へと近づいているように見える。水の構造に対する密度と温度の効果を議論する。

[1] Y. Katayama, T. Hattori, H. Saitoh, T. Ikeda, K. Aoki, H. Fukui, and K. Funakoshi, Phys. Rev. B, 81, 014109 (2010).

キーワード: 水, 高温, 高压, 構造, X線回折, 放射光

Keywords: water, high temperature, high pressure, structure, x-ray diffraction, synchrotron radiation