Mm-P005 **時間：6月5日　17:00-18:30**

MgSiO3ilmeniteの高圧下単結晶X線その場観察による 結晶構造安定性

High-pressure single crystal diffraction study of MgSiO3 ilmenite and stability of crystal structure

小松　裕[1]，福田　智男[1]，菅原　正彦[1]，山中　高光[1]，伊藤　英司[2]
Yutaka Komatsu[1], Tomoo Fukuda[1], Masahiko Sugahara[1], Takamitsu Yamanaka[2], Eiji Ito[3]

[1] 阪大・理・宇宙地球，[2] 岡大・固地研
[1] Earth and Space sci,Osaka Univ, [2] Dept. Earth and Space　Osaka Univ., [3] ISEI

MgSiO3 イルメナイトの 8.0GPa までの高圧下単結晶 X 線回折実験を行った。
Birch-Murnahgan の状態方程式を用いて決定した体積弾性率は K0＝190(2)GPa であり、各軸の圧縮率は、他のイルメナイト構造同様 a 軸に比べ、c 軸が圧縮されやすい。
MgO6 八面体は SiO6 八面体に比べ圧縮されやすく、また MgO6、SiO6 の共有面を挟んだ、Mg－Si 結合距離、陽イオンの空席を挟んだ Si－Si 結合距離は共有稜を挟んだ、Mg－Mg、Si－Si 結合距離に比べ圧縮されやすいことがわかった。一方、陽イオンの空席を挟んだ Mg－Mg 結合距離は 4.5GPa までの圧縮ではほとんどその結合距離が変化しないという結果が得られた。

1) はじめに

ＭｇSiO3 イルメナイトは、エンスタタイトの高圧多形の一つである。その安定領域が 21GPa～25GPa(at 1100℃)と限られている（Ito and Yamada1982）ことから、地球内部においては、下部マントル上部、遷移層下部や比較的低温の沈み込み帯中に存在すると考えられている鉱物である。よってその構造を理解することは地球科学的に大変重要である。

イルメナイト構造は、八面体位置の 2/3 を陽イオンでうめた O イオンの六方最密充填配列と記述でき、MgO6 八面体と SiO6 八面体が交互に層をなし、同種イオンの八面体は稜共有し、異種イオンの八面体は面共有するという構造をなしている。イルメナイト構造の狭い安定領域は、その結晶構造に起因すると考えられることから、本研究では高圧下における単結晶 X 線回折実験によりその結晶構造解析を行い、その高圧安定領域に向けての圧縮挙動について考察し、また他のイルメナイト構造の物質との比較を行うことによってその構造の安定性について議論する。

2) 実験

試料の単結晶は、出発試料に、MgSiO3(orthoenstatite)を用いて岡山大学固体地球研究センターの 6-8 式マルチアンビルプレスを用い、22GPa、1700℃で 30min 保持して合成したものである。常圧を含め 8.0GPa までについて 4 軸自動回折計を用いて X 線回折強度測定を行った。高圧発生にはダイアモンドセル（DAC）を用い、ガスケットには spring steel（厚さ 200micron、内径 260micron)、圧力媒体にはメタノール：エタノール：水比 16：３：１の混合液、圧力測定にはルビー蛍光法を用いた。X 線発生装置としては常圧では当研究室所有の封入管型 X 線源（Moｋa 0.7107)、高圧では高エネルギー加速機構放射光実験施設（PF）を用いた。構造解析にはフルマトリクス最小自乗プログラム RADY89(Sasaki 1989)を用いて行った。DAC の吸収補正、ローレンツ補正、偏光補正（常圧のみ）を行った後、スケール因子、各原子位置、等方性温度因子、及び extinction の合計 10 個のパラメータの精密化を行った。なお、結晶の吸収補正は吸収係数が小さい(ur<0.1)ことから行わなかった。

3) 結果と考察

今回、Birch-Murnaghan の状態方程式を用いて決定した MgSiO3 イルメナイトの体積弾性率は K0＝190(2)GPa（K'0=４ fix）であり、過去にブリュアン散乱により求められた K0=212GPa(Weidner and Ito 1985)や、LDA シュミレーションにより求められた K0=224GPa(Karki et al 2000)と比較して若干小さくなっている。また、各軸の圧縮率は Ba=1.30(8)、Bc＝2.2(1)(10-3/GPa)であり、他のイルメナイト構造同様、c 軸方向に圧縮されやすい。

4.5GPa の結晶構造解析結果は R=4.2%、wR＝4.8%である。多面体の体積変化については、MgO6 八面体は SiO6 八面体に比べ圧縮されやすく、また MgO6、SiO6 の共有面を挟んだ、Mg－Si 結合距離、陽イオンの空席を挟んだ Si－Si 結合距離は共有稜を挟んだ、Mg－Mg、Si－Si 結合距離に比べ圧縮されやすいことがわかった。一方、陽イオンの空席を挟んだMg－Mg結合距離は4.5GPaまでの圧縮ではほとんどその結合距離が変化しないという結果が得られた。この結果の妥当性については、現在解析中の各圧力での結晶構造と比較することにより評価するが、もし妥当であるのならイルメナイトの安定領域下での結晶構造を理解する上で非常に興味深い。