

単結晶MEM解析によるsuper B相の1GPおよび3.5GPaの高圧下における水素位置推定

Refinement of hydrogen positions in super B at 1.0 and 3.5 GPa using ME analysis with single crystal diffraction data

栗林 貴弘^{1*}, 工藤 康弘¹

Takahiro Kuribayashi^{1*}, Yasuhiro Kudoh¹

¹東北大・院・理

¹Tohoku Univ.

「水」の構造中には、特異な性質を有する「水素結合」の存在が知られており、その詳細を精査することは重要な研究課題の一つである。含水鉱物に着目すると、-1000°C、-10 GPaのような特殊環境下において安定に存在できるDHMS相(Dense Hydrated Magnesium Silicates)の結晶構造中には「水素結合」の存在が予測され、鉱物の熱力学的安定性や物理的性質に影響を与えると考えられている。DHMS相における「水素」の挙動をすることにより、含水鉱物の結晶中における「水素結合」の一般的な性質を解明するために重要な基礎情報が得られる。本研究では、単結晶X線回折データにME(最大エントロピー法)解析を応用することにより、高圧下における鉱物結晶中の水素の直接観察を試みた。

川井型のマルチアンビルプレスで20GPa、1000Cの条件で合成したSuper hydrous phase Bに対して、高エネルギー加速器研究機構のBL-10Aにおいて高圧下その場単結晶X線回折強度測定を行い、そのデータに対してME解析を適用した。ME解析にはPRIMA (Dilanian and Izumi, 2002)を使用した。常温データの解析では、水素位置に相当する部分に電子密度分布の高まりが観察されており、Super hydrous phase B程度の含水量を有すれば十分に観察が可能である。また、高圧下のシミュレーションにおいても、水素位置相当に電子密度の高まりは観測されている。実測データに対しては、1 GPaにおける測定結果では、水素位置およびその温度因子の精密化が出来、X線回折法により高圧下における水素位置の決定された。更に高圧下で測定したデータに対しての解析を進めており、その結果について当日報告する。

キーワード:単結晶結晶構造解析,含水鉱物,高圧,水素位置

Keywords: single crystal structure analysis, hydrous minerals, high-pressure, hydrogen position