

## 1000 までの高温下における topaz の OH 振動スペクトル

## OH vibrational spectra of topaz up to 1000C

# 小松 一生[1], 栗林 貴弘[1], 工藤 康弘[2]

# Kazuki Komatsu[1], Takahiro Kuribayashi[2], Yasuhiro Kudoh[3]

[1] 東北大・院・理, [2] 東北大・理

[1] Inst. of Min., Pet. and Econ. Geol., Tohoku Univ., [2] Inst. of Min., Pet. and Econ. Geol., Tohoku Univ., [3] Tohoku Univ

含水鉱物における OH 伸縮振動モードおよび OH 変角振動モードの温度依存性から高温下における OH 基の振動状態に関する知見を得るために、含水鉱物の中でも比較的高温まで安定な topaz( $\text{Al}_2\text{SiO}_4(\text{OH}, \text{F})_2$ )を試料として赤外吸収スペクトルの高温その場測定を行った。

用いた試料はパキスタン産 topaz の単結晶を (001) 面で両面研磨したものである。フーリエ変換型赤外分光装置 (JEOL, JIR-DIAMOND20) に高温ステージ (Linkam, LK-1500) を設置し、室温 (20 ) および 50-1000 まで 50 おきに昇温し、各温度における赤外吸収スペクトルを測定した。その後、同様に 50 おきに降温しながら測定を行った。なお、OH 変角振動領域においても十分な S/N 比を確保するために、窓材は使用せず、約 300  $\mu\text{m}$  の穴を開けたステンレス板に試料を置き炉内に設置した。50 /min. で目的の温度まで昇温および降温し、測定前に各温度で 5 分間保持した。また、OH 振動以外の基準振動や干渉縞の影響を取り除くため、OH 変角振動領域では 3 次の多項式を、OH 伸縮振動領域では sine 関数をバックグラウンド関数としてフィットし、得られたスペクトルから差し引いた。そのようにして得られた残差スペクトルをローレンツ関数によってフィットし、各振動モードにおいてピークの中心波数、ピークの高さおよび全幅半値幅 (FWHM) を求めた。

室温下では、3647 $\text{cm}^{-1}$  に OH 伸縮振動モードが、1165 $\text{cm}^{-1}$  に OH 変角振動モードがそれぞれ見られた。OH 伸縮振動モードの中心波数は温度の上昇に伴って低波数側に直線的にシフトし、その傾きは  $-0.048(1)\text{cm}^{-1}/$  であった。また低波数側へのシフトに伴ってピークの高さは低下し、FWHM は増大した。一方、OH 変角振動モードの中心波数は 1000 においても 1162 $\text{cm}^{-1}$  と室温下のピーク位置よりわずかに低い程度であるが、ピークの高さが低下し、FWHM が増大する点は OH 伸縮振動と同じ傾向を示す。また降温過程においても、昇温過程とほとんど変わらないスペクトルが得られた。このことは、実験した温度領域において脱水反応が起こらなかったことを示している。温度上昇に伴う OH 伸縮振動モードの低波数側へのシフトは、おそらく OH 基の分子ポテンシャルの非調和性によるものと考えられる。一方、OH 変角振動モードの中心波数がほとんど温度によらないことから、OH 変角振動が調和振動としておおよそ近似できると推定される。各振動モードの温度依存性の相違がポテンシャルの非調和性の違いによるものとする、OH 変角振動よりも OH 伸縮振動の方が脱水機構に關与する影響が強いという可能性を示唆する。