

0.38 wt% H₂O を含む forsterite の結晶構造と水素の位置Crystal structure of forsterite with 0.38wt% H₂O and its possible hydrogen position

工藤 康弘 [1]; 栗林 貴弘 [2]; 井上 徹 [3]

Yasuhiro Kudoh[1]; Takahiro Kuribayashi[2]; Toru Inoue[3]

[1] 東北大・理; [2] 東北大・院・理; [3] 愛媛大・地球深部研

[1] Tohoku Univ.; [2] Tohoku Univ.; [3] GRC, Ehime Univ.

13.5 GPa 1300 C の条件下で合成された含水 forsterite の結晶構造を単結晶 X 線法で解析した。EPMA による Mg/Si 比は 2.038, 含水量は SIMS で測定され 0.38 wt% で, 化学式は $Mg_{1.985}Si_{0.993}H_{0.06}O_4$ である。35x47x59 ミクロンの単結晶試料を封入管 (MoK α , 50kVx20mA) と四軸自動回折計 (MXC3K) で測定した。空間群, 格子定数は: Pbnm, a=4.756(1)Å, b=10.208(3)Å, c=5.988(2)Å, V=290.7(2)Å³。逆格子空間の極限球の半球で 2 θ が 80 度までの反射 4488 反射を測定した。観測された Laue 対称は mmm で, 独立な反射は 1092 個である。同価な反射の強度の一致の程度を示す R_{int} は 6% である。最小自乗法による精密化の結果は異方性温度因子を用いて R=3.2%, R_w=2.8% である。Site occupancy は Si-site 99.3% (fixed), Mg1-site 98.6(2)%, Mg2-site 99.9(2)% で, Mg と Si がほぼ同じように H と置換していて Mg1 と Mg2 を比べると僅かに Mg1 が卓越している。結合距離を計算すると, H₂O を含まない合成 forsterite, Mg₂SiO₄ に比べ, Mg2-O₂, Mg2-O₃ が有意に大きい。これは, Si や Mg1 と置換した H が O₂ (Si が vacant のとき) や O₃ (Mg1 が vacant のとき) に配位することを意味する。Mg2-O₂, Mg2-O₃ は Mg₂O₆ 八面体の Mg-O のなかで, 平均より短い結合である。H が配位することで Mg2-O₂, Mg2-O₃ が有意に増加する理由は, 距離の僅かな増加に対する valence の減少の割合が, 結合距離が短いものの方が結合距離の長いものより大きいからと考えられる。