

Р-ЗАВИСИМАЯ РАМАНОВСКАЯ *in situ* СПЕКТРОСКОПИЯ ПРИРОДНОГО ФЕНАКИТА И *ab initio* РАСЧЕТЫ ЕГО ФОНОННОГО СПЕКТРА

Печурин М.С.¹, Панкрушина Е.А.¹, Рогинский Е.М.², Вотьяков С.Л.¹

¹ Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого УрО РАН, Екатеринбург, Россия, Mikhail.Pechurin@urfu.me

² Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

Фенакит Be_2SiO_4 представляет собой редкий минерал с простой кристаллической решеткой, состоящей из каркаса вершинно-связанных тетраэдров SiO_4 и BeO_4 , с пространственной группой R-3. Этот минерал, а также его синтетические аналоги, отличаются высокой радиационной и термической стойкостью, что придает им широкий спектр практического применения. Несмотря на обширное количество публикаций, посвященных оптико-спектроскопическим исследованиям фенакита (например, [Shein et al., 2008]), его интерпретация до сих пор остается предметом дискуссий.

В работах различных лет предлагались различные подходы к интерпретации спектра Be_2SiO_4 , включая как внутренние и внешние колебания, так и обширную деформацию кристалла. Однако информация о возможных фазовых переходах и особенностях динамики решетки и ангармонизма колебаний в фенаките остается недостаточной. Исследования фенакита с использованием РТ-зависимой рамановской спектроскопии не проводились, хотя подобные

исследования выполнены для многих силикатных минералов, включая окрестности фазовых переходов.

Согласно данным расчета методом теории функционала плотности (DFT), фононный спектр Be_2SiO_4 разделяется на три диапазона: 0–657, 657–838 и 838–1092 cm^{-1} . Высоочастотные диапазоны характеризуются скорее псевдолокализованными в полиэдрах BeO_4 и SiO_4 колебаниями, в то время как низкочастотный диапазон (до 657 cm^{-1}) характеризуется колебаниями Be-Si-O и Be-O колец.

Экспериментальные барические зависимости рамановских спектров Be_2SiO_4 были получены с использованием алмазной наковальни Evolution Diacell $\mu\text{ScopeDAC-HT[G]}$. При давлениях, превышающих 10 ГПа, наблюдалось качественное изменение спектра, вероятно, связанное с образованием новой фазы. Природа этой новой фазы остается под вопросом, однако явление является обратимым. Важно отметить, что наблюдение подобного эффекта для фенакита сообщается впервые.

Таким образом, планируется дальнейшее исследование с целью связать спектральные особенности в области высоких давлений со структурной трансформацией в кристаллической решетке фенакита.

Работа выполнена в рамках з/б темы ИГГ УрО РАН № 123011800012-9

ЛИТЕРАТУРА

1. Shein I.R. et al. Energy band structure and X-ray spectra of phenakite Be_2SiO_4 // *Physics of the Solid State*. 2008. V. 50. P. 615–620.

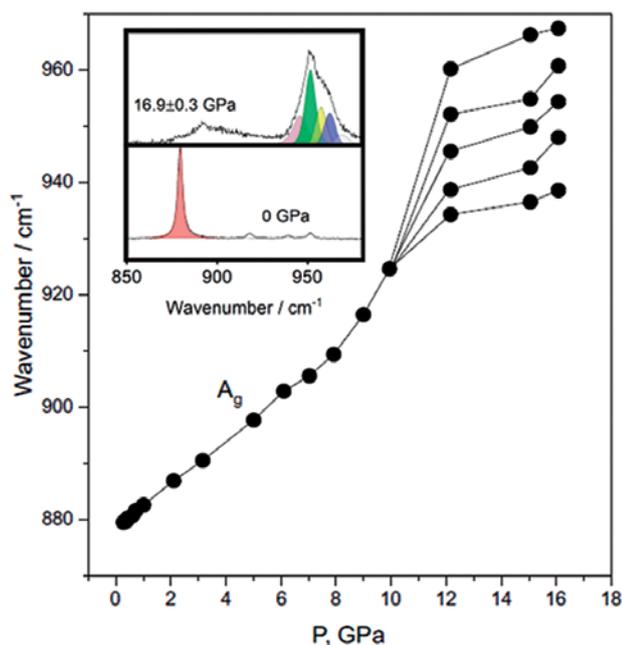


Рис. 1. Смещение и расщепление A_g моды фенакита ($\sim 878 \text{ cm}^{-1}$) в диапазоне давлений 0–17 ГПа