

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^{1*}
IITAKA, Toshiaki^{1*}

¹ 理化学研究所
¹RIKEN

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、プラスチック相

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

