

## Manganite の状態方程式

## High-pressure X-ray diffraction study of manganite

# 鈴木 昭夫 [1]; 大谷 栄治 [2]; 寺崎 英紀 [3]

# Akio Suzuki[1]; Eiji Ohtani[2]; Hidenori Terasaki[3]

[1] 東北大・理・地球物質科学; [2] 東北大、理、地球物質科学; [3] 東北大・理

[1] Faculty of Science, Tohoku Univ.; [2] Institute of Mineralogy, Petrology, and Economic Geology, Tohoku University; [3] Inst. Mineral. Petrol. and Econ. Geol., Tohoku Univ.

<http://www.ganko.tohoku.ac.jp/>

地球内部において、水は岩石の融点を下げるなど、重要な役割を果たしている。沈み込むスラブによってマントルに運び込まれた水は、含水鉱物中に固定されて D 相にまで達する可能性もある。このため、含水鉱物の諸物性を調べることは地球内部における含水鉱物の安定性を議論する上でも重要である。これまでに我々は、diaspore の高圧相 (相) を初めて合成するなど、含水鉱物に関する研究を行ってきたが、最近の研究によると、この相は核 - マントル境界に相当する圧力下でも安定に存在することが示されている。この相の構造は InOOH 型と呼ばれるものであるが、この InOOH 型には幾つかの類似構造があることが知られている。例えば InOOH や  $\text{-CrOOH}$  や  $\text{-AlOOH}$  は斜方晶であるが、本研究で扱う manganite ( $\text{-MnOOH}$ ) は単斜晶である。これまで、InOOH 型相の状態方程式は殆ど調べられていないが、 $\text{-AlOOH}$  に関しては、室温での体積弾性率が 252 GPa ( $K' = 4$ ) という実験結果が報告されている。また、第一原理計算によっても、この極めて高い体積弾性率が支持されている。本研究では、単斜晶系の InOOH 型相である manganite の状態方程式を調べ、InOOH 型相がどのような圧縮特性を示すかを明らかにすることを目的とする。

試料はハルツ産の manganite を用いた。EPMA 分析によると、Mn 以外のカチオンは検出されなかった。実験には SPring-8, BL04B1 設置の SPEED1500 を使用し、エネルギー分散法で測定した。使用した回折線は (11-1), (020), (111), (12-1), (012), (210), (022), (220), (22-2), (11-3), (31-1), (131), (202), (31-3) である。室温下で 9 GPa までの測定を行い、得られた圧力と格子体積を用いて二次の Birch-Murnaghan 状態方程式にフィットさせた結果、体積弾性率は 91(2) GPa ( $K' = 4$ ) となった。この値は、 $\text{-AlOOH}$  のおよそ 36% であり、相よりも大変圧縮されやすいことを示している。InOOH 型構造では、水素結合の強弱に違いがあり、水素位置が O-H...O の中間 (対称位置) にある場合と無い場合に分かれるが、第一原理計算によって対称位置に水素がある場合には体積弾性率が大きくなるということが示されている。Manganite で体積弾性率が小さく、 $\text{-AlOOH}$  で大きいという違いは、単斜晶である前者では水素が非対称位置にあり、斜方晶である後者では対称位置にあるためである可能性がある。