

Таблицы для интерпретации полос рамановского спектра

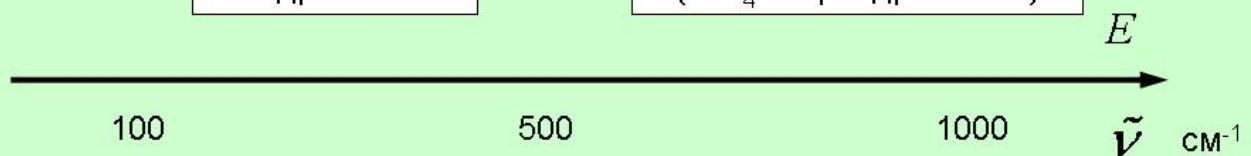
Энергия (частота) полосы колебательного спектра

типичные частоты колебаний атомных групп в минералах (cm^{-1})
(after Farmer, 1974; Nakamoto, 1978).

группа	валентные колебания	деформац. колебания	группа	валентные колебания	деформационные колебания
MOH^-	3700–2900	1300–400	PO_4^{3-}	1100–950	600–550
H_2O	3700–2900	1650–1600	SiO_4^{4-}	1000–800	550–400
CO_3^{2-}	1600–1300	950–650	Si_xO_y^-	1200–900	800–400
NO_3^-	1500–1250	900–700	AsO_4^{3-}	900–750	400
BO_3^-	1300–1200	800–600	VO_4^{3-}	900–750	400
SO_4^{2-}	1200–1050	700–600	WO_4^{2-}	850–750	350–300

колебания в катионной подрешетке

собственные колебания ковалентных групп (SiO_4 -тетраэдры и т.п.)



Виды колебаний в молекулах и кристаллах

либрации («качания»)

деформационные

валентные

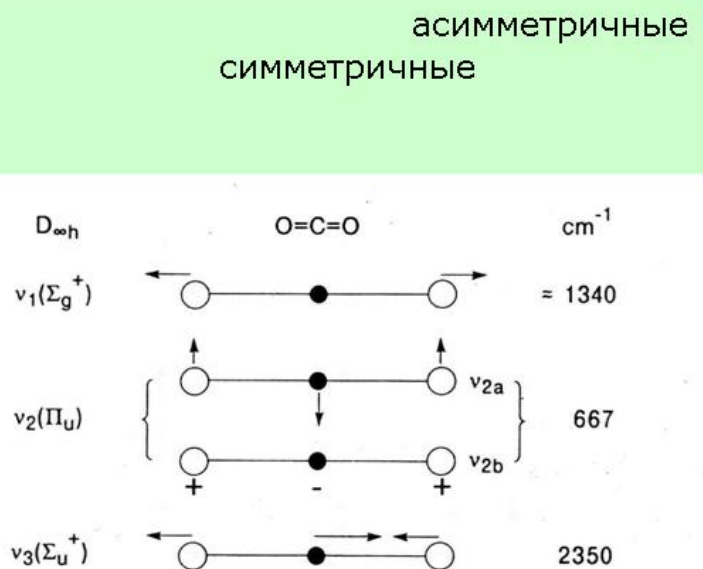
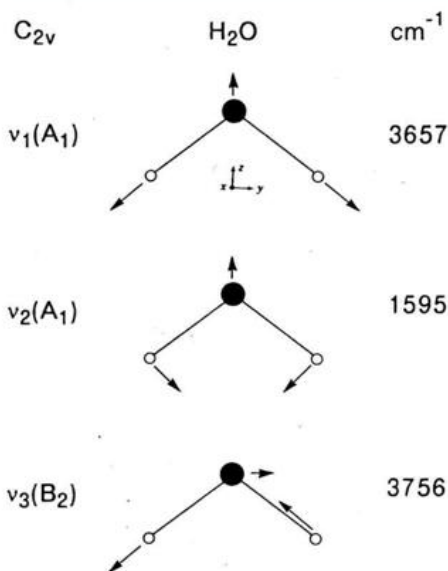
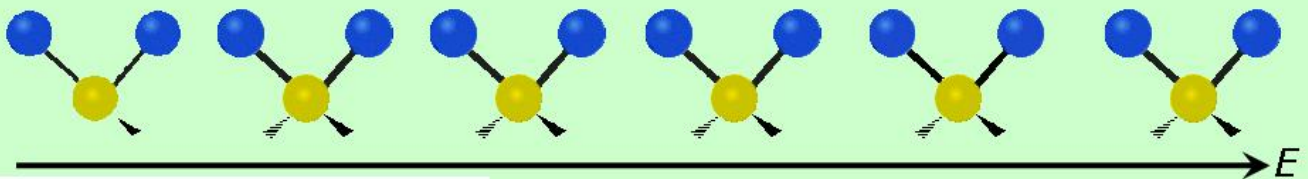


Figure 1-12 Normal modes of vibrations in H_2O .

Figure 1-11 Normal modes of vibration in CO_2 (+ and - denote vibrations going upward and downward, respectively, in direction perpendicular to the paper plane).

Колебания кристаллов минералов

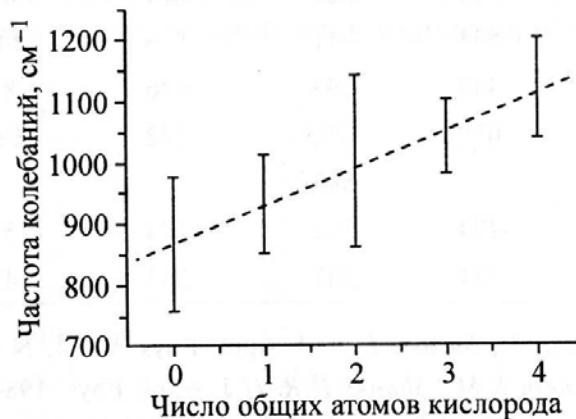
Весь спектр колебаний силикатов ($50-1200\text{ см}^{-1}$) может быть условно разделен на следующие области:

- $50-300\text{ см}^{-1}$ – смешанные трансляции катионов и анионов SiO_4 ;
- $300-400\text{ см}^{-1}$ – либрационные колебания SiO_4 ;
- $400-600\text{ см}^{-1}$ – деформационные колебания SiO_4 ;
- $700-1200\text{ см}^{-1}$ – валентные колебания SiO_4 .

Характеристические частоты колебаний молекулярных фрагментов в кристаллах минералов, см^{-1}

$[\text{CO}_3]^{2-}$	1080–1090 (кальцит, CaCO_3 ; смитсонит, ZnCO_3)
$[\text{SO}_4]^{2-}$	1000 (барит, BaSO_4 ; целестин, SrSO_4)
$[\text{PO}_4]^{3-}$	965 (апатит, $\text{Ca}_5(\text{Fe}, \text{Cl}, \text{OH})(\text{PO}_4)_3$)

Частота валентных полносимметричных колебаний анионов SiO_4 в силикатах в зависимости от числа общих для соседних тетраэдров атомов кислорода. 0 – орто-, 1 – диорто-, 2 – кольцевые- и цепочечные-, 3 – ленточные-, 4 – каркасные силикаты.



Р.Ю.Орлов и др., 1985:

Частоты колебаний типа ν_1 в минералах, содержащих группировки MO_3 , MO_4

Минерал	Частоты (см^{-1})
Карбонаты	1070 – 1100
Фосфаты	940 – 1000
Арсенаты	820 – 900
Сульфаты	970 – 1020
Ванадаты	830 – 890
Молибдаты	870 – 880
Силикаты	820 – 1010