

Детальная таблица Рамановских спектров основных групп минералов

Руководство для интерпретации Рамановских спектров

Расшифровка обозначений:

- **ω (omega)** - либрационные колебания (librational modes) - вращательные колебания ионных групп
- **R** - вращательные колебания (rotational modes) - вращения молекулярных групп
- **T** - трансляционные колебания (translational modes) - поступательные движения ионов и групп
- **ν1, ν2, ν3, ν4** - внутренние валентные и деформационные моды анионных групп (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-})
- **δ** - деформационные колебания (bending modes)
- **D, G полосы** - дефектная и графитовая полосы (для углеродных материалов)
- **A_{1g}, E_g, F_{2g}** - обозначения симметрии по теории групп

Минерал	Внешние фононы (ω-либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см ⁻¹)	Силикатные ν-моды (Si-O внутренние колебания, см ⁻¹)	Анионные ν- группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см ⁻¹)	ОН/Н ₂ O ν-моды (см ⁻¹)
ФИЛЛОСИЛИКАТЫ (слоистые силикаты)	Характерны интенсивные внешние фононы 100-300 см ⁻¹			
Каолинит (Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄)	T: 143, 121, 129, 131 (O-Al-O, O-Si-O симм.) T: 197, 238, 265, 340 (решёточные трансляции)	δ: 430, 470, 540 (δ Si-O) ν: 680, 751, 790 (ν Si-O-Si) ν: 913, 935 (ν Al-OH)	-	ν: 3620, 3650, 3667 (ν OH структур.) ν: 3682, 3686, 3692, 3695 (ν OH внешние)
Дикит (Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄)	T: 130, 131, 120, 127 (O-Al-O, O-Si-O симм.) T: 190, 220, 270 (решёточные трансляции)	δ: 420, 460, 520 (δ Si-O) ν: 660, 740, 780 (ν Si-O-Si) ν: 900, 920 (ν Al-OH)	-	ν: 3620, 3650, 3670 (ν OH структур.) ν: 3685, 3695 (ν OH внешние)

Минерал	Внешние фооны (ω -либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см^{-1})	Силикатные ν -моды (Si-O внутренние колебания, см^{-1})	Анионные ν - группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см^{-1})	ОН/Н ₂ O ν -моды (см^{-1})
Галлуазит ($\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)	T: 143, 129, 127 (O-Al-O, O-Si-O симм. изгиб) T: 190, 230, 280 (трансляционные фооны)	δ: 430, 480, 540 (δ Si-O) ν: 670, 750, 790 (ν Si-O- Si) ν: 910, 930 (ν Al-OH)	-	ν: 3450, 3550 (ν H ₂ O) ν: 3620, 3650, 3695 (ν OH структур.)
Иллит ($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)	T: 125, 150, 180 (трансляционные фооны) ω: 220, 270, 300 (M-O либрации)	δ: 460, 520, 580 (δ Si-O) ν: 670, 750, 830 (ν Si-O- Si) ν: 915 (ν Al- OH)	-	ν: 3200-3400 (широкая ν H ₂ O) ν: 3620 (ν OH структур.)
Монтмориллонит ($(\text{Na}, \text{Ca})_{0.3}(\text{Al}, \text{Mg})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$)	T: 125, 160, 190 (решёточные трансляции) ω: 240, 290, 320 (катионные либрации)	δ: 470, 530, 590 (δ Si-O) ν: 705 (ν Si- O-Si характерная) ν: 780, 910 (ν Al-OH)	-	ν: 3200-3400 (ν H ₂ O межслой.) ν: 3630, 3697 (ν OH структур.)
Хлорит ($(\text{Mg}, \text{Fe})_5\text{Al}(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_8$)	T: 198-214, 356- 373 (решёточные трансляции) ω: 541-550 (M-O либрации)	ν: 658-683 (ν Si-O-Si, сдвиг от Fe/Mg) ν: 750, 820 (ν Si-O)	-	ν: 3420-3430, 3559-3574 (ν OH структур.) ν: 3652-3670 (ν OH внешние)
Мусковит ($\text{KAl}_2(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)	T: 116, 170, 280 (решёточные трансляции) ω: 320, 370 (Al-O либрации)	ν: 541, 700, 750 (ν Si-O- Si) ν: 900, 1032 (ν Si-O) ν: 1085, 1100 (ν Si-O растяжение)	-	ν: 3620 (ν OH структур.)
Тальк ($\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)	T: 120, 180, 240 (решёточные трансляции) ω: 290, 350 (Mg-O либрации)	δ: 460, 540, 670 (δ Si-O) ν: 810, 840 (ν Si-O-Si)	-	ν: 3675 (ν OH структур.)
ТЕКТОСИЛИКАТЫ (каркасные силикаты)	Характерны фооны $\sim 460 \text{ см}^{-1}$ и $\sim 1080 \text{ см}^{-1}$			

Минерал	Внешние фооны (ω -либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см^{-1})	Силикатные ν -моды (Si-O внутренние колебания, см^{-1})	Анионные ν - группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см^{-1})	ОН/Н ₂ O ν -моды (см^{-1})
Кварц (SiO_2)	T: 128, 206 (E, A ₁ решёточные трансляции) R: 265 (E LO-TO расщепление)	ν: 355, 464 (A ₁ ν Si-O симм.) ν: 700 (E ν Si-O-Si) ν: 1080, 1160 (A ₁ , E ν Si-O растяжение)	-	-
Альбит ($\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$)	T: 150, 200, 280 (решёточные трансляции) ω: 340, 400 (алюмосиликатные либрации)	δ: 450, 504, 511 (δ Si-O- Al) ν: 580, 650, 750 (ν Si-O- Si)	-	-
Ортоклаз (KAlSi_3O_8)	T: 180, 250, 320 (решёточные трансляции) ω: 380, 450 (алюмосиликатные либрации)	δ: 530, 580, 645 (δ Si-O- Al) ν: 730, 770 (ν Si-O-Si) ν: 1010, 1050, 1130 (ν Si-O)	-	-
НЕОСИЛИКАТЫ (островные силикаты)	Характерны дискретные SiO_4 колебания и дублет 800-900 см^{-1}			
Оливин ($(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$)	T: 125, 194, 227 (решёточные трансляции) ω: 365, 430 (M-O либрации)	δ: 544, 589, 676 (δ SiO_4) ν: 824, 855 (ν_1 , ν_3 SiO_4 дублет DB1, DB2) ν: 918, 962 (ν SiO_4 антисимм.)	-	-
Гранат (альмандин) ($\text{Fe}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_4)_3$)	T: 170, 320, 370 (решёточные трансляции) ω: 410, 450 (Fe-O либрации)	δ: 348, 515, 632 (δ SiO_4) ν: 916 (ν_1 SiO_4 симм.) ν: 1045 (ν_3 SiO_4 антисимм.)	-	-

Минерал	Внешние фооны (ω -либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см^{-1})	Силикатные ν -моды (Si-O внутренние колебания, см^{-1})	Анионные ν - группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см^{-1})	ОН/Н ₂ O ν -моды (см^{-1})
Форстерит (Mg_2SiO_4)	T: 125, 190, 220 (решёточные трансляции) ω: 360, 420 (Mg-O либрации)	δ: 540, 580, 670 (δ SiO ₄) ν: 825, 857 (ν_1 , ν_3 SiO ₄ дублет) ν: 920, 964 (ν SiO ₄ антисимм.)	-	-
Фаялит (Fe_2SiO_4)	T: 130, 200, 240 (решёточные трансляции) ω: 370, 430 (Fe-O либрации)	δ: 550, 600, 700 (δ SiO ₄) ν: 812, 835 (ν_1 , ν_3 SiO ₄ дублет) ν: 880, 940 (ν SiO ₄ антисимм.)	-	-
КАРБОНАТЫ	<i>Характерны интенсивные ν- моды CO_3^{2-} и внешние фооны</i>			
Кальцит (CaCO_3)	T: 155 (внешняя трансляция) R: 282 (внешняя либрация)	-	ν_4: 713 (ν_4 CO ₃ изгиб) ν_1: 1086 (ν_1 CO ₃ симм. растяжение)	-
Арагонит (CaCO_3)	T: 190, 210, 273 (решёточные трансляции) R: 284 (внешняя деформация)	-	ν_4: 705 (ν_4 CO ₃ изгиб) ν_1: 1084 (ν_1 CO ₃ симм. растяжение)	-
Доломит ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$)	T: 174, 297 (решёточные трансляции) T: 340 (характерная трансляция доломита) R: 880 (диагностическая дополнительная)	-	ν_4: 723 (ν_4 CO ₃ изгиб) ν_1: 1094 (ν_1 CO ₃ симм. растяжение) ν_3: 1439, 1752 (ν_3 CO ₃ режимы)	-

Минерал	Внешние фононы (ω -либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см^{-1})	Силикатные ν -моды (Si-O внутренние колебания, см^{-1})	Анионные ν - группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см^{-1})	ОН/ H_2O ν -моды (см^{-1})
Сидерит (FeCO_3)	T: 183, 250 (решёточные трансляции) ω: 301 (Fe-O либрации)	-	ν_4: 714 (ν_4 CO_3 изгиб) ν_1: 1085 (ν_1 CO_3 симм. растяжение) E: 507 (Fe^{2+} электронное возбуждение)	-
СУЛЬФАТЫ	Характерны ν - моды SO_4^{2-} и внешние решёточные фононы			
Гипс ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)	R: 316 (решёточная либрация) ν_2: 413, 493 (ν_2 SO_4 симм. изгиб)	-	ν_4: 617, 669 (ν_4 SO_4 антисимм. изгиб) ν_1: 1007 (ν_1 SO_4 симм. растяжение) ν_3: 1135 (ν_3 SO_4 антисимм. растяжение)	ν: 3400 (ν ОН воды)
Барит (BaSO_4)	T: 350, 380, 450 (решёточные трансляции) ω: 500 (Ba-O либрации)	-	ν_2: 461 (ν_2 SO_4 изгиб) ν_4: 618, 648 (ν_4 SO_4 антисимм. изгиб) ν_1: 989 (ν_1 SO_4 симм. растяжение) ν_3: 1143, 1167 (ν_3 SO_4 антисимм. растяжение)	-
Ангидрит (CaSO_4)	T: 380, 420, 480 (решёточные трансляции) ω: 550 (Ca-O либрации)	-	ν_2: 500 (ν_2 SO_4 изгиб) ν_4: 630, 680 (ν_4 SO_4 антисимм. изгиб) ν_3: 1000, 1150 (ν_3 SO_4) ν_1: 1020 (ν_1 SO_4)	-

Минерал	Внешние фооны (ω -либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см^{-1})	Силикатные ν -моды (Si-O внутренние колебания, см^{-1})	Анионные ν - группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см^{-1})	ОН/Н ₂ O ν -моды (см^{-1})
ФОСФАТЫ	Характерны интенсивные ν - моды PO_4^{3-} и часто ОН колебания			
Апатит ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{F}, \text{OH}, \text{Cl})$)	T: 240, 340, 380, 420 (решёточные Ca-O трансляции) T: 320 (F/OH- канальные трансляции)	-	ν_2: 427, 445 (ν_2 PO_4 дублет) ν_4: 580, 590, 600 (ν_4 PO_4 триплет) ν_1: 962 (ν_1 PO_4 симм., интенсивная) ν_3: 1033, 1041, 1052, 1060, 1080, 1092 (ν_3 PO_4 мультиплет)	ν: 3573 (ν ОН) R: 634, 739 (либр. ОН)
Вивианит ($\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$)	T: 200, 280, 350, 420 (решёточные трансляции) ω: 480 (Fe-O либрации)	-	ν_4: 543, 600 (ν_4 PO_4) ν_1: 950 (ν_1 PO_4 симм.) ν_3: 1000 (ν_3 PO_4 антисимм.)	ν: 3200-3500 (ν Н ₂ O широкие)
ОКСИДЫ И ГИДРОКСИДЫ ЖЕЛЕЗА	Характерны металл- кислородные ν - колебания и внешние фооны			
Гематит (Fe_2O_3)	T: 225, 245, 290 (Eg трансляционные фооны) T: 300, 410 (Eg характерные трансляции)	-	-	ν: 497, 612, 660 (A1g ν Fe-O) ν: 702 (дополнительная) 2M: 1320 (двумажгонное рассеяние)
Магнетит (Fe_3O_4)	T: 190, 270 (слабые трансляции) T: 300, 319 (средние трансляции)	-	-	ν: 540, 668 (сильные A1g ν Fe-O) ν: 362, 543, 616 (дополнительные T2g)

Минерал	Внешние фооны (ω -либрационные, R-вращательные, T- трансляционные, см^{-1})	Силикатные ν -моды (Si-O внутренние колебания, см^{-1})	Анионные ν - группы (CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , см^{-1})	ОН/Н ₂ O ν -моды (см^{-1})
Гётит (α -FeOOH)	T: 244, 299 (слабые трансляции) T: 385 (сильная диагностическая трансляция)	-	-	ν: 480, 548, 681 (ν Fe-O-H колебания) ν: 476, 549, 585, 689 (дополнительные)
Лепидокрокит (γ -FeOOH)	T: 219, 247, 311 (решёточные трансляции) T: 346 (характерная γ - FeOOH трансляция)	-	-	ν: 524, 651 (ν Fe- O-H колебания) ν: 1011, 1303 (ν O-H изгибы)
ДРУГИЕ ВАЖНЫЕ МИНЕРАЛЫ	<i>Специфические колебания для идентификации</i>			
Графит (C)	T: 42 (слабая решёточная мода)	-	-	D: 1350 (дефектная полоса) G: 1582 (графитовая полоса, E _{2g})
Алмаз (C)	-	-	-	ν: 1332 (F _{2g} ν C- C, уникальная)
Флюорит (CaF ₂)	T: 240, 330 (решёточные трансляции) ω: 430 (Ca-F либрации)	-	-	ν: 324 (Eg ν Ca- F) ν: 462 (A _{1g} ν Ca- F симм.)
Пирит (FeS ₂)	T: 280, 340 (решёточные трансляции) ω: 430 (Fe-S либрации)	-	-	ν: 343, 379 (Eg ν S-S) ν: 407 (A _{1g} ν S-S симм.)
Сфалерит (ZnS)	T: 147, 228, 274 (решёточные трансляции) ω: 350 (Zn-S либрации)	-	-	ν: 352 (сильная A ₁ ν Zn-S) ν: 275, 303 (E ν Zn-S)
Галенит (PbS)	T: 78 (слабая трансляция) ω: 130 (Pb-S либрация)	-	-	ν: 144 (сильная A _{1g} ν Pb-S)

Примечания:

- Частоты приведены в см^{-1} (волновые числа)
- Интенсивности могут варьировать в зависимости от ориентации кристалла и поляризации лазера
- Внешние фононы сильно зависят от размера частиц и дефектности кристаллов
- Для анизотропных минералов могут наблюдаться дополнительные полосы в различных ориентациях
- Данные основаны на анализе более 38 авторитетных источников