

О СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ МЕТОДАХ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ МИНЕРАЛОВ

Савилова Е.Б., Фролова А.А.

Оренбургский государственный университет

Современное развитие методов кристаллохимических исследований плотно связано с успехами в изучении твердого тела. Методы изучения вещества пополнились методами спектроскопии.

Электронный парамагнитный резонанс

Электронный парамагнитный резонанс (ЭПР), состоит в способности парамагнитных кристаллов поглощать высокочастотную энергию за счет переходов между спиновыми уровнями электронов.

Он наблюдается исключительно в тех минералах, которые содержат атомы с неспаренными спинами электронов. Условия для наблюдения электронного парамагнитного резонанса образует взаимодействие магнитных моментов этих электронов с приложенным магнитным полем. Взаимодействие с магнитным полем приводит к тому, что энергия спиновых состояний одного из них увеличивается, а другого уменьшается.

Ионы различных элементов характеризуются своей системой энергетических уровней. Под влиянием кристаллических и магнитных полей уровни расщепляются на подуровни. Электроны могут находиться только в специальных энергетических состояниях или на определенных подуровнях, и переход электронов с одного подуровня на другой происходит с испусканием или поглощением энергии. При обычных условиях на нижних подуровнях содержится больше электронов, чем на верхних. Переход с нижнего подуровня на верхний возможен при облучении парамагнитного кристалла радиочастотным полем, если энергия кванта последнего равна интервалу между энергетическими подуровнями. [1]

Таким образом, ЭПР представляет собой явление, обусловленное квантовыми переходами, происходящими между энергетическими уровнями под влиянием радиочастотного поля резонансной частоты. Параметры спектров ЭПР указывают на локализацию парамагнитного центра, дающего этот сигнал, в определенной позиции кристаллической структуры.

С помощью ЭПР можно диагностировать в минералах примеси парамагнитных ионов переходных элементов: группы Fe, Pd, Pt, TR, актиноидов. Не парамагнитные элементы в высших степенях окисления (Ti^{3+} , V^{4+} , Nb^{5+} , U^{6+}) не могут быть зарегистрированы с помощью ЭПР. Эти же элементы в низшей степени окисления (Ti^{3+} , V^{4+} , V^{3+} , Nb^{4+} , U^{3+} , U^{5+}) дают характерные спектры ЭПР.

Метод электронного парамагнитного резонанса позволяет обнаруживать магнитные моменты неспаренных электронов, а также изучать взаимодействие этих электронов с окружающей средой. Из-за чувствительности метода ЭПР, которая в разы превышает чувствительность статических измерений магнитной

восприимчивости, его широко применяют при исследовании твердых тел, а также катализаторов. [2]

Ядерный магнитный резонанс

Явление ядерного магнитного резонанса (ЯМР) состоит в резонансном поглощении энергии радиочастотного поля при изменении магнитного момента ядра. Эффект ЯМР более тонкий, чем ЭПР: так как магнитные моменты электронов и ядер различаются примерно в 200 раз, то в таком соотношении находятся и частоты используемого радиоизлучения в этих двух методах. Взаимодействие магнитного момента ядра с внешним магнитным полем приводит к расщеплению энергетических уровней на ядерные подуровни, переходы между которыми вызывают резонансное поглощение энергии, регистрируемое в виде одиночной линии. Из спектров ЯМР удается извлекать ценнейшие сведения о положении и состоянии протонов в структуре минералов.

Импульсной ЯМР-спектроскопия с мощным математическим обеспечением вызывают широкое внедрение этих разработок в нефтяную геологию. ЯМР исследования дают сведения о структурном положении атомов, их координации (в цеолитах), о симметрии и силе кристаллических полей, действующих на атомы. [3]

Список литературы

1. Егоров-Тисменко Ю.К. *Кристаллография и кристаллохимия :учебник / Ю.К. Егоров-Тисменко.* – М. : КДУ, 2005. – С. 589.
2. Лазаренко Е.К. *Курс минералогии : учебник для ун-тов /Е.К. Лазаренко.* – М. : Высш. Шк., 1971.- С. 608.
3. Блохин М.А. *Методы рентгено-спектральных исследований.* – М. : Изд-во физ.-мат. Лит., 1959. –463 с.