

СПЕКТРОСКОПИЯ И ФИЗИКА МИНЕРАЛОВ КАК БАЗОВАЯ НАУКА О СОСТОЯНИИ ВЕЩЕСТВА ЗЕМЛИ: СОСТОЯНИЕ НА СЕГОДНЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ НА ЗАВТРА

Вотяков С.Л.

Институт геологии и геохимии УрО РАН, Екатеринбург, votyakov@igg.uran.ru

Физика минералов – комплексное экспериментальное и теоретическое исследование реальной дефектной структуры и свойств минералов (природных, синтетических, техно-, антропо- и биогенных) с использованием, в первую очередь, спектроскопических методик и модельных расчетных подходов, развитых в физике твердого тела. Предмет исследования – структурное и валентное состояние примесных и матричных ионов в решетке, наноразмерные кластеры, нарушения структуры – собственные вакансионные дефекты и др. Цель – получение новой фундаментальной информации об упорядочении, микроструктуре и кристаллохимии минерала как основы для геологических, биоэкологических и других смежных дисциплин. Методы исследования – мессбауэровская, радиочастотная, оптическая, люминесцентная, инфракрасная, рамановская и другие виды спектроскопии твердого тела, теоретическое моделирование атомной и электронной структуры и дефектов минералов, в том числе синтетических аналогов и образцов, подвергнутых лабораторным воздействиям (облучениям, отжигам и др.), моделирующим различные природные и техногенные процессы. В докладе выделяется и обсуждается три основных этапа развития физики (спектроскопии) минералов.

Начальный этап формирования (70-90 гг. XX века, «классические» результаты), решаемые задачи. Накопление первичных данных – экспериментальное исследование изоморфизма примесей и дефектообразования в различных классах минералов. Интерпретация природы оптических свойств минералов – окраски и люминесценции. Обоснование моделей различных нарушений структуры (примесных ионов, дислокаций, вакансий и др.). Исследование кристаллохимического состояния ионов элементов переходных 3-d и 4-f-групп; анализ ростовых примесных и радиационно-стимулированных дефектов структуры минералов, механизмов их образования, эволюции и рекомбинации, кинетических и температурных эффектов перезарядки электронно-дырочных дефектов; исследование метастабильных состояний ионов и ион-радикалов (в СССР зарегистрировано открытие, фиксирующее их широкую распространенность в минералах). Экспериментальные исследования и моделирование физико-химических процессов роста минералов; материаловедческие приложения – облагораживание, синтез аналогов минералов и новых материалов.

Геологический мониторинг и картирование по спектроскопии минералов; спектроскопический типоморфизм и геологические приложения физики минералов – «физика минералов и проблемы петрогенезиса». При этом в докладе отмечается, что на начальном этапе физика минералов как дисциплина формировалась преимущественно на изучении музейных образцов; результаты исследований по генетической физике минералов носили поисковый, часто спорный и даже ограниченный характер; неких единых законов установлено не было, а выявленные закономерности носили достаточно частный характер. В 70-90 гг. физика (спектроскопия) минералов оформилась в самостоятельную отрасль знаний в науках о Земле со специализированным международным журналом (*Physics and Chemistry of Minerals*, Springer), серией регулярных совещаний и молодежных школ, в оригинальную специализацию, по которой шла подготовка студентов в университетах. Были опубликованы обобщающие монографии по спектроскопии различных классов минералов – оксидов, силикатов, фосфатов, карбонатов и др.

В России две школы стоят у истоков физики минералов – московская (академик РАН В.С. Урусов, член-корреспондент А.С. Марфунин) и казанская (профессор В.М. Винокуров); на Украине в г. Киеве был организован специализированный Институт геохимии и физики минералов; обширные исследования по физике минералов велись на Урале; в докладе рассматриваются примеры работ, выполненные в 70-90 гг. сотрудниками Института геологии и геохимии, по физике минерала циркона [1] и по прикладной генетической спектроскопии минералов [2].

Второй этап развития физики минералов (90 гг. XX века – начало XXI века), решаемые задачи. Качественный скачок в аналитическом оборудовании и приборах – повышение их

чувствительности и локальности анализа; оформилось новое направление – «микроспектроскопия» (локальная спектроскопия), основанная на данных рамановского лазерного микроскопа, ИК-Фурье микроскопии и др. Продолжение исследований в «духе классической» физики минералов на основе новых разделов спектроскопии, атомной силовой микроскопии, микроспектроскопии, использования синхротронного излучения и др. Изучение физики «наноминералов» – ультрадисперсного состояния минеральных образований, исследование состояния наноразмерного кластера и отдельного иона в минерале; микро- и наноструктура минералов, в том числе локально-неоднородных, эффекты кластеризации. Приложение к минеральным объектам расчетных методов моделирования их электронной и атомной структуры, развитых в физике твердого тела. Обоснование и разработка теоретической кристаллохимии и спектроскопии; разработка моделей электронного строения дефекта и интерпретация его спектров; расчеты состояния химической связи. Расширение круга исследуемых объектов минерального мира в область био-, техно- и антропогенных образований; использование их спектроскопии для экологического (техногенного) картирования и мониторинга. Развитие спектроскопии радиационных дефектов в минералах (стеклах) как основы для ретроспективной дозиметрии, изотопной геохронологии и разработки матриц для захоронения высокоактивных отходов. На рубеже веков вышли из печати многочисленные монографии, обзоры и оригинальные статьи «второго поколения» по спектроскопии различных классов минералов, биоминеральных образований и др., причем их авторы преимущественно зарубежные. В докладе рассматриваются некоторые примеры исследований по спектроскопии минералов, выполненные в эти годы сотрудниками Института геологии и геохимии: по кристаллохимии хромшпинели и окситермобарометрии ультрамафитов складчатых областей [3, 4]; по спектроскопии и радиационным явлениям в минералах-концентраторах радиоактивных элементов как основы для петрогенетических, геохронологических и материаловедческих приложений [5]; по спектроскопии биоминеральных образований как основы для биоэкологических и биомедицинских приложений [6].

Третий этап развития спектроскопии, задачи на будущее. Во многих современных работах по физике минералов при постановке задачи исходным пунктом является петрологическая проблематика; исследователями ставится цель максимально приблизить физику минералов к классическим геологическим дисциплинам, тем самым отойти от физики музейных образцов, очень характерной для работ начального этапа исследований в 60-70 гг. Сегодня стоит задача максимально вовлечь полученные результаты по физике минералов в сферу геологических исследований; выполнить анализ взаимосвязи типа дефекта с условиями кристаллизации и эволюции минерала; выявить общие закономерности, описывающие эволюцию состояния ионов и структурных дефектов в минералах в процессе развития Земли, в геобиологических и техногенных процессах. Полученная информация может составить, а в ряде случаев уже составляет основу для новых петрологических построений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Краснобаев А.А., Вотяков С.Л., Крохалев В.Я. Спектроскопия цирконов: свойства, геологические приложения. М.: Наука, 1988, 150 с.
2. Вотяков С.Л., Краснобаев А.А., Крохалев В.Я. Проблемы прикладной спектроскопии минералов. Екатеринбург: УИФ Наука, 1993. 236 с.
3. Чацухин И.С., Вотяков С.Л., Щапова Ю.В. Кристаллохимия хромшпинели и окситермобарометрия ультрамафитов складчатых областей. Екатеринбург, 2007. 270 с.
4. Вотяков С.Л., Суетин В.П. и др. Локальная неоднородность позиций ионов железа в хромшпинели из уральских массивов ультрамафитов по данным мессбауэровской спектроскопии // Записки РМО. 2009. № 2. С. 124-138.
5. Рыжков М.В., Вотяков С.Л. и др. Электронное строение примесных центров урана в цирконе // Журнал структурной химии. 2008. Т. 49. № 2. С. 215-220.
6. Смирнов Н.Г., Вотяков С.Л. и др. Физико-химические характеристики ископаемых костных остатков млекопитающих и проблема оценки их относительного возраста (термический и масс-спектрометрический анализ, ИК- и радиоспектроскопия, микроскопия). Екатеринбург: «Гощицкий», 2009. Ч. 1. 118 с.; Ч. 2. 81 с.