

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<sup>1\*</sup>, 齋藤寛之<sup>1</sup>, 青木勝敏<sup>1</sup>

yoshinori katayama<sup>1\*</sup>, Hiroyuki Saitoh<sup>1</sup>, Katsutoshi Aoki<sup>1</sup>

<sup>1</sup>日本原子力研究開発機構

<sup>1</sup>Japan 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的なことを報告した[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 $1\text{g/cm}^3$ 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、 $200^\circ\text{C}$ 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