

Методика расчета суммарной концентрации азота и основных азотных дефектов в микрокристаллах алмаза по ИК-спектрам

Линь Фан ¹, Тарасевич Александр Борисович

Аспирант, магистр

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Использование ИК-спектроскопических данных позволяет по суммарному содержанию азота и соотношению азотных *A*- и *B*-дефектов в кристаллах алмаза оценивать температурный режим в процессе их кристаллизации и при последующем отжиге [1]. Использование этого типоморфного признака в практике проведения геолого-поисковых и разведочных работ предполагает проведение массовых спектроскопических исследований микрокристаллов алмаза размером менее 1 мм, что требует нестандартных подходов при съемке и обработке спектров. Основные проблемы связаны с необходимостью учета толщины образцов, что нереально для разнообразных по форме микрокристаллов, а также с погрешностями, связанными с измерением интенсивности перекрывающихся характеристических полос в ИК-спектрах, что в совокупности является источником значительных ошибок (до 25 %). Предлагаемый способ основан на данных измерения ИК-спектров для 80 микрокристаллов алмаза из двух месторождений Якутской алмазоносной провинции и их обработки по программе Origin 7.0 в следующей последовательности: 1. Расчет отношения $K_s = S_d / S_c$, где S_d - интегральная площадь всех полос, связанных со всеми основными азотными дефектами в интервале $950 - 1450 \text{ см}^{-1}$, а S_c - интегральная площадь полос решеточного поглощения в интервале $1500 - 2700 \text{ см}^{-1}$, являющаяся константой (внутренним стандартом). Значение K_s для каждого кристалла отражает суммарное содержание основных азотных дефектов в относительных единицах. 2. Для вычисления численного значения суммы содержания азота в единицах *at.ppm* устанавливается линейная корреляция ($R = 0.93$) между величиной K_s и суммарным содержанием азота $N(S)$, рассчитанного по стандартной методике [2]. Заметный разброс данных связан в основном с ошибками при измерении интенсивности перекрывающихся *A*- и *B*-полос поглощения. 3. Расчет суммарного содержания азота по функции $N(S) = 33.315 \cdot K_s + 18.61 \text{ at.ppm}$ или графически. 4. Разложение интегрального спектра в интервале $950 - 1450 \text{ см}^{-1}$ на составляющие полосы *A*- и *B*-дефектов. 5. Расчет произведения площади полос поглощения $S(A)$ и $S(B)$ на соответствующие табличные коэффициенты поглощения μ_A или μ_B , их суммирование и нормировка относительно суммарного содержания азота $N(S)$, определенного по $(S_A) \cdot \mu_A + S_B \cdot \mu_B = N(S) = N(A) + N(B)$.

Литература

1. Кононов О.В. и др.(2006) Природа азотных дефектов и методы расчета концентрации азота в микрокристаллах алмаза // Известия секции. наук о Земле РАН. - В.14 С.53-68.
2. Mendelssohn M.J., Milledge H.J (1995) // Geologically significant information from rutile analysis on mid-infrared spectra of diamonds // Intern. Geol. review. – Vol.37.-P .95-110.

¹ Авторы выражают признательность доценту Кононову О.В., доценту Тарасевичу Б.Н., к.г.-м.н. Хачатрян Г.К. за помощь при проведении исследований и подготовку тезисов.