

# ВОДА И ВОДОРОДСОДЕРЖАЩИЕ ДЕФЕКТЫ В КВАРЦЕ ЮЖНОГО УРАЛА: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ИНФРАКРАСНОЙ ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ

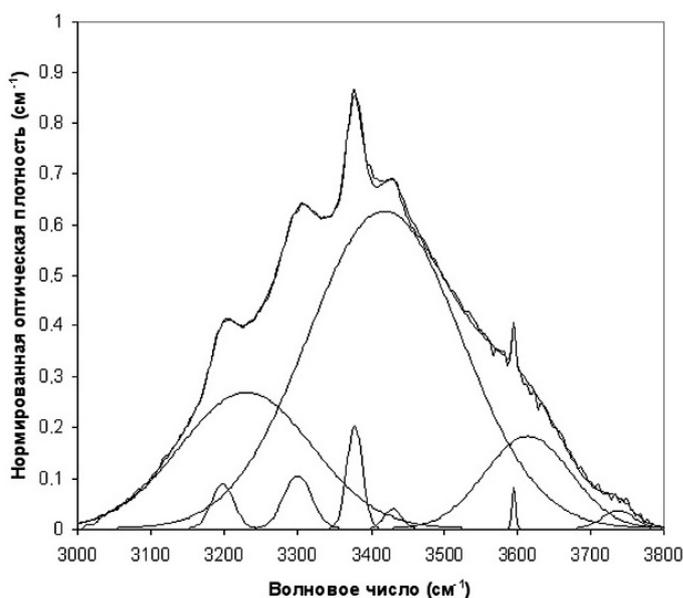
М. В. Штенберг<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> – Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс, [shtenberg@mineralogy.ru](mailto:shtenberg@mineralogy.ru)

<sup>2</sup> – Южно-Уральский Государственный Университет, г. Миасс

Гранулированный кварц в настоящее время является основным сырьем для получения высокочистого кварцевого стекла. Качество получаемых материалов во многом определяется качеством исходного сырья, которое в свою очередь зависит от наличия структурных, минеральных примесей и газовой-жидких включений [Емлин и др., 1988; Мельников, 1988]. Для исследования воды и водородсодержащих дефектов наиболее эффективным методом является инфракрасная спектроскопия. Из литературных данных [Kats, 1962; Aines et al., 1984; Kronenberg, 1994] известно, что ИК спектр кварца в «водной» области ( $3000\text{--}3800\text{ см}^{-1}$ ) представляет собой широкую диффузную полосу с максимумом  $3400\text{ см}^{-1}$  на которую накладываются узкие полосы относящиеся к колебаниям водородсодержащих группировок. Для определения концентрации водородсодержащих группировок в качестве препаратов используют плоскополированные пластинки, вместе с тем, огромное значение имеет определение содержания воды и Н-дефектов в кварцевых концентратах (крупка размерность фракции  $0.2\text{--}0.4\text{ мм}$ ).

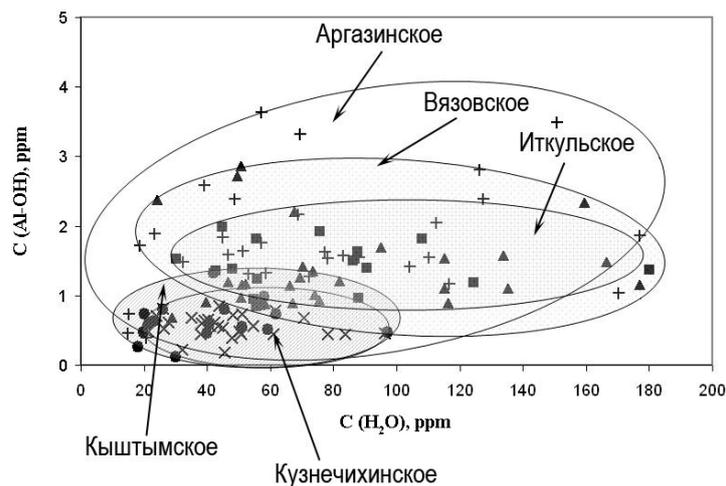
Объектом исследования в данной работе выступал гранулированный кварц различных месторождений Южного Урала (месторождения Кыштымское, Кузнечихинское, Аргазинское, Вязовское, Иткульское). Из образцов кварца были подготовлены пластинки толщиной  $\sim 0.8\text{ мм}$ . Кроме того, из этих же образцов получена кварцевая крупка фракции  $0.2\text{--}0.4\text{ мм}$ . Инфракрасные спектры пропускания были зарегистрированы на ИК Фурье спектрометре Nexus-870 Thermo Nicolet. Для получения спектров пропускания кварцевой крупки в качестве кюветы использовалась кювета изготовленная из безгидроксильного кварцевого стекла и иммерсионная жидкость имеющая показатель преломления близкий к показателю преломления кварца в инфракрасной области. Для всех зарегистрированных спектров была выполнена процедура коррекции базовой линии, и полученные спектры пропускания были пересчитаны в спектры поглощения (оптическую плотность) с последующей нормировкой на толщину образца. В качестве базовой линии использовалась кубическая парабола.



Моделирование спектров в области  $3000\text{--}3800\text{ см}^{-1}$  на суперпозицию линии гауссовской формы было выполнено в программе Peakfit (рис. 1). Интерпретация полос в «водной» области ( $3000\text{--}3800\text{ см}^{-1}$ ) детально рассмотрена в работах [Kats, 1962; Aines et al., 1984; Kronenberg, 1994; Ito et al., 2002]. Линии с максимумами в области  $3200\text{ см}^{-1}$  и  $3300\text{ см}^{-1}$  относятся к обертонам и составным частотам колебания связи Si-O в решетке кварца. Полоса  $3320\text{ см}^{-1}$

Рис. 1. Моделирование инфракрасного спектра поглощения кварца суперпозицией гауссовских линий.

Рис. 2. Соотношение концентрации группировок Al–OH и содержания молекулярной воды в кварце различных месторождений.



приписана к симметричным ( $\nu_1$ ) валентным колебаниям связи O–H в молекулах воды. Полоса  $3420\text{ см}^{-1}$  относится к антисимметричным ( $\nu_3$ ) валентным колебаниям связи O–H в молекулах воды. Узкая полоса с максимумом  $3378\text{ см}^{-1}$  связана с колебаниями группировок Al–OH в тетраэдрах  $\text{SiO}_4$ , в которых центральный атом кремния замещен атомом алюминия. Линия  $3432\text{ см}^{-1}$  появляется вследствие резонанса Ферми с полосой  $3378\text{ см}^{-1}$  и связана с колебаниями соответствующих Al–OH группировок. Узкая полоса  $3305\text{ см}^{-1}$  которая также как и линия  $3378\text{ см}^{-1}$  относится к колебаниям группировок Al–OH, но атом водорода располагается между двумя неэквивалентными атомами кислорода около тетраэдра  $\text{AlO}_4$ . Полосы  $3600$  и  $3740\text{ см}^{-1}$  приписаны, соответственно, к симметричным и антисимметричным колебаниям OH- групп в силанольных группировках Si–OH или в изолированных молекулах воды. Полосу  $3595\text{ см}^{-1}$  относят к колебаниям группировок Si–OH, которые находятся в локальных дефектах, благодаря чему эта линия имеет небольшую ширину.

На рисунке 2 представлена диаграмма соотношения концентрации группировок Al–OH и молекулярной воды в кварце изученных месторождений. Видно, что концентрация молекулярной воды изменяется в широких пределах от 20 до 200 ppm. Кварц Кыштымского и Кузнечихинского месторождения содержит небольшое количество молекулярной воды и водородсодержащих группировок, что является показателем его качества.

*Работа выполнена при поддержке гранта молодых ученых и аспирантов УрО РАН, проекта РНП 2.1.1/10727 и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (госконтракт № П-735 от 20.05.2010).*

### Литература

- Емлин Э. Ф., Синкевич Г. А., Якшин В. И. Жильный кварц Урала в науке и технике. Свердловск: Сред.-Урал. кн. изд-во, 1988. 272 с.
- Мельников Е. П. Геология, генезис и промышленные типы месторождений кварца. М.: Недра, 1988. 216 с.
- Aines R. D., Rossman G. R. Water in minerals? A peak in the infrared // Journal of Geophysical Research. 1984. V. 89. № B6. P. 4059–4071.
- Ito Y., Nakashima S. Water distribution in low-grade siliceous metamorphic rocks by micro-FTIR and its relation to grain size: a case from the Kanto Mountain region, Japan // Chemical Geology. 2002. V. 189. P. 1–18.
- Kats A. Hydrogen in Alpha-quartz // Philips Research Reports. 1962. V. 17. P. 201–279.
- Kronenberg A. K. Hydrogen speciation and chemical weakening of quartz. // Reviews in Mineralogy. 1994. V. 29. P. 123–176.