

## 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>  
Toshiaki Iitaka<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> 理研基幹研  
<sup>1</sup>RIKEN ASI

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]。昨年の講演では、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、加圧とともに電気伝導度が 10GPa 付近で最大になる [3] ことを示した。今回の講演では、氷 VII 相におけるこれらの欠陥の運動を可視化してその詳細な物理を検討する。また、熱伝導率や変調構造 [4] の圧力依存性についても検討する。

[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).

[3] T. Okada et al., Abstract of Japan Geoscience Union Meeting 2011, SMP048-02.

T. Iitaka, Abstract of Japan Geoscience Union Meeting 2011, SMP048-01.

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

キーワード: 氷, 高圧相, プロトンダイナミクス, 電気伝導度, 熱伝導率, 欠陥

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