

受入年度 平成 27 年

課題名 無水鉍物中の水素位置の特定：マントルレオロジーへの応用

共同研究員氏名 櫻井 萌

所属・職名 東京工業大学大学院理工学研究科地球惑星科学科・D3

受入教員 芳野 極

本研究課題は、上部マントル鉍物中の水素挙動の解明に向け、理論計算および高压その場 IR 実験を用いて、上部マントル鉍物中の水素配置を決定し、鉍物中の水素挙動がマントルレオロジーに与える影響を考察することを目的とする。

実験には高压発生装置としてダイヤモンドアンビルセル (DAC) を用いた。出発物質には合成した含水フォルステライト (以下 Fo) 単結晶を用いた。圧力媒体には赤外光に対して透明な KBr を用いた。キュレット径は、0.60 mm のものを使用し、ガスケットには SUS304 を用いた。圧力測定にはルビー蛍光法を用い、高压実験は 0.5~7.1 GPa の範囲で、室温下で行った。IR スペクトルの取得には東工大 Magma Factory に設置されている全真空型の FT-IR (FT-IR6100, IRT5000) を利用し、透過 IR スペクトルを測定した。バックグラウンドは DAC 試料室内の KBr で満たされた空間で測定した。偏光赤外光を使用することにより、結晶軸方向 (a, b, c) に沿った IR スペクトルを取得した。

実験より、Fo の a 軸に平行な偏光 IR において、4 GPa 以上で 3612 cm<sup>-1</sup> (OH バンド) の高波数側への大きなシフトが観測された。一方、b 軸に平行な偏光 IR においては同波数のバンドは低波数側へシフトし、c 軸に平行な偏光 IR ではほぼ変化しないという三者三様の挙動が観測された。これは常圧下ではひとつのバンドに縮退して見えているものの、本来は異なる水素配置から得られた OH バンドであることを意味している。上部マントル無水鉍物の高压下での水素挙動を捉えた報告は本結果が初めてで、鉍物中の水素位置の詳細な特定のためには、高压下での水素挙動を観察することが重要であることが明らかになった。また、Fo の水素位置を DFT を用い考察したところ、実験で観察された高压下での一様な低波数側へのシフトは、格子の一様な圧縮で説明可能であることがわかった。また、a 軸に平行な偏光 IR において観察された高压下での急激な高波数側へのシフトは、Si を 4 つの H で置換した構造において、4 GPa 以上で OH 結合角の大きな変化が生じ、実験と同様 OH バンドの高波数側への大きなシフトが説明できることがわかった。

本センターでは、高压実験の出発物質の含水フォルステライト単結晶合成のため、一軸加圧式川井型超高压発生装置 USSA-1000・USSA-5000 を用いて合成を行った。また、合成した試料の結晶方位測定に SEM+EBSD を使用した。

