

Fe-bearing hydrous forsterite の結晶構造と可能な水素の位置

Crystal structure of Fe-bearing hydrous forsterite and its possible hydrogen positions

工藤 康弘 [1]; 栗林 貴弘 [2]; Litasov Konstantin[3]; 大谷 栄治 [4]

Yasuhiro Kudoh[1]; Takahiro Kuribayashi[2]; Konstantin Litasov[3]; Eiji Ohtani[4]

[1] 東北大・理; [2] 東北大・院・理; [3] 東北大・理; [4] 東北大・理・地球物質科学

[1] Tohoku Univ; [2] Tohoku Univ.; [3] Inst. Mineral. Petrol. Econ. Geol.,

Tohoku University; [4] Inst. Mineral, Petrol. & Econ. Geol., Tohoku Univ

13.5 GPa 1400 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。化学組成の分析は EPMA による。含水量は FTIR で測定され、Bell(2003) および Patterson(1982) の方法で求めた値の平均は 0.39 wt% であり、このとき化学式は $Mg_{1.85}Fe_{0.14}Si_{0.99}H_{0.06}O_4$ となる。70x7030 ミクロンの単結晶試料を用いて、格子定数は封入管 (MoK α , 50kVx20mA) と四軸自動回折計 (MXC3K) で測定、回折強度は KEK の BL-10A で放射光 (波長 0.7006 Å) と垂直型四軸自動回折計で測定した。得られた空間群、格子定数は: Pbnm, a=4.7621(24)Å, b=10.2163(17)Å, c=5.9899(21)Å, V=291.41(18)Å³。回折強度は逆格子空間の極限球の 1/4 球で 2 θ が 92 度までの反射 2314 反射を測定した。観測された Laue 対称は mmm で、独立な反射は 1487 個である。同価な反射の強度の一致の程度を示す Rint は 2.6% である。同価な反射の強度を平均し、3.0 I_o 以上の 1214 個の反射と 1/2 の重みでの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=2.4%, Rw=3.1% である。Site occupancy の予備的計算の結果は Fe が M1-site と M2-site にほぼ等量入っていることを示す。T-site の occupancy 計算結果は Fe が僅かに存在する可能性を示すが、現時点では確定的ではない。結合距離の計算結果は H が O2 および O3 に配位することを示している。