

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЛИТИЕВОСИЛИКАТНОЙ СИСТЕМЫ ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

О. Н. Королева^{1,2}, П. В. Хворов²

¹ – Южно-Уральский Государственный Университет, г. Миасс

² – Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс, koroleva@mineralogy.ru

Работа посвящена экспериментальным исследованиям строения литиевосиликатной системы с содержанием $\text{Li}_2\text{O} \geq 50$ мол. %. Для регистрации спектров комбинационного рассеяния использовался спектрометр iNR 320 Labram с микроскопом Olimpus VX41. На рисунке 1 представлены зарегистрированные спектры КР продуктов кристаллизации расплавов состава $x\%\text{Li}_2\text{O}(100-x)\%\text{SiO}_2$, где $x = 50, 55$ и 60 . Полосы в высокочастотной области спектра обусловлены колебаниями концевых группировок в тетраэдрах SiO_4 с различным соотношением мостиковых и немостиковых атомов кислорода. Доминирующая полоса с максимумом в области 977 см^{-1} в спектре КР метасиликата лития обусловлена колебаниями структурных единиц Q^2 , а полоса с максимумом в области 845 см^{-1} связана с колебаниями Q^1 . Также наблюдается слабая полоса около 1030 см^{-1} , которую можно отнести к колебаниям структурных единиц Q^3 . При добавлении оксида лития до 55 мол. % в спектре наблюдается появление новой полосы с максимумом около 821 см^{-1} и уменьшение полосы около 845 см^{-1} , что скорее всего связано с изменением второй координационной сферы атомов кремния в тетраэдрах Q^1 -типа. При дальнейшем увеличении содержания оксида лития до 60 мол. % полоса около 821 см^{-1} становится доминирующей, что говорит о деполимеризации силикатной сетки.

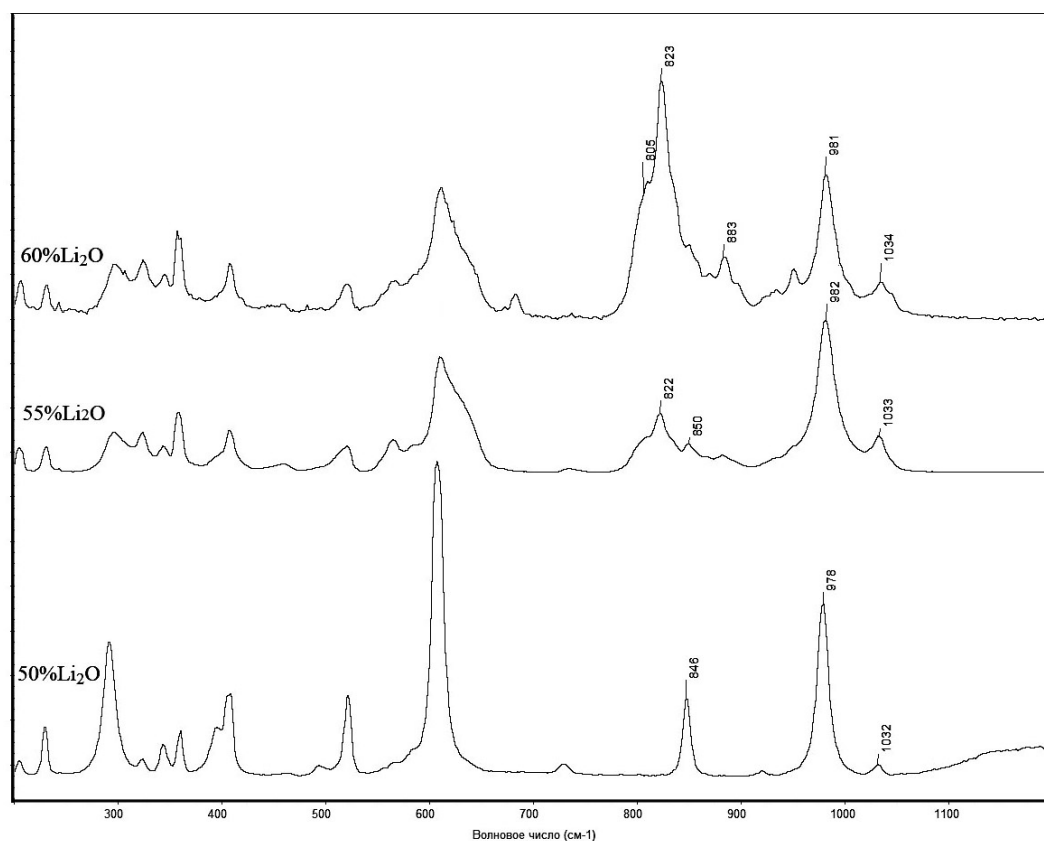


Рис. 1. Спектры КР продуктов кристаллизации расплавов системы $x\%\text{Li}_2\text{O}(100-x)\%\text{SiO}_2$, где $x = 50, 55$ и 60 .

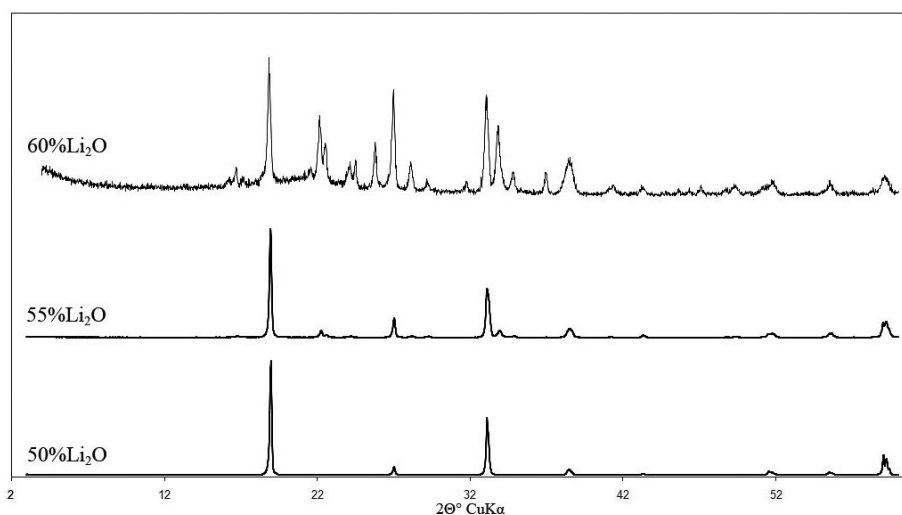


Рис. 2. Дифрактограммы продуктов кристаллизации расплавов системы $x\text{Li}_2\text{O} \cdot (100-x)\text{SiO}_2$, где $x = 50, 55$ и 60 .

Исследованные образцы также были изучены рентгеноструктурным методом на дифрактометре ДРОН-2.0, Cu-анод, графитовый монохроматор (рис. 2). После диагностики присутствующих фаз были рассчитаны их приблизительные соотношения методом постоянных коэффициентов с использованием «корундовых чисел», взятых из карточек с наибольшим дифракционным соответствием полученных нами фаз. При содержании 50 мол. % оксида лития в образце был определен только метасиликат лития Li_2SiO_3 , при 55 мол. % Li_2O обнаружены Li_2SiO_3 (~90 %) и Li_4SiO_4 (~10 %). Форма дифракционной кривой для состава $60\text{Li}_2\text{O} \cdot 40\text{SiO}_2$ указывает на присутствие рентгеноаморфной фазы, которая не рассматривается в данной работе, а является объектом дальнейших исследований. В кристаллической же фазе были определены Li_2SiO_3 (~40 %), Li_4SiO_4 (~45 %) и $\text{Li}_6\text{Si}_2\text{O}_7$ (~15 %).

Данные рентгеноструктурного анализа согласуются с результатами интерпретации спектров комбинационного рассеяния. Очевидно, что при увеличении содержания оксида лития в силикатах наблюдается уменьшение степени полимеризации, что сопровождается появлением в кристаллической фазе сначала диортосиликата, а затем ортосиликата лития.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 10-05-96044-р_урал_а, гранта Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских ученых (МК-109.2011.5) и гранта РНП 2.1.1/10727.