

## AlOOH 高压相(相)の第一原理電子状態計算

## First principles calculation of high pressure phase of AlOOH (delta-phase)

# 三牧 旬[1], 土屋 卓久[2], 常行 真司[3], 山中 高光[4]

# Jun Mimaki[1], Taku Tsuchiya[2], Shinji Tsuneyuki[3], Takamitsu Yamanaka[4]

[1] 阪大理宇宙地球, [2] 東工大院理工, [3] 東大・理・物理, [4] 阪大・理・宇宙地球

[1] Earth and Space Science, Osaka Univ, [2] Earth and Planetary Sci., TITech, [3] Dept. of Physics, the Univ. of Tokyo, [4] Dept. Earth and Space Osaka Univ.

物質に水が入り込むことにより、その物質の物性が大きく変わることがよくある。例えばマントル構成鉱物に水が入り込むと原子の拡散が促進され、マントル物質の粘性低下を引き起こすなど流動特性に影響を与える可能性が示唆されている。

最近、沈み込むスラブ付近での温度圧力条件下で新しい含水相( $\delta$ -AlOOH)が発見された[Suzuki et al.(2000)]. この相は下部マントルに水を輸送する含水鉱物のモデル物質として重要である[Ohtani et al.(2001)]. 高压含水相  $\delta$ -AlOOH 相の結晶構造はルチル型構造が斜方晶に歪んだ CaCl<sub>2</sub> 型構造に類似するが、現在のところ水素位置等の詳細な情報はまだ得られていない。この構造は InOOH や  $\delta$ -CrOOH,  $\delta$ -FeOOH 構造と同様の構造を取ると考えられているが、これにはネットワークを持たない水素結合が含まれており、その酸素-酸素間距離の大きさにより水素結合の強さが異なり、いくつかの構造対称性が報告されている。水素結合に対する圧力効果は物質科学的にも興味深く、物性を理解する上でも水素の振る舞いは重要である。

本研究では、第一原理電子状態計算法を用い  $\delta$ -AlOOH 相の水素位置を含めた構造最適化を行い、この新しい含水相についての圧縮挙動、特に水素結合の圧力効果等の物性を調べる目的で計算を行った。計算は密度汎関数法に基づく擬ポテンシャル法 (TAPP, Tokyo Ab-initio Program Package) で平面波基底を用いて行った。

まず格子定数を実測の値にして原子座標の構造最適化を行った結果、主に水素位置の配置の違いによって3つの異なるタイプの安定構造が求まった。すなわち非対称な O-H...O 結合を含む2つの構造と対称な O-H-O 結合を含む構造(対称相)である。次にそれぞれの構造について格子定数も含めた構造最適化を行い、体積弾性率を求めた。その結果、常圧下では非対称水素結合を含む2つの相が安定であり、高压下では対称相が安定になる結果が得られた。これに類似する転移をする物質として高密度氷があり、高压下で水素結合ポテンシャルの二極小型(氷 VII, VIII 相)から単一極小型(氷 X 相)への移行による転移により、水素結合が対称化されている[Aoki et al.(1996)]. 相においても30GPa程度の高圧下で対称化相へ2次の転移をする可能性がある。またこの対称化により弾性定数の異方性が非対称相と顕著に異なる結果が得られた。