

# IR spectra of pyroxene polymorphs

粉体試料を用いた反射率測定を試み

Hiroki Chihara


Dept. of Earth & Space Science,  
Osaka University

鉱物の名前 : 構造と化学組成で決まる

Silicateとは?

$\text{SiO}_4$ の正四面体を基本構造としてもつ物質

$\text{SiO}_4$ 正四面体の繋がり方で分類される

- 
- 1 Isolated silicate : Olivine かんらん石
  - 2 Chain silicate : Pyroxene 輝石
  - 3 Ring silicate : Melilite 黄長石?
  - 4 Framework silicate : Feldspar 長石
  - 5 Sheet silicate : Mica 粘土/雲母

olivineやpyroxeneは実は構造の名前

# Silicateの化学組成

## 固溶体 (Solid-Solution)

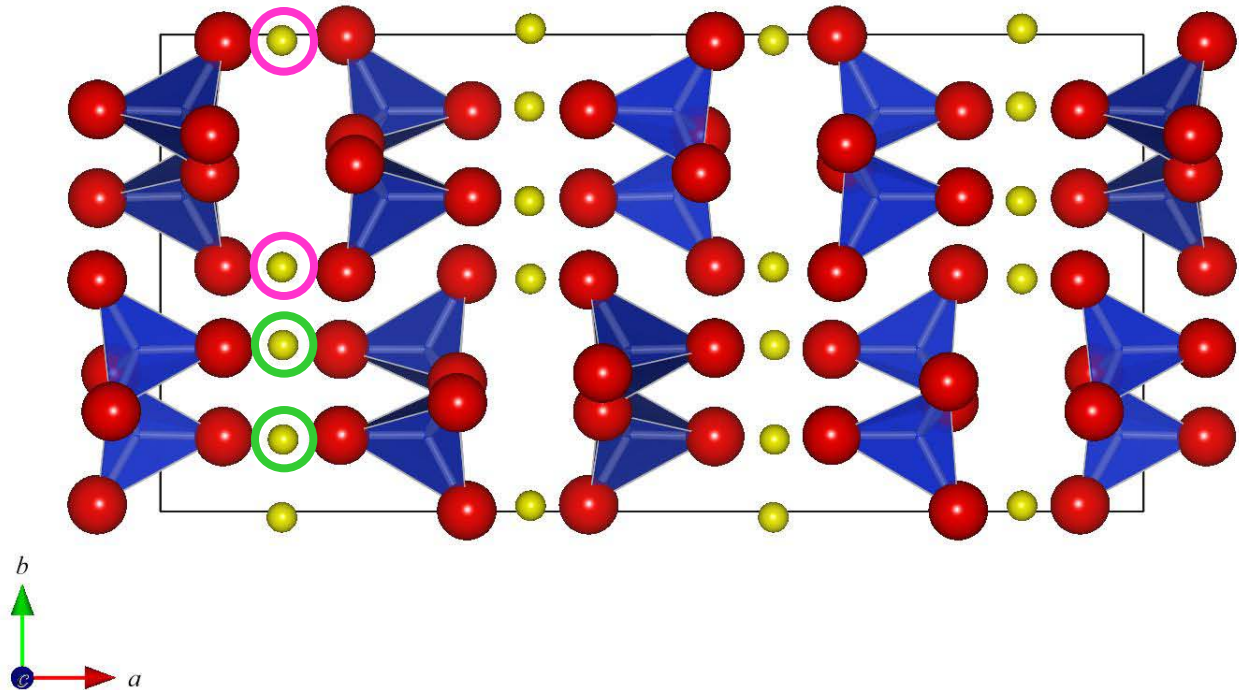
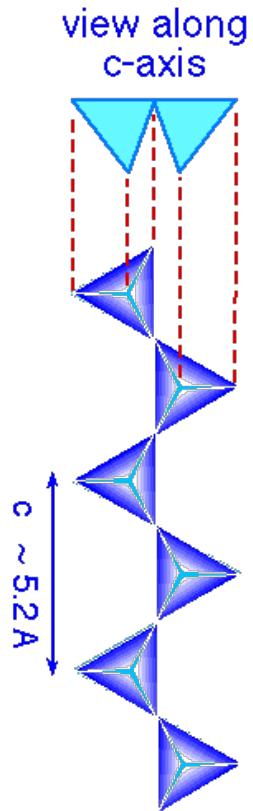
$\text{SiO}_4$ 四面体が作る構造の隙間 (M site) には様々な金属イオンが入ることが出来る

場合によっては、Siが別の元素(たとえばAlなど)に変わる場合もある

- Stoichiometry(化学量論性)を保つこと
- 電荷バランスがcompensateされること
- 格子の隙間に入れるイオン半径

# Pyroxene - chain silicate

SiO<sub>4</sub>四面体は二つの角(架橋酸素)を使って、C軸方向に1次的的に伸びている

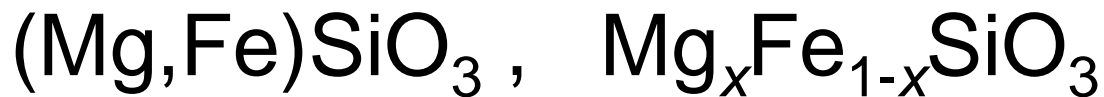
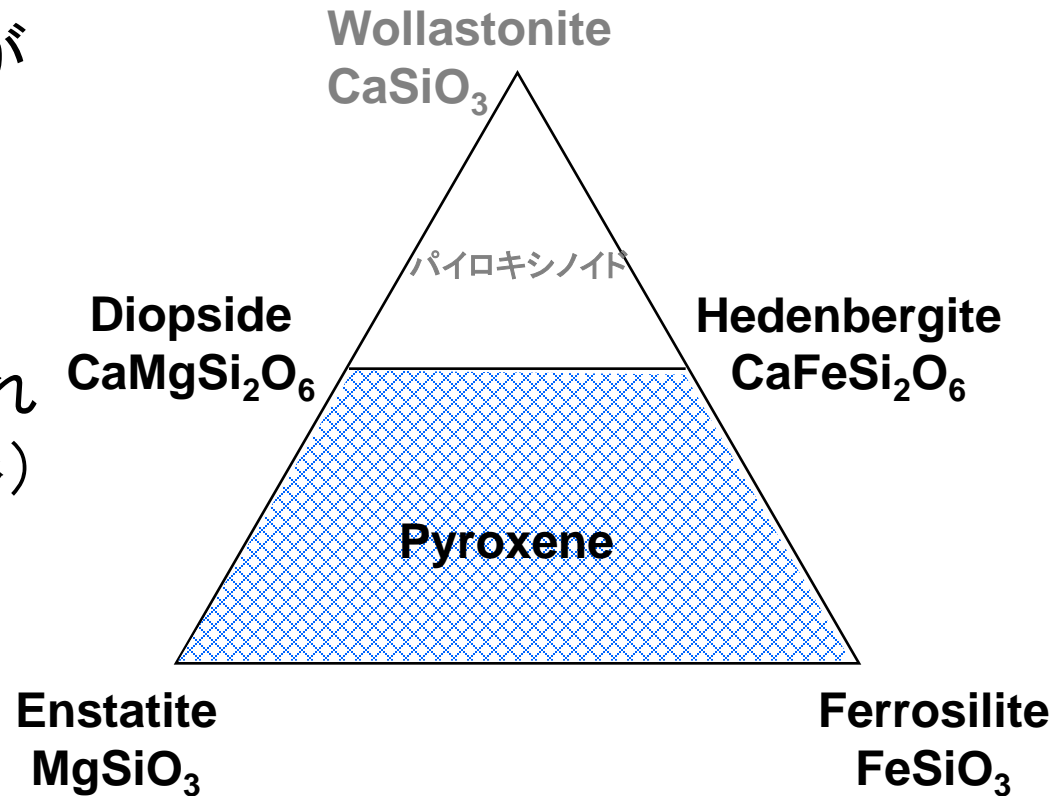


# Pyroxene 固溶体 ; $M_2T_2O_6$

M siteにはMg, Fe, Ca, Liなどが  
入る

天文ではMgとFeとCaを考えれば十分(右図: Pyroxene 台形)

MgO+FeO と、 $SiO_2$ が  
1:1の化学量論比



# enstatite polymorph

enstatiteの主な多形(結晶の対称性が異なる)

ortho-enstatite : 斜方晶(マッチ箱型)

clino-enstatite : 単斜晶(ひしゃげたマッチ箱の外箱)

proto-enstatite : 斜方晶

~980°C以上の準安定相

quench不可能(常温常圧で存在しない)

その他 : 積層欠陥をもつHAS (Murata et al. 2009)  
(Heated Amorphous Silicates)

# Absorption spectrum of HAS (Murata et al. 2009)

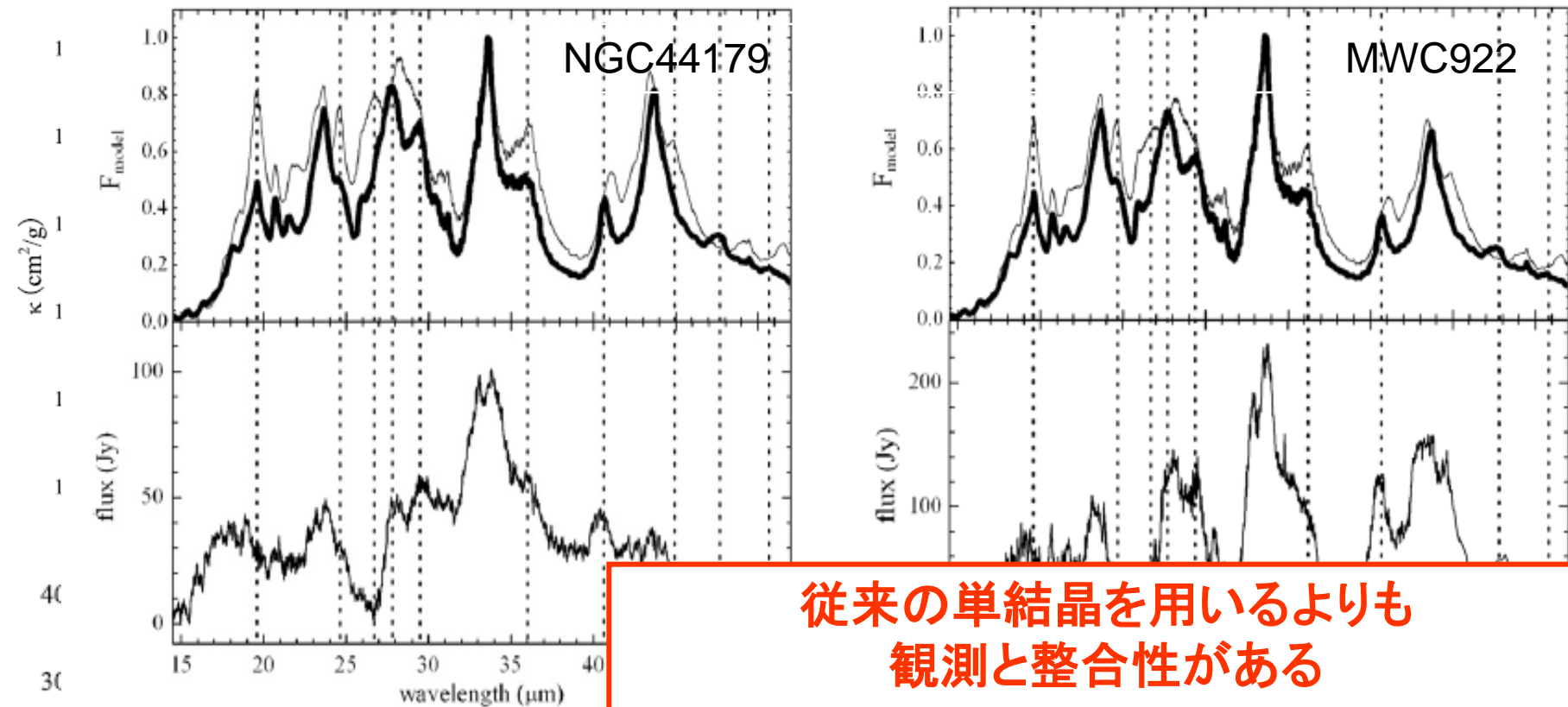
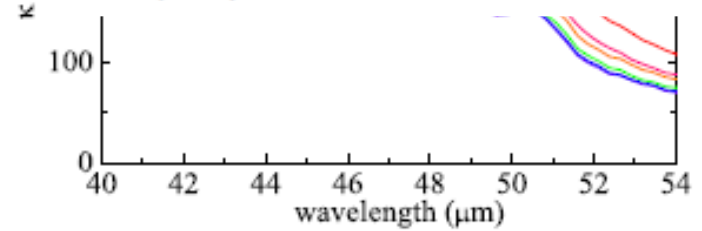


Figure 4. Comparison of the continuum-subtracted spectra of the model (1) (SCE + forsterite, thin line) and (2) (HAS + multiplied by the Planck function of 150 K and normalized)



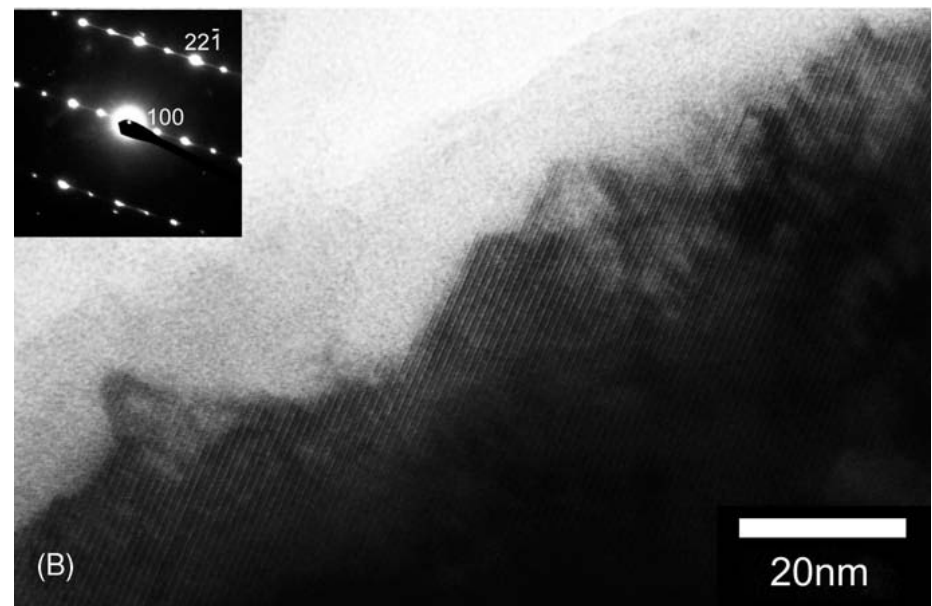
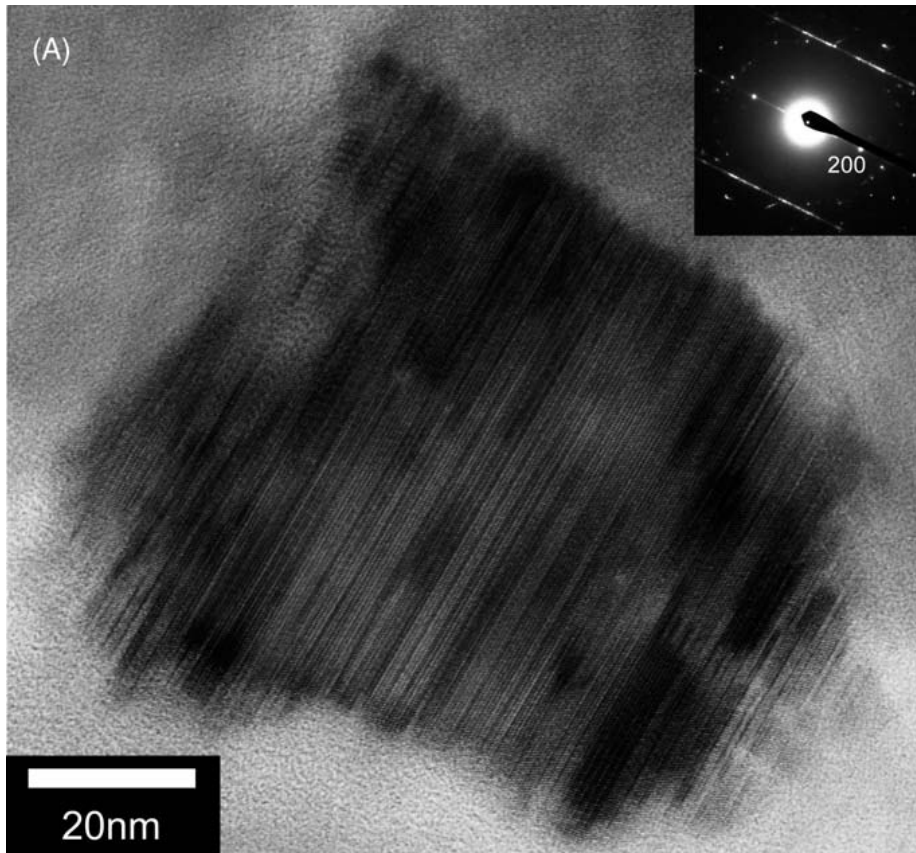
**従来の単結晶を用いるよりも  
観測と整合性がある**

星周環境のエンスタタイトは、きれいな結晶ではなく、構造欠陥を持つ可能性

エンスタタイトの量の見積もりにも影響？

# High density stacking faults in HAS

(Murata et al. 2009)



**Transmission electron microscope images and selected area electron diffraction patterns of (A) enstatite in the sample in this study and (B) fine powdered single crystal of clinoenstatite viewed parallel to  $a^*$ -axis.**



# 反射率スペクトル → 複素誘電率 → 光学定数



- 数mmφ以上のバルク単結晶が必要
- 固溶体の単結晶は、端成分しか合成できない
  - 粉体試料の光学定数は普通は得られない
- sample preparationが面倒
  - (e.g. 結晶軸の決定、切り出し、研磨)
- 偏光子による光量減少 → S/N低下
- Lorentz fittingによる  $(n, k)$  の導出は一般に困難
  - (パラメータが多すぎる)
- 観測スペクトルと直接比較できるわけではない



固体の物性のみに基づく正確な光学特性が得られる(はず)!

To reproduce spectra in various conditions, optical constants ( $n$ ,  $k$ ) are fundamental.

Eq. of motion for forced vibration

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega_0 x - m\gamma \frac{dx}{dt} + eE$$

restoring force      damping force      force induced by ext. field

general solution

$$x = \frac{eE}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \leftarrow \text{Lorentz function}$$

↓ Dielectric function

Polarizability

$$P = Nex = \varepsilon_0 E (\varepsilon - 1) = \varepsilon_0 E \{(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2) - 1\}$$

## Reflectance ; R

$$R = \left| \frac{\sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta} - \cos \theta}{\sqrt{\epsilon - \sin^2 \theta} + \cos \theta} \right|^2 = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}$$

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2$$

$$\epsilon_2 = 2nk$$

## Dielectric function ;

$$\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$$

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{(Ne^2/m\epsilon_0)(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{(Ne^2/m\epsilon_0)\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

## optical constants ; (n, k)

$$n = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} + \epsilon_1}{2}}$$

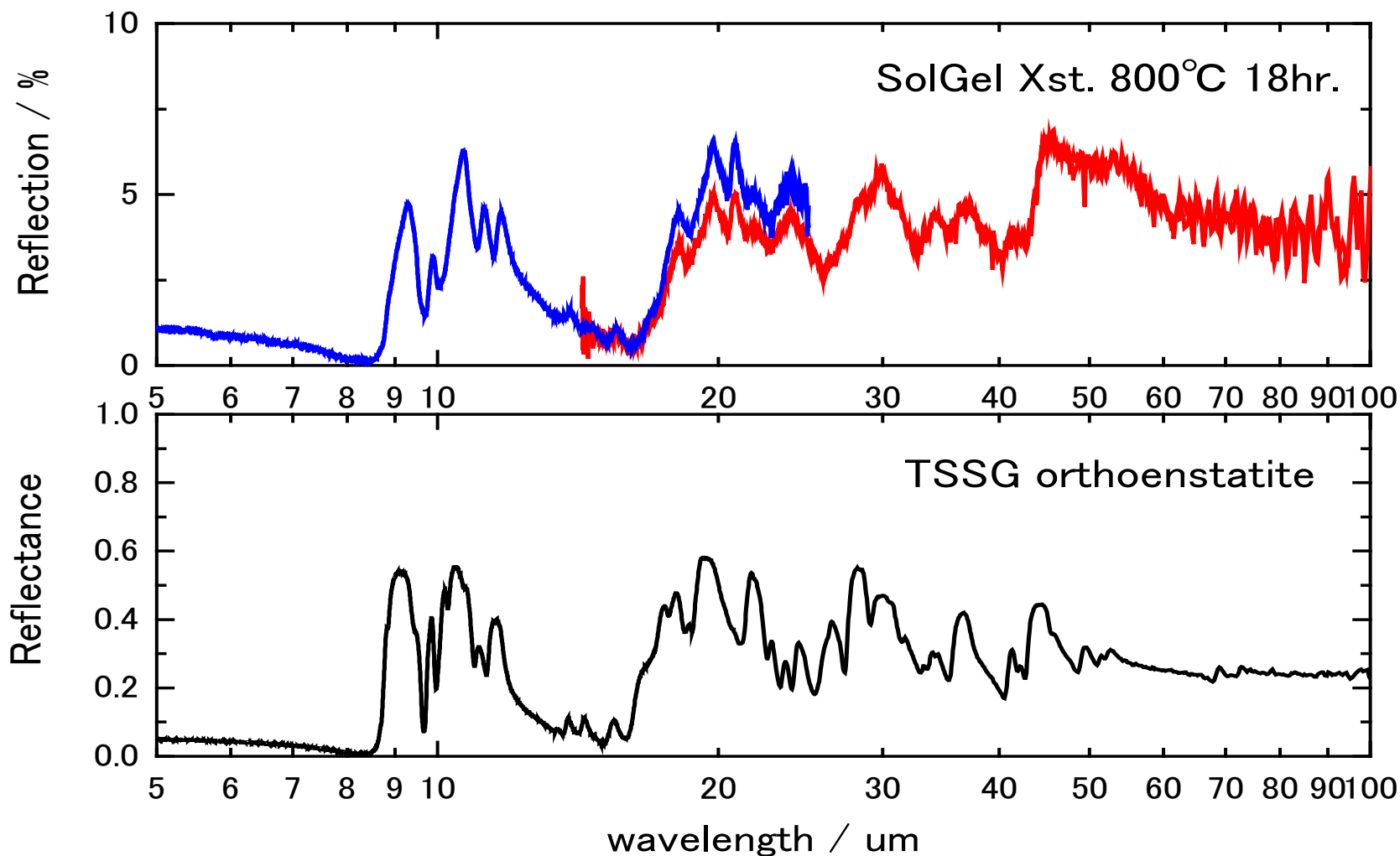
$$k = \sqrt{\frac{\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \epsilon_1}{2}}$$

# 圧縮して作成したペレットを研磨してみる

- ◇ Sol-Gel powders ( $\text{MgSiO}_3$ ) were pressed into pellet  $\phi=13$  mm
- ◇ heated at  $800^\circ\text{C}$  for 18–20 hrs
- ◇ polished by 1 $\mu\text{m}$  diamond
- ◇ Reference : gold-mirror
- ◇ non-polarized source
- ◇ beam radius :  $\phi=5$  mm
- ◇ incident angle : 10 degree



多孔質なのでそもそも研磨できない(;\_;)

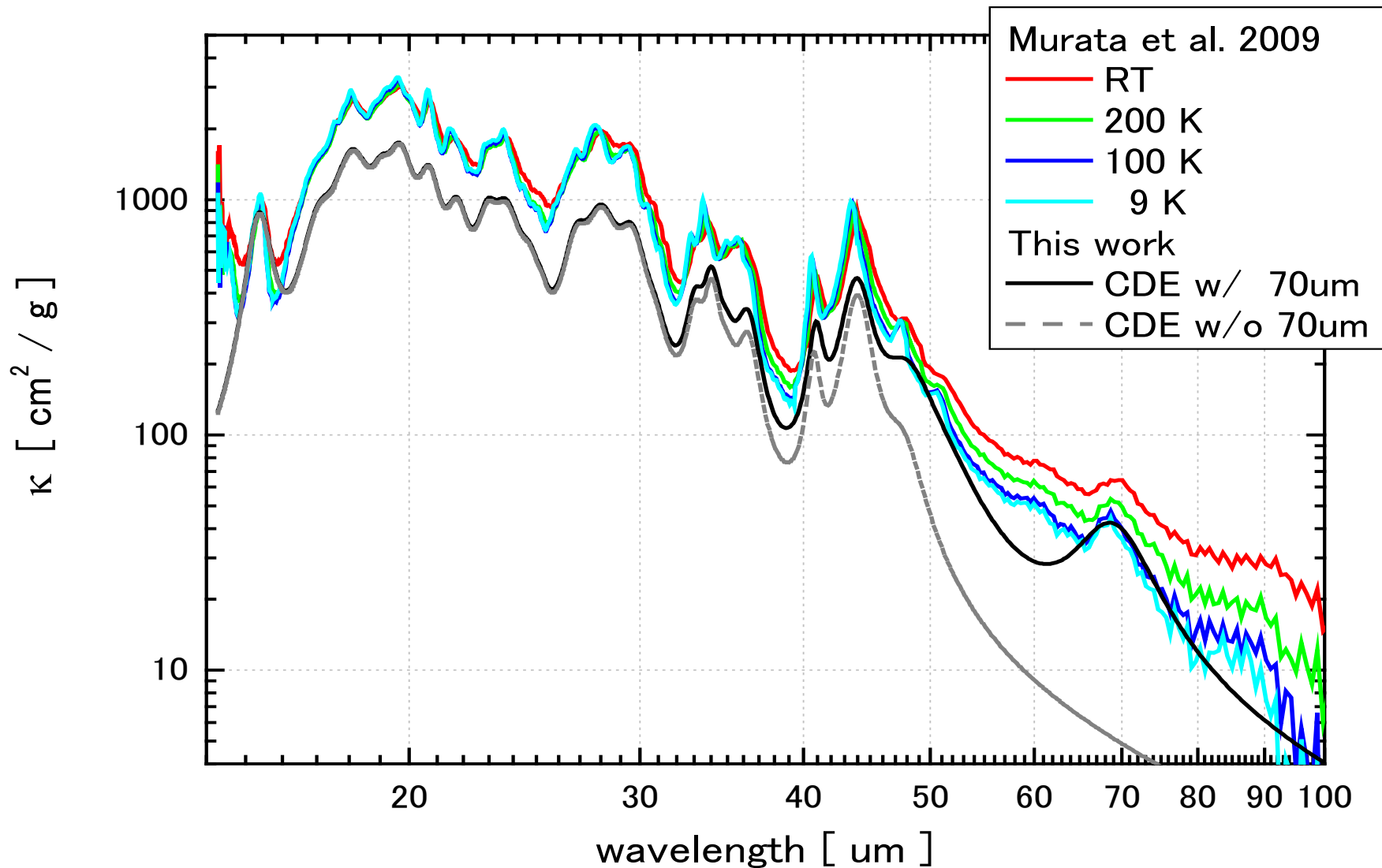




そもそも研磨は可能なのか？



# Comparison with HAS





# Summary

- 予測より強度が小さいのは散乱の影響か
- 吸収測定との比較では、スペクトルの形は再現できているが、定量性は不十分
- ビームが小さく高輝度な光源 (e.g. SPring8などの放射光施設) の利用が必要かも