10 GPa までの高圧下の塩化ナトリウム水溶液の構造研究

A structural study on aqueous sodium chloride solution under high pressures up to 10 GPa

山口 敏男1) 吉田 亨次1) 李 孝成1) 福山 菜美1) 片山 芳則2)

Toshio YAMAGUCHI Koji YOSHIDA Kousei Ri Nami FUKUYAMA Yoshinori KATAYAMA

1)福岡大学 2)原子力機構

(概要)

シンクロトロン放射光を用いた高圧 X 線回折測定により、1.3, 1.8, 2.0 GPa および常温常圧における 3 mol/kg 塩化ナトリウム水溶液の構造を明らかにした。常温常圧下で存在した水の四面体類似構造は 2 GPa でほとんど単純液体の構造に変化することが明らかになった。

<u>キーワード</u>: エネルギー分散 X 線回折, 高圧状態, 塩化ナトリウム水溶液の構造、イオンの水 和

- 2. 方法 エネルギー分散 X 線回折測定は、Spring-8 の BL14B1 においてキュービックアンビル型高温高圧発生装置を使用して行った。溶液試料は 3 mol/kg 塩化ナトリウム(NaCl)水溶液を調製した。液体試料は、単結晶ダイヤモンドセルに注入した。測定散乱角 は 4, 6, 8, 10, 13, 16, 20°であった。測定圧力は 0.1MPa, 1.3, 1.8, 2.0 GPa とした。試料の散乱強度からセルの散乱を補正するために、空セルの測定も行った。また、2 mm のキャピラリーに 3 mol/kg NaCl 水溶液を入れ常温常圧下でも測定した。各圧力下での構造因子を求めて、動径分布関数を得た。更に、得られた構造因子を用いた EPSR シミュレーションより塩化ナトリウム水溶液の部分構造因子を導出して、系の 3 次元構造を明らかにする。
- <u>3. 研究成果</u> 3 mol/kg NaCl 水溶液の常温において各圧力 0.1 MPa, 1.3, 1.8, 2.0 GPa の散乱強度を得ることができた。0.1 MPa, 1.3, 1.8 GPa と圧力上昇に伴い、散乱強度は増加した。2.0 GPa では氷が生成したために、 90° Cで測定を行った。測定途中でセルが割れたために、測定を中断した。0.1 MPa の動径分布関数では、バルク水の四面体構造に特有な 2.9, 4.5, 6.8Å にピークが見られた。一方、1.8 GPa の動径分布関数では、4.5, 6.8Å のピークが消失して、6 および 8.5Å にピークが現れる単純液体の構造に変化したことを示した。また、3.15Å におけるピークが顕著になり、塩化物イオンの水和構造が形成されていることを示した。
- 4. 結論・考察 0.1MPa, 1.3, 1.8, 2.0 GPa の 3 mol/kg 塩化ナトリウム水溶液について X 線回折測定を行い、構造因子を得た。1.8 GPa ではバルク水の四面体構造が壊れて、単純液体の構造に近くなっている。今後、全ての圧力下での構造因子を導出して、EPSR シミュレーションより塩化ナトリウム水溶液の 3 次元構造を明らかにし、この結果から、高温高圧下での塩水溶液中の水の役割を考察する。