

# 含水鉱物における水素結合の対称化の直接観測

## In-situ observation of pressure induced hydrogen bond symmetrization in a hydrous mineral

佐野亜沙美<sup>1</sup>・服部高典<sup>1</sup>・小松一生<sup>2</sup>・鍵浩之<sup>2</sup>・永井隆哉<sup>3</sup>

1 J-PARC センター JAEA、2 東京大、3 北海道大学

地球深部における水の存在は、弾性波速度や電気伝導度、レオロジー特性など、観測可能な鉱物物性へ影響を与えるため重要視されてきた。水は様々な形態で存在しているが、中でも含水鉱物は地球深部へ沈み込む海洋プレート中に存在し、地表から深部にわたる水の循環において重要な役割を果たしている。通常、地表において鉱物中の水素は二つの酸素の間で片側の酸素と共有結合で、もう一方の酸素と水素結合で結ばれている。しかし 1970 年代における高圧氷についての理論計算により、高圧を加え酸素間距離が縮まることで、水素が二つの酸素間の midpoint に位置し両側の酸素と共有結合する”対称化”がおきると予測された[1]。その後含水鉱物においても同様に対称化がおきうる事が理論計算により指摘され、また実験からは対称化に関連すると考えられる様々な物性の変化が報告されたが[2,3など]、水素位置に関する直接的な証拠は得られていなかった。

本研究では含水鉱物“ $\delta$ -AlOOH”について、J-PARC PLANET において高圧下中性子回折実験を行い、水素位置を含めた構造の精密化を行った。その結果 18 GPa において水素が二つの酸素間の midpoint に位置し”対称化”することを初めて直接観測した。またそれより低圧側においては midpoint を挟んだ等価な 2 点をディスオーダーしていることも明らかになった[4]。これらの圧力は、これまでこの含水鉱物で見つかっていた弾性波速度の急激な増加が報告された圧力とほぼ一致し[3]、対称化と、その前駆現象であるディスオーダーにより引き起こされていることを示している。

[1] W.B. Holzapfel, *J. Chem. Phys.* 56, 712–714 (1972).

[2] Tsuchiya et al., *Geophys. Res. Lett.* 29, 1909 (2002).

[3] Mashino et al., *J. Geophys. Res.* 121, 595–609 (2016).

[4] A. Sano-Furukawa et al., *Sci. Rep.* 8, 15520 (2018)