

## РАСЧЁТ ИНДЕКСА КРИСТАЛЛИЧНОСТИ КВАРЦИТОВ ПО СПЕКТРАМ ИНФРАКРАСНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

А.М. Ануфриенкова, О.С. Разва

Научный руководитель профессор М.В. Коровкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

В связи с увеличивающимся в последние годы производством новых материалов и изделий, получаемых из кварца, возрос спрос на высококачественное кварцевое сырьё. Его используют при производстве оптоволоконных систем связи, специальных видов стекла, для электронной промышленности и, особенно, для изготовления фотоэлектрических преобразователей – солнечных батарей. Кроме того, в последние годы резко возросла потребность в высококачественном кварцевом сырьё для производства уникальных керамических материалов и изделий из карбида кремния (SiC) и нитрида кремния (Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) для черной и цветной металлургии, химической промышленности. Кварциты Антоновской группы месторождений (Россия, Западная Сибирь) являются потенциальным источником высококачественного сырья, используемого для высоких технологий [1, 2].

По своему происхождению кварциты относятся к осадочно-метаморфическим отложениям и являются продуктом литификации в условиях раннего метагенеза кварцево-гидрослюдисто-серицитового ряда [2]. В результате преобразования кремнистой биогенной толщи происходила кристаллизация аморфного кремнезёма и появление кристаллической фазы α-кварца [4]. Кристаллическая фаза α-кварца характеризуется наличием двойного пика инфракрасного (ИК) поглощения 800...778 см<sup>-1</sup>. Расчёт индекса кристалличности производился по методике И.И. Плюсниной [3], учитывающей изменение параметров лишь одного пика ИК-поглощения при 778 см<sup>-1</sup> в этом двойном пике. Для выявления наиболее чистых разновидностей кварцитов была сделана попытка определить степень преобразования кварцитов, отобранных на месторождениях «Сопка-248» и «Белокаменка» Антоновской группы месторождений с помощью оценки степени кристалличности кварцевых микрогранул [5, 6].

В данной работе применена методика расчёта индекса кристалличности кварца, использующая отношение пиков инфракрасного поглощения при 778 и 695 см<sup>-1</sup> [9]. Расчёт индекса кристалличности производили по формуле:  $K_i = a/b$ , где  $a/b$  – отношение величины пика 778 см<sup>-1</sup> к пику 695 см<sup>-1</sup>. Величины пиков определялись по методу базовой линии, как показано на рисунке.

Спектры ИК-поглощения регистрировались на спектрофотометре Specord M40 в интервале 400...4000 см<sup>-1</sup> с разрешением 0,01 см<sup>-1</sup>, а также на спектрофотометре IRPrestige-21 фирмы «Shimadzu» с преобразованием Фурье (FTIR-8400S) в интервале 300...4000 см<sup>-1</sup> с разрешением 0,001 см<sup>-1</sup> (FT-IR), с помощью программного обеспечения IRsolution. Образцы для исследований были подготовлены в равных условиях из отобранных проб кварцитов. Исследуемый образец (массой 4 мг) растирался в агатовой ступке до фракции менее 2 мкм и смешивался с порошком КВг (массой 400 мг) марок ОЧ и ЧДА, помещался в прессформу и прессовался под большим давлением (10 т/см<sup>2</sup>) в прозрачные тонкие диски. При измерении ИК-спектров на спектрофотометре FTIR-8400S навеска образца составляла 0,5 мг. Во всех измерениях обеспечивалась одинаковая масса исследуемого образца (рис.).

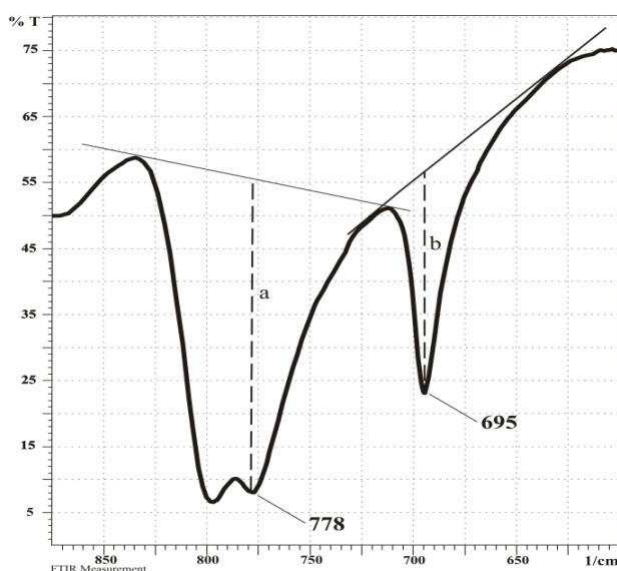


Рис. Графическое определение величины пиков ИК-поглощения в области 778...695 см<sup>-1</sup> по методу базовой линии [3]

По этой методике нами исследовались образцы кварцитов, отобранных на месторождениях «Сопка-248» и «Белокаменка» Антоновской группы. Для сравнения в таблице приведены отличающиеся по абсолютным величинам расчётные значения индекса кристалличности, полученные разными методами, однако тенденция их закономерного изменения сохраняется.

Приведенные в таблице усреднённые значения индекса кристалличности получены по результатам измерения трех образцов. Эти относительные значения индекса кристалличности отражают, по нашему мнению, степень преобразования кварцитов.

Мелкокристаллический белый кварцит месторождения «Сопка-248», отличающийся достаточно высокой чистотой [2], характеризуется наименьшим расчётным значением индекса кристалличности 2,21, полученным разными методами.

С увеличением глубины, а также от центральных участков тела кварцитов к периферии кварциты изменяют свой химический состав и цвет; степень кристалличности их также повышается до значений 2,42...2,50. В локальных участках, особенно в зонах

повышенного дробления, изначально химически чистые кварциты под влиянием гипергенных процессов загрязняются, а степень их кристалличности возрастает.

Кварциты месторождения Белокаменка характеризуются немного большими значениями индекса кристалличности. Возможно, что рассчитанные по предлагаемой методике значения индекса кристалличности кварцитов могут быть использованы для сравнительного анализа кварцевого сырья только в пределах одного месторождения.

Таблица

Индекс кристалличности кварцитов

Название месторождения	Образец	КИК, индекс кристалличности (по методу [3])	КИК, индекс кристалличности (по методу [9])
Сопка-248	Кварцит белый	2,21	2,21
	Кварцит серый с примазками оксидов железа	2,52	2,42
	Кварцит серого цвета с примазками глинистого вещества	2,66	2,49
	Кварцит черного цвета с периферийного участка	2,75	2,50
	Яшмовидный кварцит буровато-вишневого цвета с черными прожилками	5,6	2,55
Белокаменка	Кварцит серого цвета	2,55	2,41
	Кварцит белого цвета сахаровидный	3,27	2,47
	Кварцит белого цвета прозрачный	3,8	2,67

В работе [9] отмечалось, что с увеличением размера кварцевых гранул закономерно увеличиваются значения индекса кристалличности, однако, установить связь между линейными размерами кварцевых кристаллитов и значениями индекса кристалличности в данной работе пока не удалось.

Значения индекса кристалличности, рассчитанные по методу В. Рамасами и Г. Суреш, подтверждают закономерность их изменения, полученную по методу И.И. Плюсниной. По нашему мнению, предложенный метод более достоверно отражает степень преобразования кварцитов, поскольку данные пики относятся к разным типам симметрии в кварце: колебание с частотой  $695\text{ см}^{-1}$  относится к симметрии типа  $A_2$ , а колебание, дающее полосу при  $778\text{ см}^{-1}$ , относится к симметрии типа  $E$  [7, 8].

#### Литература

1. Ананьева Л.Г., Ананьев Ю.С., Долгов И.В., Коробейников А.Ф., Коровкин М.В. Поиски, оценка и обогащение кварцевого сырья для высоких технологий // Известия Томского политехнического университета, – 2001. – Т. 304. – В. 1. – С. 123–130.
2. Ананьева Л.Г., Коровкин М.В. Минералого-геохимическое изучение кварцитов Антоновской группы месторождений // Известия Томского политехнического университета. – 2003. – Т. 306. – №. 3. – С.50–55.
3. Барсанов Г.П., Плюснина И.И., Яковлева М.Е. Особенности состава, некоторых физических свойств и структуры халцедона // Новые данные о минералах СССР. – М.: Наука, 1979. – Вып. 28. – С. 3–33.
4. Коровкин М.В., Ананьева Л.Г. Оценка степени метаморфизма кварцитов Антоновской группы месторождений по данным минералогических исследований // Минералогия, геохимия и полезные ископаемые Азии. – Томск: Издательство Томского ЦНТИ. – 2013. – Вып. 2. – С. 139–145.
5. Korovkin M.V., Ananieva L.G., Antsiferova A.A. Assessment of quartzite crystallinity index by FT-IR // Proceedings of the 10th International Congress for Applied Mineralogy (ICAM) / Broekmans MATM (editor). – Trondheim, Norway. – 2011. – P. 403-410.
6. Коровкин М.В., Ананьева Л.Г., Анциферова А.А. Оценка степени преобразования кварцитов методом инфракрасной спектроскопии // Известия Томского политехнического университета. – 2012. – Т. 320. – №. 1. – С.16–18.
7. Лазарев А.Н., Миргородский А.П., Игнатъев И.С. Колебательные спектры сложных окислов. – Л.: Наука, 1975. – 296 с.
8. Силинь А.Р., Трухин А.Н. Точные дефекты и элементарные возбуждения в кристаллическом и стеклообразном  $\text{SiO}_2$ . – Рига: Зинатне, 1985. – 244 с.
9. Ramasamy V., G. Suresh. Mineral Characterization and Crystalline Nature of Quartz in Ponnaiyar River Sediments, Tamilnadu, India // American-Eurasian Journal of Scientific Research. – 2009. – V. 4 (2). – P. 103–107.
10. Ramasamy V., Ponnusamy V. Analysis of air suspended particles of Coimbatore-a FTIR study // Indian J. Phys. – 2009. – V. 88 (3). – P. 301–312.