

Al(OH)<sub>3</sub> 高压相の結晶構造: II.  $\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub> の粉末 X 線回折による構造解析Crystal structure of high pressure Al(OH)<sub>3</sub> polymorphs: II. Powder X-ray diffraction study of  $\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub>

# 小松 一生 [1]; 佐野 亜沙美 [2]; 大谷 栄治 [3]; 鍵 裕之 [4]; 栗林 貴弘 [5]; 工藤 康弘 [1]

# Kazuki Komatsu[1]; Asami Sano[2]; Eiji Ohtani[3]; Hiroyuki Kagi[4]; Takahiro Kuribayashi[5]; Yasuhiro Kudoh[1]

[1] 東北大・理; [2] 東北大・理・地球物質科学; [3] 東北大、理、地球物質科学; [4] 東大院・理・地殻化学; [5] 東北大・院・理  
[1] Tohoku Univ; [2] Inst.Mineral. Petrol.& Econ. Geol., Faculty of Sci.,Tohoku Univ; [3] Institute of Mineralogy, Petrology, and Economic Geology, Tohoku University; [4] Lab. Earthquake Chem., Grad. School Sci. Univ. Tokyo; [5] Tohoku Univ.

1983年にDachilleとGiglはAl<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>O系における高温高压実験によって2つの新高圧相、すなわち  $\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub> と  $\gamma$ -Al(OH)<sub>3</sub> を報告したが、これらの結晶構造は今日まで不明であった。2つの高圧相のうち比較的低温(200℃以下)でgibbsiteの準安定な高圧相と考えられる  $\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub> については、高压その場単結晶 X 線回折による研究(小松ら, 2006; 本学会)によって結晶構造が明らかになった。さらに、この高圧相に対し  $\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub> という名称は適当でないという点が指摘され、新たに  $\gamma$ -Al(OH)<sub>3</sub> と命名されている。本研究では、Dachille and Gigl (1983) が発見したもう一つの高圧相、 $\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub> の重水素化物の結晶構造を粉末 X 線回折によって解くことに成功したので、これを報告する。

$\delta$ -Al(OH)<sub>3</sub> は重水素化した bayerite を出発物質とし、川井型高温高压発生装置を用いて 18GPa、700℃ で 1 時間保持することで合成された。合成された試料を Si 無反射板にセットし、粉末回折パターンは  $\theta$ - $\theta$  型粉末 X 線回折装置 (Phillips, X 'Pert-MPD PW3050) により測定された。得られた粉末回折パターンは、斜方晶系で指数付けが可能であり、Dachille and Gigl (1983) の結果と調和的であった。対称心があることを仮定すると空間群 Pnam (#62) で格子定数は a=5.14036(9)Å, b=5.06489(9)Å, c=7.25745(13)Å, V=188.950(6)Å<sup>3</sup> となった。Le Bail 法によってパターンフィッティングを行い、得られた観測積分強度に基づき、直説法によって水素位置以外の初期結晶構造モデルを導出した。導出された構造モデルは Al 八面体が頂点を共有して構成する A-site deficient perovskite 構造 (ReO<sub>3</sub> 構造) であった。リートベルト解析により構造の精密化を行った後、MEM により水素位置の推定を行った。本発表では、構造モデルの導出および水素位置の推定について、その過程と結果を詳細に報告する。