

## HALIT Z KŁODAWY: PRÓBA KORELACJI STOPNIA DEFORMACJI STRUKTURY KRystalicznej I WŁAŚCIWOŚCI SPEKTROSKOPOWYCH W ZAKRESIE UV-VIS

### Słowa kluczowe

Kłodawa, halit niebieski, spektroskopia UV-VIS, parametry sieciowe, deformacja struktury krystalicznej, centra barwne

### Streszczenie

Dla monokryształów pochodzących z próbek barwnego halitu pobranych w Kopalni Soli w Kłodawie oraz dla rekrytalizowanej próbki granatowego halitu wykonano, za pomocą dyfraktometru Nonius KappaCCD, pomiary natężeń wiązek ugiętych promieniowania  $\text{MoK}\alpha$ , na podstawie których przeprowadzono pełną analizę strukturalną. Próbki A, B, C stanowiły fragmenty skały o zabarwieniu odpowiednio: granatowym lub ciemnoniebieskim (A), jasnoniebieskim (B) i fioletowym (C). Próbka D stanowiła fragment naturalnego, bezbarwnego halitu. Bezbarwna była również próbka wykrytalizowana w temperaturze pokojowej z roztworu wodnego uzyskanego po rozpuszczeniu granatowego fragmentu próbki A.

Jako miarę stopnia deformacji struktury wzięto pod uwagę obniżenie symetrii względem regularnej grupy przestrzennej  $Fm\bar{3}m$  typowej dla chlorku sodu. Dla monokryształów pochodzących z próbki A stwierdzono głównie symetrię jednoskośną, monokryształy wypreparowane z próbki B były romboedryczne lub rombowe; analizowane fragmenty próbki C miały symetrię trójskośną albo regularną, podczas gdy monokryształy z próbki D i rekrytalizowanego w warunkach laboratoryjnych fragmentu próbki A należały do regularnej grupy przestrzennej  $Fm\bar{3}m$ . Niemal we wszystkich przypadkach obniżonej symetrii można było dokonać transformacji do grupy przestrzennej  $Fm\bar{3}m$ , a uzyskane parametry strukturalne, takie jak czynniki przemieszczeń jonów  $\text{Na}^+$  oraz  $\text{Cl}^-$ , były w przybliżeniu zgodne z otrzymanymi dla czystego  $\text{NaCl}$ . Jednakże taka wymuszona transformacja powodowała zwykle odrzucenie kilku lub kilkunastu obserwowanych refleksów, które nie spełniały kryterium wysoko-symetrycznej grupy przestrzennej.

W celu dokonania korelacji barwy i deformacji struktury halitu poddano analizie widma UV-VIS zarejestrowane dla szeregu preparatów halitu o barwach: granatowej, niebieskiej i fioletowej. Były to zarówno widma refleksyjne jak i widma absorpcyjne w zakresie 200–900 nm otrzymane za pomocą spektrofotometru Shimadzu UV-2101PC wyposażonego w przystawkę ISR 240 do pomiaru widm refleksyjnych. Dodatkowo wykonano widma absorpcyjne na małych powierzchniach (0,16 mm<sup>2</sup>) korzystając ze spektrofotometru „diode array” PC2000 firmy Ocean Optics. Ogólnie widma refleksyjne i absorpcyjne były podobne pod względem położenia i liczby obserwowanych pasm.

Widma UV-VIS zarejestrowane dla granatowych fragmentów próbki typu A posiadały dwa wyraźne maksima absorpcyjne przy 380 oraz 630 nm odpowiadające nakładającym się barwom dopełniającym: odpowiednio żółtozielonej i niebieskiej. Widmo otrzymane dla próbki halitu typu B posiadało charakterystyczny pik absorpcyjny przy długości fali 610 nm, który jest odpowiedzialny za czysto niebieskie zabarwienie próbki. Natomiast pik absorpcyjny obserwowany przy 570 nm był charakterystyczny dla fioletowej próbki typu C.

Na podstawie przeprowadzonych badań i doniesień literaturowych można wysnuć wstępny wniosek, że dla powstania pojedynczych centrów barwnych, a następnie ich trwałych agregatów będących przyczyną niebieskiej lub fioletowej barwy halitu, równocześnie muszą być spełnione co najmniej dwa warunki: istnienie źródła promieniowania X lub  $\gamma$ , którym może być np. reakcja rozpadu izotopu <sup>40</sup>K (zawartość <sup>40</sup>K w żyłach sylwinu towarzyszących halitowi jest szczególnie wysoka) oraz zdeformowanie pokładów halitu (agregaty centrów barwnych wydają się być stabilizowane na defektach struktury krystalicznej obserwowanych w halicie na poziomie atomowym).