

## 重水素化白雲母の水素位置分裂

Split H-site model in deuterated muscovite

石田 清隆<sup>1)</sup> 深澤 裕<sup>2)</sup>

Kiyotaka ISHIDA Hiroshi FUKAZAWA

<sup>1)</sup> 九州大学 <sup>2)</sup> 原子力機構

2八面体型雲母の白雲母の O(6)-H ベクトルはほぼ劈開に平行で空席の M1 に向いているとされてきたが、少なくとも2つ以上に分解できるブロードな赤外 OH 伸縮振動バンドと大きな H の atomic displacement factor から、2箇所以上に分解できると推定される。この点を明らかにするため、天然の白雲母を重水素化して 10K での HRPD による高分解能中性子線回折実験を行った。

キーワード：シロウンモ、重水素化、赤外 OH 伸縮振動バンド、熱振動パラメーター、リートベルト解析

1. 目的 HRPD による高分解能中性子線回折実験によって得たデータから、リートベルト解析によりシロウンモの水素位置分裂を明らかにする。
2. 方法 天然のシロウンモと重水(99.9%)を金パイプに溶接封入して、水熱合成装置により重水素置換試料を 3g 程度作成する。その試料を HRPD で中性子線回折実験を行う。リートベルト解析により原子分布マップを作成して、水素位置の分裂を明らかにする。
3. 研究成果 リートベルト構造解析の予察的データでは、10K では水素の熱振動パラメーターは 0.5 程度であり大きくなく、低温では水素位置分裂は縮小してくるのではないかと想像される。
4. 結論・考察 上記のように、水素位置分裂は温度の上昇につれて拡大してくると考えられるので、シロウンモの分解する 900℃までの中性子線回折実験を遂行する必要がある。とともに、極低温から 900℃までの赤外 OH 伸縮振動バンドの測定が必要である。

### 5. 引用 (参照) 文献等

- Catti, M., Ferraris, G., Hull, S., and Pavese, A. (1994) Powder neutron diffraction study of 2M1 muscovite at room pressure and at 2 GPa. *European Journal of Mineralogy*, 6, 171-178.
- Liang, J.-J., Hawthorne, F.C., and Swainson, I.P. (1998) Triclinic muscovite: X-ray diffraction, neutron diffraction and photo-acoustic FTIR spectroscopy. *Canadian Mineralogist*, 36, 1017-1027.
- Mookherjee, M., Redfern, A.T., and Zhang, M. (2001) Thermal response of structure and hydroxyl ion of phengite-2M<sub>1</sub>: an *in situ* neutron diffraction and FTIR study. *European Journal of Mineralogy*, 13, 545-555.
- Serratos, J.M. and Bradley, W.F. (1958) Determination of the orientation of OH bond axis in layer silicates by infrared absorption. *Journal of Physical Chemistry*, 62, 1164-1167.