

Секция «Геология»

Твердые растворы $Nd_xGd_{1-x}Cr_3(VO_3)_4$ – структурные аналоги минерала хантита.

Добрецова Елена Анатольевна

Студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Геологический факультет, Москва, Россия

E-mail: elena-dobrecova@yandex.ru

Хантит $CaMg_3(CO_3)_4$ имеет пространственную группу $R32$ ($Z=1$). В структуре 3 типа координационных полиэдров: Ca находится в центре тригональной призмы O_6 , Mg – в центре октаэдра O_6 , C в треугольниках O_3 двух разных типов. Атомы углерода первого типа расположены на осях 3-его порядка, группа CO_3 (1) имеют позиционную симметрию D_3 . Остающиеся три кристаллографически эквивалентных группы CO_3 (2) расположены вокруг оси 3 и обладают позиционной симметрией C_2 . [2]

Хромовые бораты $RCr_3(VO_3)_4$ кристаллизуются в двух пространственных группах $R32$ и $C2/c$. В ромбоэдрической структуре вместо Ca в тригональных призмах находятся атомы редкоземельных элементов, в октаэдрических позициях Mg – атомы Cr, а треугольники CO_3 заменены VO_3 треугольниками. В моноклинной группе имеются два треугольных иона VO_3^{3-} в общем положении.

Две модификации боратов имеют политипную природу, в каждой из них можно выделить два различных типа слоев одинаковых для обеих разновидностей. В ромбоэдрическом политипе один тип слоев размножен вокруг другого осями 2, а в моноклинном – центрами инверсии. [1]

В виду чрезвычайной близости строения, эти соединения практически невозможно различить методами порошковой рентгенографии, однако решение этой задачи осуществимо с помощью метода ИК спектроскопии с использованием фактор-группового анализа колебаний сложных ионов VO_3^{3-} .

В настоящей работе методами ИК спектроскопии исследуются твердые растворы $NdCr_3(VO_3)_4$ ($C2/c$) – $GdCr_3(VO_3)_4$ ($R32$) с целью определения состава, при котором происходит переход между ними.

В исследованной серии твердых растворов при изменении x от 0 до 0.6 вид ИК спектра меняется мало, сохраняя черты, характерные для ромбоэдрической фазы: 4 полосы валентных колебаний в области $1260 - 1100 \text{ см}^{-1}$. Начиная с $x = 0.3$ до $x = 0.6$ на фоне полосы $\sim 1320 \text{ см}^{-1}$ появляются плечи со значениями частот, характерных для ИК спектров моноклинных фаз. При $x = 0.7$ и 0.8 вид спектров заметно меняется: возникает типичная для спектра моноклинного бората полоса $\sim 1280 \text{ см}^{-1}$, происходит расщепление полосы при $\sim 1200 \text{ см}^{-1}$. ИК спектр $Nd_{0.9}Gd_{0.1}Cr_3(VO_3)_4$ является типичным для моноклинного бората: наблюдается 8 полос валентных асимметричных колебаний и 4 полосы валентных симметричных колебаний в области $1040 - 914 \text{ см}^{-1}$.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-143.2010.5.

Литература

1. Белоконева Е.Л., Тимченко Т.И. // Кристаллография – 1983 - 28, № 6 - с.1118-1123
2. Dollase W.A., Reeder R.J. // Am. Mineral. – 1986 – 71. – P. 163