

## ANÁLISIS DE LA SOLUCIÓN SÓLIDA ARAGONITO-ESTRONCIANITA MEDIANTE ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL (INFRARROJO Y FT-RAMAN)

P. González Martín<sup>(1)</sup>, S. López Andrés<sup>(1)</sup>, L. Fernández Díaz<sup>(1)</sup>, Y. Díaz de Mera<sup>(2)</sup>, F.J. García Navarro<sup>(2)</sup> y J.M. Alía<sup>(2)</sup>

<sup>(1)</sup> Dpto. de Cristalografía y Mineralogía, Fac. Geológicas, Universidad Complutense, Madrid.

<sup>(2)</sup> Dpto. de Química Física, E.U.I.T.A., Universidad de Castilla-La Mancha, Ciudad Real.

El presente trabajo aborda el estudio mediante espectroscopía vibracional (Infrarrojo dispersivo y Raman por transformada de Fourier) de una serie de muestras sintéticas de la solución sólida aragonito-estroncianita. Además de los dos miembros extremos, son analizadas nueve muestras intermedias cuyas composiciones varían de modo uniforme entre  $\text{Ca}_{0,9}\text{Sr}_{0,1}\text{CO}_3$  y  $\text{Ca}_{0,1}\text{Sr}_{0,9}\text{CO}_3$ .

Se realiza un examen detallado de los modos internos del anión carbonato empleando el análisis del perfil de las bandas y el subsecuente ajuste de los distintos componentes. Se evidencia espectroscópicamente la existencia de una auténtica solución sólida, al producirse la incorporación aleatoria del segundo catión generando visibles fenómenos de desorden posicional con el consecuente incremento (hasta casi duplicarse) de la semianchura de ciertas bandas vibracionales.

De particular interés son los resultados obtenidos en los modos doblemente degenerados (tensión y flexión antisimétricas,  $\nu_3$  y  $\nu_4$ ) con la aparición de tres componentes en la banda de tensión en el espectro infrarrojo y otros tres en la banda de flexión del espectro Raman, asignados respectivamente a un sobretono del modo de flexión en posible resonancia de Fermi con el fundamental de tensión y a una escisión Davydov.

El análisis de las bajas frecuencias de los espectros FT-Raman es revelador de una cohesión entre las capas catión/carbonato más débil en el aragonito que en la estroncianita. Además, el detalle de esta región espectral en la estroncianita empleando espectroscopía FT-Raman es reportado por primera vez.