

## Phase G の中性子構造解析

## Neutron diffraction study of phase G

# 鈴木 昭夫 [1]; 大谷 栄治 [2]  
# Akio Suzuki[1]; Eiji Ohtani[2]

[1] 東北大・理・地球物質科学; [2] 東北大、理、地球物質科学

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

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

我々は1999年に日本原子力研究所東海研究所において、Phase G の中性子回折実験を行う機会を得た。実験結果については、既に論文 (Suzuki et al., 2001, GRL, 28, 3987-3990) で発表しているため、本発表ではあまり馴染みがないと思われる原子炉中性子を用いた粉末回折実験の詳細を述べる。

含水鉱物中の水素位置を推定することは、X線構造解析や分光分析から可能であるが、決定することは容易ではない。X線の差フーリエマップから分かる場合もあるが、必ずしも可能とは言えない。これは、水素のX線散乱因子が鉱物中の他の元素と比べて極めて小さいことによる。一方、中性子の場合には、散乱長はX線と異なって原子番号によらないため、水素を重水素で置き換えておけば、重水素位置を特定できるほどに十分な回折線の強度が得られる。

中性子回折実験に先立ち、MgO, SiO<sub>2</sub>, Mg(OD)<sub>2</sub> を出発物質として、20GPa で phase G を合成した。Phase G は温度圧力条件によって組成が変化するが、Kawai 型高圧発生装置では発生圧力の再現性には5%程度の不確かさがある。このため、phase A などの高圧含水相と異なり、十分な量の試料を得るために何度も合成実験をして蓄積することができない。このため、一回の合成で得られた2.4mgの試料を用いて中性子構造解析を行った。中性子回折実験は日本原子力研究所東海研究所の実験用原子炉 JRR-3M において、主に単結晶タンパク質の構造解析に用いられていた BIX-III と呼ばれる回折装置を用いて行った。通常の粉末中性子構造解析においては、試料は概ね300mg程度必要となる。それと比べると、1/100以下の量で実験できたということは驚異的である。BIX-III は原子炉本体の近傍に配置され、中性子そのものの強度が強い。加えて、本研究では当時開発されたばかりの中性子用イメージングプレート BAS-ND を用いることができた。露光時間は21時間と長めであったが、リートベルト法での構造解析が可能なほどのデータを得ることができた。