



氷のクリスタル状態のシミュレーション図(圧力をかける前)圧力をかけるとクシャクシャになる)

氷の非晶質化機構を確認

162 K以下の低温なら

機械的融解に変化

東北大 日米加口が共同研究

【仙台】東北大学金属材料研究所の川添良幸教授、ロデオン・ペロスルドフ博士は、米国立アルゴンヌ国立研究所など4カ国による国際共同研究で、氷の非晶質化の機構を、コンピューターシミュレーションにより確認した。低温、高圧下にある氷の構造のなぞ解きに向けて、非晶質状態の水を理論的、実験的に検証した。非晶質化はある温度より低くなると、熱力学的な融解から機械的な融解に変わることなどを突き止めた。

水はなぞの多い物質。氷にも雪の結晶のように、さまざまな状態があり、すでに氷の高密度非晶質(HDA)相が発見されるなど、低温、高圧下にある氷の構造に大きな関心が寄せられているという。

大とアルゴンヌ研、カナダ、ステーション分子科学研究所、ロシア無機科学研究所の4カ国の研究機関が取り組んだ。日露がコンピューターシミュレーション、米加が実験を担当した。

具体的には162 K(絶対温度)、圧力0.7ギガで、非晶質状態が液状に近い低密度非晶質(LDA)となり、80 K、1.1ギガ付近でHDAが出現。162 Kでは熱力学的な溶解であるが、これより低い温度では機械的な融解に変わることが分かった。また振動スペクトルの分析結果からLDA氷の構造は、水の構造とは異なるという。

研究グループは氷が通常の状態を計算と実験から見いだした。実験データを踏まえ、疑似調和格子動力学計算法を用いて氷の非晶質化機構を確認した。

この国際共同研究は東北

大とアルゴンヌ研、カナダ、ステーション分子科学研究所、ロシア無機科学研究所の4カ国の研究機関が取り組んだ。

具体的には162 K(絶対温度)、圧力0.7ギガで、非晶質状態が液状に近い低密度非晶質(LDA)となり、80 K、1.1ギガ付近でHDAが出現。162 Kでは熱力学的な溶解であるが、これより低い温度では機械的な融解に変わることが分かった。また振動スペクトルの分析結果からLDA氷の構造は、水の構造とは異なるという。

「いわばプラスチックのようになくても壊れにくい氷となり、保冷材などへの利用が見込めるのでは」(東北大金研)と話している。