

氷表面におけるイオンの固溶と拡散

○深澤倫子¹、河村雄行²¹ (独) 科学技術振興機構さきがけ (〒106-8569東京都港区南麻布4-6-7)² 東京工業大学院理工 (〒152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1)

氷結晶の表面は非常に滑りやすく、その摩擦係数は、ガラスやダイヤモンドに比べると一桁以上も小さい。この原因は、氷表面に存在する液状の層にあると考えられている。氷表面の液状層は、融点以下の低温においても存在し、その構造や物性が液体の水に似ていることから、擬似液体層と呼ばれている(図1)。擬似液体層は、成層圏に存在する氷粒におけるオゾン破壊の促進や、南極氷床における空気分子の拡散等の要因となることから幅広い分野で注目されている[1, 2, 3]。擬似液体層の物性を理解しようとする研究は、X線回折やSTM、AFM、LEED等、様々な実験手法を用いて行われているが[4]、その構造や物性には未解明な点が多い。その原因は、擬似液体層のダイナミクスが、表面と接する気層の状態(圧力や気体の組成等)や、不純物の存在に非常に敏感なことにある。本研究では、分子動力学計算を用いることで、擬似液体層のダイナミクスをミクロな視点から究明することを目指している。本講演では、擬似液体層中に固溶したイオンの拡散と、この拡散に起因する水分子のダイナミクスの変化についての計算結果を基に、擬似液体層の形成メカニズムについて議論したい。

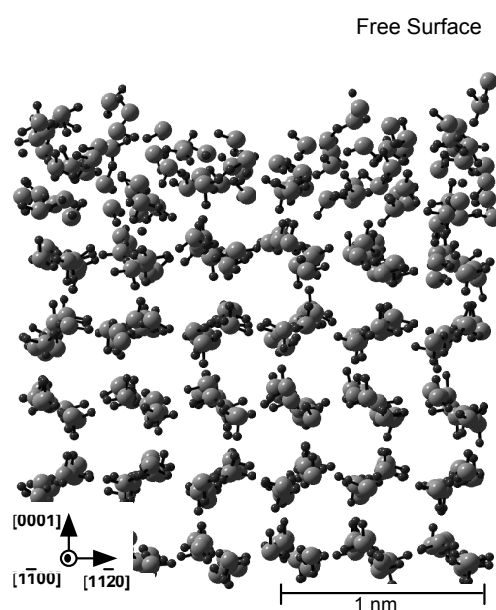


図1 氷表面に存在する擬似液体層。グレーと黒の丸は酸素、水素原子を示す。表面近傍で水分子の配置が無秩序になっている。

[1] T. Ikeda-Fukazawa *et al.*, J. Geophys. Res. 106 (2001) 17799.[2] T. Ikeda-Fukazawa *et al.*, J. Chem. Phys. 117 (2002) 3886.[3] T. Ikeda-Fukazawa *et al.*, Chem. Phys. Lett. 385 (2004) 467.[4] T. Ikeda-Fukazawa *et al.*, J. Chem. Phys. 120 (2004) 1359.