

МНОГОМЕТОДНЫЙ ПОДХОД К ИССЛЕДОВАНИЮ СЛОЖНЫХ МИНЕРАЛОВ НА ПРИМЕРЕ ФРАНКАМЕНИТА

Шендрик Р.Ю.¹, Канева Е.В.¹, Панкрушина Е.А.², Белозёрова О.Ю.¹, Радомская Т.А.¹

¹Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Иркутск, Россия, r.shendrik@gmail.com

²Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Во многих случаях природные системы являются прототипом для новых функциональных материалов, обладающими лучшими по сравнению с аналогами свойствами. Отмечается, что увеличение сложности системы зачастую приводит к улучшению тех или иных свойств материала.

В этой связи представляется актуальным проведение комплексного исследования кристаллохимических и спектральных свойств сложных минералов.

В настоящей работе представлен многометодный подход к исследованию сложных минералов. Подход включает в себя как кристаллохимический анализ минерала, так и комплексное спектроскопическое исследование, включающее в себя исследования электронных и колебательных переходов в минералах, а также расчет электронной и колебательной структуры минералов квантовохимическими методами из первых принципов.

В качестве примера в настоящей работе будет представлено исследование с помощью данного под-

хода минерала средней сложности (340 бит на ячейку) – франкаменита – $K_3Na_3Ca_3[Si_{12}O_{30}]F_3(OH)(H_2O)$ из Мурунского массива. Было проведено уточнение кристаллической структуры франкаменита.

Методами спектроскопии комбинационного рассеяния и инфракрасной спектроскопии были получены колебательные спектры франкаменита. Полосы в колебательных спектрах были соотнесены с соответствующими модами по результатам квантовохимических расчетов.

Люминесцентные свойства и природа окраски франкаменита была установлена методами оптической и ЭПР спектроскопии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22–27–00183, <https://rscf.ru/project/22-27-00183/> на оборудовании ЦКП «Изотопно-геохимических исследований» (ИГХ СО РАН) и «Геоаналитик» (ИГГ УрО РАН).