

СПЕКТРОСКОПИЯ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА
КУПЕРИТА

Рождествина В.И. (veronika@ascnet.ru), Мудровская Н.В.
Амурское отделение. ИГиП ДВО РАН

RAMAN SPECTROSCOPY OF COOPERITE

Rozhdestvina V.I., Mudrovskaya N.V.

Amur branch. Institute of Geology and Nature Management Far East branch RAS

В качестве экспресс-метода определения фазовой идентичности большого количества образцов выбран метод микро-спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) в кристаллах. В результате развития различных теоретических и экспериментальных подходов в сочетании с современными вычислительными методиками на сегодняшний день метод КРС является одним из ведущих методов исследования динамики кристаллической решетки, позволяющий установить достоверную связь между спектральными параметрами и характеристиками кристаллической структуры и являющийся более чувствительным к ближнему порядку распределения атомов.

Куперит кристаллизуется в тетрагональной сингонии с параметрами решетки $a = 3.47$, $c = 6.10$ Å, пр. гр. $P4_2/mmc$ (№ 131) и $Z=2$, в которой каждый атом Pt образует четыре компланарные связи, а каждый атом серы – четыре тетраэдрические связи. Сера занимает одну частную позицию. Исследованиями с применением методов рентгенографии монокристаллов, установлено, что на рентгенограммах куперита, кроме основных рефлексов, которые соответствуют известной тетрагональной ячейке, отчетливо проявляется много слабых рефлексов с интенсивностями $I \leq 60 \sigma(I)$, учет которых отвечает тетрагональной ячейке (пр. гр. $I4/mmm$) с удвоенными параметрами. Атомы S в структуре малой ($P4_2/mmc$) и большой ячеек ($I4/mmm$) статистически занимают две частные позиции. Модельные спектры комбинационного рассеяния куперита, для случая, когда сера находится в одной и в двух частных позициях, представлены на рис. 1.

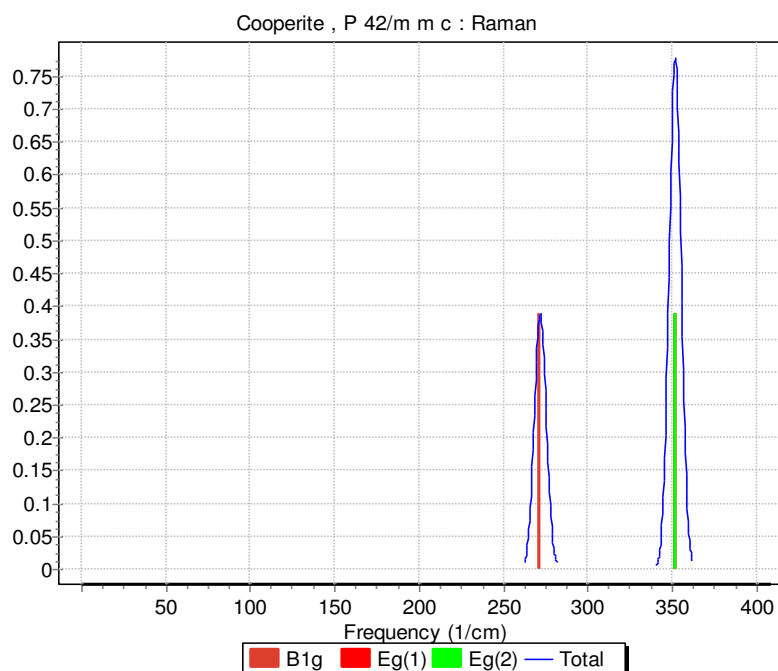
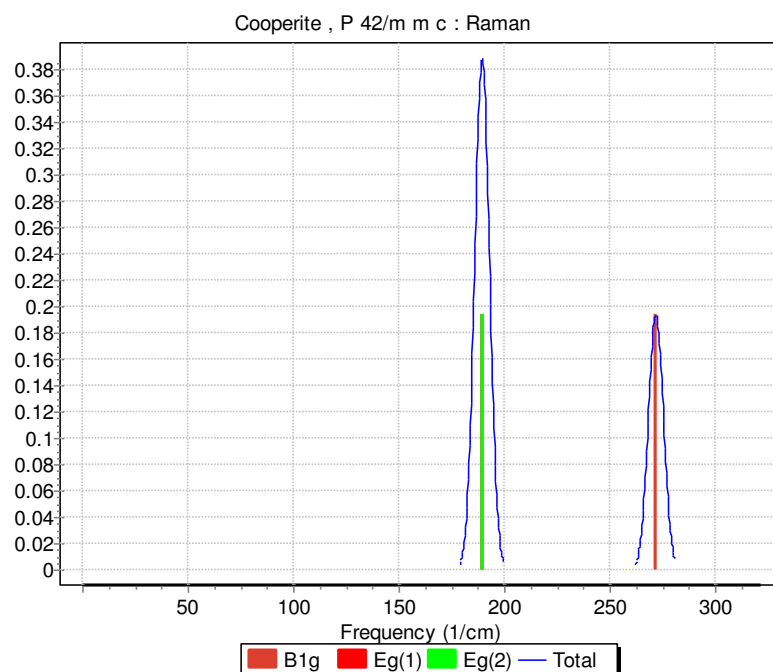


Рис. 1 Модельные спектры комбинационного рассеяния куперита (S в одной частной позиции и в двух, соответственно), Построены с помощью программного пакета LADY (Lattice Dynamics – «Динамика Решетки») (Smirnov M.B. Kazimirov V.Yu., 2001)

Исследования монокристаллических образцов куперита методом КРС проведены на спектрометре DXR Raman Microscope. В исследуемой коллекции минералов установлены группы кристаллов с различными спектрами КРС (рис. 2).

В спектрах, полученных от различных граней одного кристалла, существенных различий не выявлено. Ионы металла в куперите занимают 2с позиции, поэтому основными активными модами при комбинационном рассеянии являются $B_{1g} + E_g$ и при инфракрасном $2A_{2u} + 3E_u$.

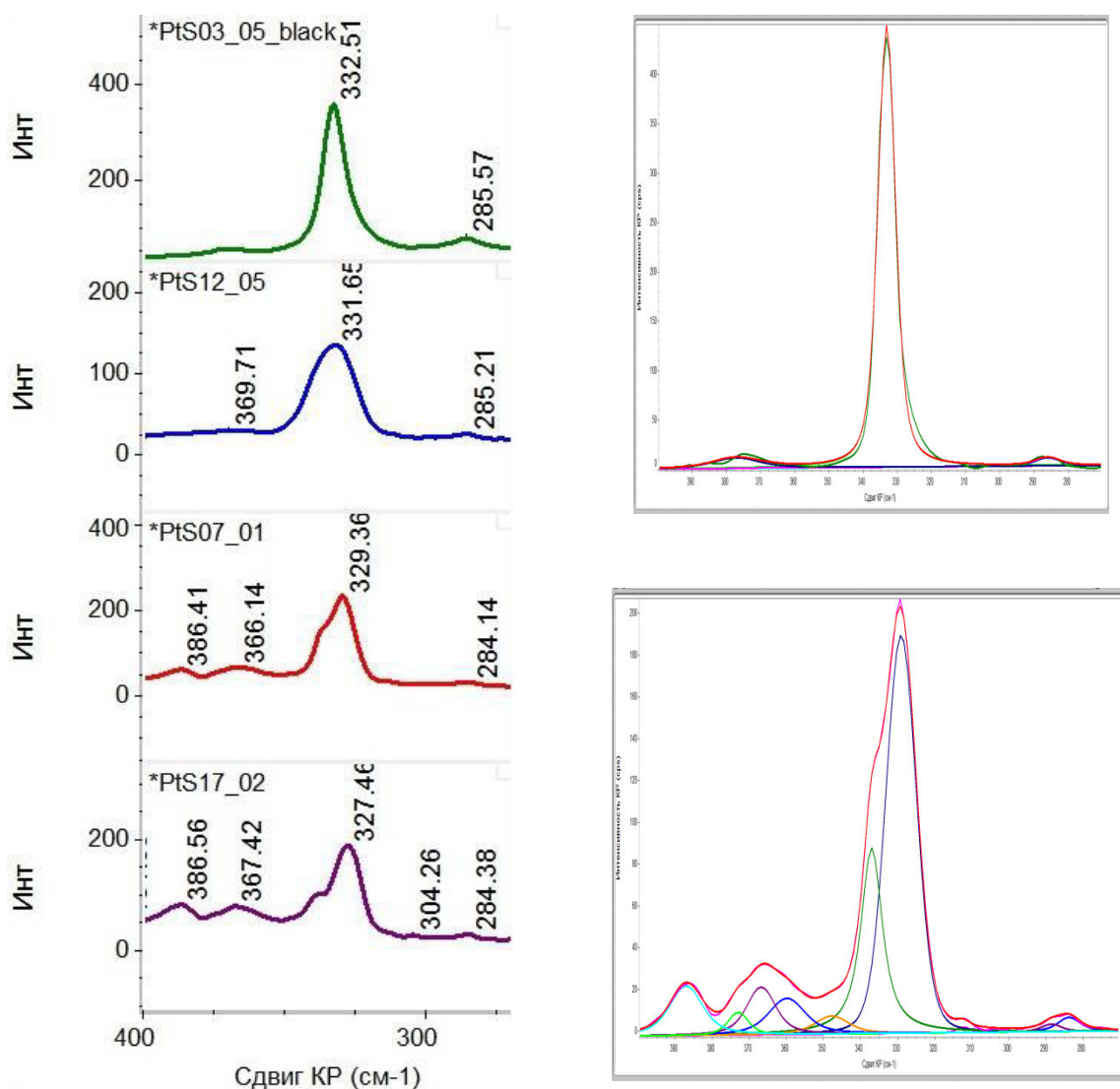


Рис. 2 Экспериментальные спектры комбинационного рассеяния кристаллов куперита

Основное колебание экспериментального спектра (рис. 2) в области 350 см-1 ближе к модельным построениям [4] для структуры, в которой сера занимает две частные позиции. Основное колебание в экспериментальных спектрах с увеличением интенсивности решетчатых колебаний (в области менее 200 см-1) смещается до 327 см-1, а с активизацией колебаний в области менее 100 см-1 основной пик раздваивается на 329 и 336 см-1. Это свидетельствует о появлении дополнительной колебательной моды. Присутствует серия кристаллов, в которых сильная полоса в области 350 см-1 не проявлена, а в области решетчатых колебаний (менее 200 см-1) наблюдается серия сильных полос.

Smirnov M.B. Kazimirov V.Yu. Lady. Software for lattice dynamics simulations. Communication of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 2001. P. 54.