

受入年度：2019 年度 **前期**・後期・随時

提出日：2020 年 4 月 2 日

共同利用の種類： 一般共同利用

課題名：  高圧下における水-メタノール混合溶液の構造

共同研究員氏名：  中島 陽一

所属・職名：  熊本大学大学院先端機構・助教

分担者氏名：  芳野 極

分担者所属・職名：  岡山大学惑星物質研究所・教授

#### 研究報告：

水は我々の身の回りでありふれた液体であるが、他の分子性液体に無い特異な性質を持つ。この特異性はその構造、特に水素結合ネットワークの存在に起因すると考えられている。しかしながら、その構造については様々なモデルが提案され、現在も収束していない[Soper 2015JPCB; Temleinter et al. 2015PRB]。また、水-アルコール混合溶液においても、その混合比に対し体積や粘性が極値を持つなどの異常が見られる。これは、水と水素結合ネットワークを持たないアルコールとの単純な混合モデルでは説明できない。これまでに、水及びアルコール単体の高圧下回折測定が行われているが[Katayama et al. 2010PRB; Weitkamp et al. 2002Mol.Phys.]、両者の混合溶液についての報告は無い。本研究では、幅広い混合比を持つ水-メタノール混合溶液の X 線回折(XRD)測定を高圧下で行うことにより、混合溶液の詳細な構造を明らかにすることを目的とした。今年度は、水-メタノール混合溶液の相平衡関係についての高圧実験、及び昨年度までに取得している XRD データの解析ツールの開発と逆リバースモンテカルロ(RMC)法による構造解析を行った。

水-メタノール混合溶液について、ダイヤモンドアンビルセルを用いて高圧下ラマン測定及び光学組織観察測定を行い、室温における固化圧力を決定した。その結果、30mol% 及び 40mol%メタノールを含む水溶液は、1.7-1.8 GPa の圧力において氷 VI を析出し、氷+メタノール成分に富む液体へと相転移することが明らかになった。これまでに取得している、室温下、最大圧力 1.6GPa までの 20, 30, 40mol%のメタノールを含む水溶液の XRD データから構造因子(S(Q))を抽出し、RMC法を試みた。しかし、高波数領域 $> \sim 80 \text{nm}^{-1}$ で得られたデータの統計精度が低く、有意な構造を取得することが出来なかった。今後、測定時間を長くするなどして統計精度の改善を図る予定である。尚、惑星物質研究所では、今後のマルチアンビルを用いた高圧下 XRD 測定のために、高圧容器作成を行った。