



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	立方晶氷lc
Author(s)	本堂, 武夫; Hondoh, Takeo
Citation	低温科学, 64, 70-70
Issue Date	2006-03-22
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/8316
Type	departmental bulletin paper
File Information	TEION070.pdf



立方晶氷 I_c

相図(本誌 p.88 参照)には登場しないが、重要な存在として、立方晶の氷 I_c がある。水分子の四面体配置を規則的に積み上げてゆく時に、シリコンやダイヤモンドの結晶構造と同様な配列が可能である。 I_h も I_c も、隣接する水分子の配置は同じであり、第2隣接分子の配置に違いがあるだけであるから、エネルギー的にはほとんど差がないと予想される。実際、低温で水蒸気から凝結すると I_c の氷ができるし、雲の中でも条件によっては、微小な I_c の結晶ができる場合があることが知られている。しかし、 I_c の温度を上げると I_h に転移し、 I_h を低温にしても I_c に転移することはないことから、全温度範囲で、 I_h の方が I_c よりも安定な構造であると結論されている。したがって、 I_c は相図には出ていない。

しかし、 I_c は、 I_h の内部にもほとんど常に存在する。 I_h の積み重ねの途中に I_c の積み重ねが混入する場合があります、これを積層欠陥(Stacking fault)と呼んでいる。これは、 I_h 結晶の中に、数分子層だけ部分的に I_c 構造になっている

もので、X線トポグラフィなどの方法でその存在が確認されている。氷 I_h は積層欠陥エネルギーが非常に低いという特徴をもっており、これが氷の塑性に著しく大きな異方性をもたらす原因にもなっている(本誌 p.141 参照)。

なぜ、 I_h の方が I_c よりも安定な構造であるか、という問に答えるのは難しいが、四面体配置図(本誌 p.46 参照)から分かるように、そもそも水分子が作る四面体は立方晶の対称性を持ち得ない。水素原子の配置まで考えると、4本の水素結合は等価ではないから、水分子の四面体は正四面体から少しずれて歪んでいるはずである。 I_c をつくるためには、これを強制的に正四面体として積み重ねる必要があり、この無理が余分のエネルギーになっていると考えられる。では、なぜ I_c が存在するのか。結晶成長の初期では、表面エネルギーの有利さのために I_c が現れると考えられている。また、 I_h 中の積層欠陥では、転位の歪みエネルギーを緩和して、欠陥全体としてのエネルギーを低くするために、 I_c が現れる(本誌 p.141 参照)。

(本堂 武夫)