

中性子回折で探る高圧氷秩序相の構造と安定性

Neutron diffraction study for iceXV – a hydrogen ordered form of dense ice

小松一生¹、町田真一²、服部高典³、佐野亜沙美³、鍵裕之¹

1 東京大学大学院理学系研究科

2CROSS 東海

3JAEA

氷結晶には、その水分子の四面体配位の違いと水素の秩序度の程度によって、iceIh, Ic, II-XVI の17種類の多形が存在することが知られている。それら多形のほとんどは、300 K 以下、3 GPa 以下の比較的狭い温度圧力領域で見出されており、それぞれの多形の熱力学的な安定性に関する知見は混沌としている。2009 年オックスフォード大学(当時)の Saltzmann らは、iceVI 相(水を加圧していくと最初に現れる高圧相)の秩序相である iceXV 相が、0.8-1.5 GPa、130 K 以下の領域を”熱力学的な安定領域”とする安定相として存在すると報告した (Saltzmann *et al.*, PRL, **103**, 105701, 2009)。もし iceXV 相が本当に熱力学的な安定相であれば、近年見つかった ice XII 以降では唯一の安定相であり、相当のインパクトがある。例えば、氷惑星の内部構造の推定には iceXV の存在を考慮しなくてはならないかもしれない。Saltzmann らの報告では、主に高圧下で生成した(とされる)iceXV 相を液体窒素温度で大気圧下に回収したのちに、格子パラメータの温度変化や考えられる秩序モデルによる構造解析など詳細な実験・解析を行っている。その結果、130 K 付近で iceVI \leftrightarrow XV 間の相転移が起こることを突き止めたが、転移温度の圧力依存性については無視できるほど小さいとしており、高圧下でも 130 K 付近に相境界があると推測している。はたして転移温度の圧力依存性は本当に無視できるのだろうか。この疑問が本研究のモチベーションである。我々は、数年前から J-PARC、MLF の TAKUMI (BL19)および PLANET (BL11)に、低温高圧下で中性子回折が行える環境(水戸システム; Komatsu *et al.*, High Press. Res., **33**, 208, 2013)を整備してきた。現在では液体窒素温度(-196°C)から 200°C、0~10 GPa までをカバーするまでになった(今後1年以内に温度下限を 30 K まで拡張する予定である)。本発表では、水戸システムについて簡単に紹介した後、これを利用して得られた iceXV 相の構造と安定性について最新の成果を報告したい。