

# 水酸化カルシウムの圧力誘起相転移のその場観察

## In situ observation of pressure-induced phase transition in Ca(OH)<sub>2</sub>

○飯塚理子<sup>1,2</sup>, 八木健彦<sup>2</sup>, 岡田 卓<sup>2</sup>, 小松一生<sup>1</sup>, 鍵 裕之<sup>1</sup>, 中野智志<sup>3</sup>  
1 東大院理, 2 東大物性研, 3 物材機構

水酸化カルシウム(鉱物名 portlandite)は、層状構造をもつブルーサイト型の金属水酸化物の中でも、室温下約 20 GPa でのアモルファス化のほか、約 6 GPa で構造未解明の高圧相に相転移し、特異的な圧縮特性を示すことが知られている。しかし、きわめて単純な構造でありながら、portlandite の数々の先行研究では実験条件の違いにより、圧力誘起相転移について未解明な点が多かった[1-3]。そこで本研究では、ダイヤモンドアンビルセルを用い、ヘリウムを圧力媒体とした準静水圧条件における高圧下その場観察を行い、圧力応答の詳細と室温高圧相の結晶構造を明らかにした。

単結晶ラマンおよび IR の測定から、相転移および水素の部分的アモルファス化圧力への同位体効果の存在が明らかになった。一方で、BL18C, AR-NE1 で行った粉末 X 線回折実験の結果からは特に顕著な違いはなかった。したがって、portlandite の圧力応答には水素結合部分が強く関与していることが示唆された[4]。

また、広開口角側のブラッグ反射が得られるように改良した高圧セルを用いて、高圧下での単結晶 X 線回折実験を行った。測定は AR-NE1 で DAC を少しずつ回転させながら行った。解析から、室温高圧相の空間群ならびに、格子定数を決定した。また、理論計算で推定した構造をもとに結晶構造を推定し、高圧下での粉末 X 線パターンから構造パラメーターの精密化を行い、portlandite の室温高圧相の結晶構造を決定した。得られた構造と他の多形(低圧相、高温高圧相)との比較から、相転移のメカニズムおよび相関係について提案した。本研究で結晶構造の詳細が明らかになった室温高圧相は、低圧相から高温高圧相に至る中間的な相と位置づけることができる。水素の位置を推定すると、複数存在しうることが分かり、これらは分光学的データと調和的であった。

### References:

- [1] Meade and Jeanloz, *Geophys. Res. Lett.*, **17**, 1157-1160 (1990)
- [2] Ekbundit et al., *J. Solid State Chem.*, **126**, 300-307 (1996)
- [3] Catalli et al., *Geophys. Res. Lett.*, **35**, L05312 (2008)
- [4] Iizuka et al., *Phys. Chem. Miner.* **38**, 777-785 (2011)

記入例

BL-0A

放射光  
**Synchrotron Radiation**

表題は必ず英語表記も記入

筑波太郎<sup>1</sup>、筑波次郎<sup>2</sup>

1 KEK-放射光、2 KEK-放射光 II

本文(14 ポイント)