

Резюме на монографичен труд „Структурни дефекти в природни и синтетични кристали“

Автор: Биляна Виргилова Костова

Рецензенти:

проф. Марин Господинов, д.физ.н.

доц. д-р Велин Николов

Редактор: проф. Цветан Георгиев, д.физ.н.

Издателство: Нов български университет

Година: 2014

Страници: 136

ISBN: 9789545358050



Главна особеност на всеки кристал е неговата структура, която се образува под влияние на комбинация от различни вътрешни и външни фактори – химични свойства на изграждащите кристала атоми, отношение на техните радиуси, характер на връзките между тях, температура, налягане и химичен състав на минералообразуващата среда и т. н.. Структурата контролира морфологията, хабитуса и физичните свойства на кристалите.

Кристалите могат да бъдат природни и синтетични. Природните са образувани по време на различните етапи от геоложката еволюция на Земята, в резултат от протичане на екзогенни и ендегенни процеси. Синтетичните кристали се изработват в лабораторни условия. Част от синтетичните кристали имат природни аналози, като създаването им се извършва при условия, които наподобяват геоложките процеси, при който се образуват. Останалите синтетични кристали нямат природен аналог и за тяхното получаване се използват методи за синтез, които са характерни за аналогични природни съединения.

В структурите на природните и синтетичните кристали обикновено се установяват дефекти, които изменят техните свойства. Това определя дългогодишния интерес на учените към изучаването на дефектите. В природата практически не съществуват идеални структури. Обикновено в структурата, както на природните, така и на синтетичните кристали, винаги съществуват някакви нарушения (дефекти).

Дефектите могат да се бъдат два типа:

- сингенетични, образувани по време на растежа на кристала;

- епигенетични, образувани след крайното израстване на кристала.

При природните кристали често се срещат и двата типа дефекти. При синтетичните кристали се проявяват основно сингенетичните дефекти, като те могат да имат случаен и наложен произход. Наложените растежни дефекти се създават целенасочено, с цел промяна на основни свойства на кристалите и съответно промяна на тяхното практическо приложение в желана посока.

Морфологията и физичните свойства на кристалите са техни типоморфни признаци, които се определят от структурата, но те могат и да се изменят под влияние на нейните дефекти. Изследването на сингенетичните дефекти предоставя:

- генетична информация за природните кристали;
- данни за причините, които изменят свойствата на синтетичните кристали (при случайни дефекти), същото така информация за контролирана промяна на свойствата и ново/разширено практическо приложение на синтетичните кристали (при наложени дефекти).

Важна част от изучаването на дефектите е обоснованият избор, както на обекта (кристал и дефект), така и на метода за неговото изследване, с цел получаване на приемливи резултати, чиято интерпретация да доведе до коректни изводи. При изучаване на дефектите в кристали се използват различни методи. Изборът на метод се определя главно от размера на дефекта, като с намаляването му до ниво атом, методите се усложняват, а интерпретацията на получените резултати често е трудна, а понякога и нееднозначна. Всичко това налага създаване на теоретични модели и тяхното сравняване с експерименталните резултати.

В настоящата работа са направени изследвания върху структурни дефекти в някои природни и синтетични кристали и е получена генетична информация за природните кристали и данни за изменението на някои физични свойства на синтетичните кристали. Получените резултати показват важността и коректността на избрания подход.

Чрез изследването на тримерни дефекти в кварц (флуидни включения) от оловно-цинково находище Южна Петровица, Маданско рудно поле, са установени математически функционални зависимости в изменението на солеността и температурата от дълбочината на хидротермалните разтвори, от които е образувано находището. Въз основа на тези зависимости и на изчислените стойности на рН на разтворите са маркирани границите на соленост, температура и рН, при които рудните елементи Рb и Zn имат висока и ниска разтворимост, съответно липса и наличие на промишлено отлагане на рудните минерали галенит и сфалерит. Тези резултати могат да се използват за търсене на продуктивни участъци както на конкретното рудно находище, така и за проучвателни работи при други находища с аналогичен генезис. Съставени са и функционални зависимости, чрез които само от един експериментално измерен параметър могат да се получат данни за друг параметър на хидротермалните разтвори – само чрез измерване на солеността може да се определи температурата на разтворите и обратно; само чрез измерване на солеността могат да се получат данни за концентрацията на Рb и Zn в разтворите и обратно. Такива зависимости позволяват да

се избегнат сложни методи, при които обработката на резултатите е трудоемка, като изследването на химичния състав на флуидни включения чрез LA ICPMS анализ.

Изучаването на дефектите в турмалинови кристали от пегматитовите жили на Витоша, позволява да се определят някои параметри на пегматитовата система, като температура, състав, наличие/отсъствие на подхранване с нова топилка. Установено е, че висока температура на топилката, химичен състав, близък до този на магмата, създава пегматитовата топилка и растежа в затваряща се система, определят кристализация на турмалини с плочест и късопризматичен хабитус, които имат променлив състав – от ферувитов към шерл-дравитов. Такива условия на кристализация водят до субсолидусен разпад и понижаване на локалната симетрия в тези кристали. Обратно – по-ниска температура и по-кисел състав на топилката и импулсно подхранване на пегматитовата система, определят израстването на турмалинови кристали с постоянен ферувитов състав и призматичен до иглест хабитус. Установяването на всеки един хабитусен тип турмалинови кристали показва еволюцията на пегматитовата топилка и условията на кристализация на всички парагенетични на турмалина минерали, без да е необходимо те да бъдат изследвани допълнително. Това определя турмалинът като минерал, чиито особености могат да се използва като петрогенетичен критерий.

Изследвани са структурните дефекти в синтетични кристали от $\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x}\text{F}$, предизвикани от изоморфно заместване на Ca със Sr. Поради малкия размер на дефектите е използван ТЕМ, като за получаване на еднозначна интерпретация на резултатите са сравнявани експериментални и числено моделирани SAED и HRTEM образи. Доказано е съвместно съществуване на две фази в $\text{Cr}_{0.384}$ и $\text{Cr}_{0.678}$, които образуват специфични дефектни области и понижават симетрията на кристалите. Установено е, че този дефект се проявява само при кристалите със стойности на x близки до 0.5. Понижената им симетрия изключва възможността тези кристали да се използват като оптични елементи в ултравиолетовата област (157 nm). Тези изследвания могат да се използват и за аналогични дву-катионни изоморфни системи.

Изследвано е поведението на $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ кристали, легирани с различни p- и d-елементи, в спектралната област 1.5 – 3.2 eV, тъй като тяхното приложение се определя от оптичните им свойства именно в тази област. Установено е, че оптичните свойства на тези кристали се определят от дефектите, възникващи при легирането, а главните параметри, които контролират наблюдаваните ефекти са концентрация, коефициент на разпределение, електроотрицателност, окислително състояние и йонен радиус на изоморфно включвания легиращ йон. Получените резултати позволяват да се определи най-подходящото легиране на $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, при което да се постигне и модифицира оптична прозрачност на кристалите.