

含水ワズレイトの中性子回折実験

Neutron diffraction experiment of hydrous wadsleyite

佐野 亜沙美 [1]; 八木 健彦 [1]; 小松 一生 [2]; 大谷 栄治 [3]
Asami Sano[1]; Takehiko Yagi[1]; Kazuki Komatsu[2]; Eiji Ohtani[3]

[1] 東大・物性研; [2] 東大院・理・地殻化学; [3] 東北大・理・地球物質科学
[1] Inst. Solid State Phys, Univ. Tokyo; [2] Geochem. Lab., Grad. School Sci. Univ. Tokyo; [3] Depart. Earth and Planetary Materials Science, Tohoku Univ

オリピンの高圧相であるワズレイト ($(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$) はマンツルの深さ 410 km から 520 km において体積にして約 60 % を占める「無水」鉱物である。Smyth (1987) により最大で 3.3 wt % の水が含まれうることが予言されて以来、ワズレイトは地球深部での水のリザーバーとして特に注目され、様々な研究がなされてきた。しかしこれまでの研究は無水鉱物中の水素結合の状態は赤外吸収スペクトルやラマンスペクトルといった分光学的手法、または水素に対して感度の低い X 線を用いた結晶学的な情報から推定されてきたにすぎない。鉱物の構造中の水素位置を決定することは、水素がその構造中に入ることによる物性の変化を議論する上で最も基本的な、しかし欠くことのできない重要な課題である。中性子粉末回折実験による水素位置の決定は含水鉱物については盛んに行われてきているが、ワズレイトのような無水鉱物中に取り込まれる水素について成功した例はこれまでのところ皆無である。本研究では H 化もしくは D 化したワズレイトについて、中性子回折実験による水素位置の決定を試みた。

試料は東北大学設置の川井型マルチアンビル高圧発生装置を用いて合成した。出発物質は試料全体の組成が $\text{Mg}_{1.85}\text{SiH}_{0.3}\text{O}_4$ となるように (2 wt% H_2O もしくは D_2O に相当)、フォルステライト (Mg_2SiO_4)、ブルーサイト ($\text{Mg}(\text{OH})_2$ または $\text{Mg}(\text{OD})_2$) とクリノエンスタタイト (MgSiO_3) を混合した粉末を用いた。これを外径 4 mm, 高さ 3.8 mm の金または白金カプセルに封入し、約 17 GPa, 1300 の条件で 1 時間保持した。それぞれ 1 回の実験で得られた 40mg ほどの H 化もしくは D 化したワズレイトについて、角度分散法による中性子回折実験をフランスの ILL 内 D20 にて行った。中性子線は Ge115 モノクロメータにより単色化している (波長: 1.87 Angstrom)。試料は外径 5 mm のバナジウム管に保持した。試料ステージは $\pm 1.5^\circ$ の範囲で 0.2° ごと揺動し、それぞれの位置で 180 秒ごと露光した。得られた回折パターンについて GSAS を用いてリートベルト解析を行い構造パラメーターの精密化を行った。

合成された H 化ワズレイトもしくは D 化ワズレイトは粒径 50 μm ほどの、焼結していない多結晶集合体であった。軸比 b/a と含水量の相関の関係式 (Jacobsen et al., 2005) を用いると含水量は H 化ワズレイトで 1.7 wt%, D 化ワズレイトで 1.4 wt% と計算された。D 化ワズレイトのラマン分光による観察では OH と OD の換算質量の比から予測される位置 (2480cm^{-1} と 2650cm^{-1} 付近) に O-D 伸縮振動のピークが見られ、重水素化していることが確認された。中性子回折実験では 135 分の露光で十分な SN のデータが得られており、リートベルト解析の結果について当日報告する。