

# 単結晶 X 線回折データによる高圧下における super hydrous phase B 相の水素位置の推定

## Estimation of hydrogen position in super hydrous phase B under High-P conditions using synchrotron single crystal X-ray data

栗林貴弘・東北大・院理

Super hydrous phase B,  $\text{Mg}_{10}^{\text{VI}}\text{Si}^{\text{IV}}\text{Si}_2\text{H}_4\text{O}_{18}$  (sup\_B)は、高圧含水マグネシウム珪酸塩鉱物(DHMS)として知られており、高温高圧相平衡実験により 30GPa, 1500°Cといった広い温度圧力で安定に存在できる。そのような高温高圧の条件において安定に存在できる理由として構造中に形成される水素結合の存在があげられ、分光光学手法を中心に研究が進められている。しかしながら、分光光学的手法では水素位置に関する情報に限界があり、水素結合の詳細を知るためには位置情報が必要である。そこで本実験では、X線回折法によって高圧下における水素位置の決定に挑戦したので、その結果について報告する。

実験には、BL-10A 設置の垂直型四軸自動回折計を使用し、これに DAC を装着して高圧下における単結晶 X 線回折実験を行った。測定した圧力領域は最大 7.2GPa である。水素位置の推定のための測定条件の最適化のため、条件を変えて測定を行った。DAC 測定における不利を少しでも減らすため、0.65 Å付近の波長を使用した。また、高圧下における電子密度分布の可視化のために MEM 解析(PRIMA を使用)をおこなった。

常温常圧において水素位置が精密化できることを確認した後、高圧下における測定に取りかかった。測定条件の違いにより、水素位置を決定できる場合(0.7 GPa および 5.7 GPa)とできない場合(3.5 GPa ならびに 7.2 GPa)があった。水素位置を決定できた条件では、水素位置だけでなく、水素の等方性温度因子の精密化にまで成功した。常圧での OH 結合距離は、0.91(3)Åであったのに対し、高圧下では 0.7 GPa で 0.86(9) Å, 5.7 GPa で 0.93(5)Åであった。データ点が限られるため、OH 距離の変化の傾向まではまだつかめていないが、高圧下における水素位置決定の可能性を確認することができた。

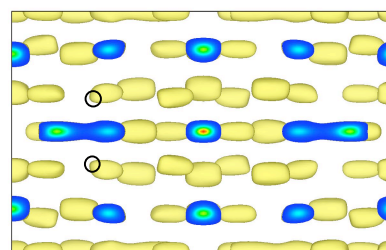


Figure 1. Electron distribution map of sup B at 1.0 GPa calculated by PRIMA using single-crystal diffraction data