

## -AlOOH の空間群及び水素位置の決定と stishovite, brucite との関係

Determination of space group and hydrogen positions of delta-AlOOH and its relation to stishovite and brucite

# 工藤 康弘[1], 栗林 貴弘[2], 鈴木 昭夫[3], 大谷 栄治[4], 鎌田 貴之[5]

# Yasuhiro Kudoh[1], Takahiro Kuribayashi[2], Akio Suzuki[3], Eiji Ohtani[4], Takayuki Kamada[5]

[1] 東北大・理, [2] 東北大・院・理, [3] 東北大・理・地球物質科学, [4] 東北大、理、地球物質科学, [5] 東北大・理・地学

[1] Tohoku Univ, [2] Tohoku Univ., [3] Faculty of Science, Tohoku Univ., [4] Institute of Mineralogy, Petrology, and Economic Geology, Tohoku University, [5] Geology, Tohoku Univ.

1000 °C, 21 GPa で合成された  $\delta$ -AlOOH (Suzuki et al., 2000) の単結晶につき, X 線回折強度の測定を行った.  $83 \times 35 \times 24 \mu\text{m}$  の単結晶を用いて, MoK $\alpha$  (50 kV, 40mA) で  $\sin^2 \theta / \lambda = 0.80 \text{ \AA}^{-1}$  まで測定した. X 線回折強度の測定に用いたと同じ試料結晶の化学組成を EPMA により測定した結果, 組成は  $(\text{Al}0.84\text{Mg}0.07\text{Si}0.09)\text{H}0.9802$  で, かなりの量の Mg と Si が含まれる.  $\delta$ -AlOOH の空間群については, Suzuki et al. (2000) が粉末 X 線回折データを用いて P21nm を報告しているが, 単結晶を用いた今回の結果は回折 X 線の消滅則から, 空間群が Pnn2 か Pnnm であることが示され, 回折 X 線の強度の統計から, 対称心が無いことが示されたので, 空間群は対称心の無い Pnn2 と決定された. 測定された 109 個の独立な反射と異方性温度因子を用いて R=3.6% まで結晶構造を精密化した後, 差フーリエ合成によって水素原子の位置を求めた. その結果 H1 と H2 の 2 種類の水素原子位置が見出された. H1 は統計分布する 1 個の水素原子に対応する位置で, H2 は H2-H2 距離が水素のファンデアワールス半径の和より大きく 2 個の水素原子に対応する位置であることがわかった. これは, H1 が AlOOH に対応し, H2 が MgOOH<sub>2</sub> に対応するものであることを示す. このことは MgOOH<sub>2</sub> が  $\delta$ -AlOOH や Stishovite, SiO<sub>2</sub> と同じルチル構造の結晶構造を持つことを示すもので, MgOOH<sub>2</sub> の高压相の存在の可能性を示唆する.