

Упорядочение катионов в кристаллической структуре Ti-богатых везувианов из Алчури, дол. Шигар, Пакистан
Грачева Александра Владимировна

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: sashagav@mail.ru

Минералы группы везувиана являются важными компонентами различных контактных метаморфических пород, связанных с известняками, различными регионально метаморфизованными породами, Fe-, Sn- комплексных руд, связанных со скарнами, а также родингитов. Общая формула минералов группы везувиана может быть представлена в виде: $X_{19}Y_{13}Z_{18}T_{0-5}O_{68}W_{10}$, где X - Ca и другие крупные катионы, заполняют позиции с координационными числами от 7 до 9, Y - катионы, заполняют октаэдры и пятивершинники: Al, Mg, Fe, Ti и т.д., Z - Si в тетраэдрах, T - B, Al в треугольниках и тетраэдрах, W - одно- или двухвалентные анионы O^{2-} , F^{-} , Cl^{-} , OH^{-} B- и F-доминантные представители группы везувиана (вилуит и фторвезувиан, соответственно) редко встречаются в природе. Кристаллохимическое разнообразие везувиана определяется в основном заселением 5-вершинной Y -позиции.

В настоящей работе нами исследована кристаллическая структура высокотитанового везувиана, содержащего 5.85 мас.% TiO_2 (что соответствует 2.2 Ti на независимую часть ячейки). Эмпирическая формула высокотитанового везувиана, рассчитанная на 50 катионов: $Na_{0.885}Ca_{18.11}Mg_{0.63}Fe^{2+}_{0.79}Fe^{3+}_{1.765}Al_{7.99}Ti_{2.21}Si_{17.62}O_{69.92}(OH)_{7.37}F_{1.33}$.

Экспериментальный набор интенсивностей был получен в полной сфере обратного пространства, на дифрактометре Xcalibur Oxford Diffraction с двухкоординатным CCD- детектором. Катионный фрагмент структуры получен был прямыми методами, а итоговая модель уточнена до $R = 3,3 \%$ ($2\theta > 8^\circ$) в анизотропном приближении атомных смещений.

Основные особенности структуры и химического состава высокотитанового везувиана отражены в его кристаллохимической формуле ($Z=2$): $(Ca_{17.2}Na_{0.8}) [Ca^{VII}Ti^V] [Al_{3.4}Fe^{3+}_{0.6}]^{VI} [Al_{4.2}(Fe^{3+}_{1.5}Fe^{2+}_{0.45})Ti_{1.2}Mg_{0.65}]^{VI} [SiO_4]_{10} [Si_2O_7]_4 (OH, O)_2 (OH, F, O)$.

Атомы Ca и Na занимают позиции внутри восьмивершинников $X(1)$, $X(2)$, $X(4)$ и девятивершинника. $X(3)$. Позиции на оси $4 - X4$ и $Y1$, находящиеся на расстоянии 1.164 Å друг от друга, имеют заселенность 50%. Позиция $Y1$ внутри пятивершинника занята атомами Ti. Основание пятивершинника образовано атомами O(6) на расстоянии 2.070 Å до позиции Ti, в вершине полиэдра находится атом O(10) на расстоянии 2.100 Å до атома Ti. Атомы кислорода совместно с атомами фтора занимают позицию O(11). Баланс валентных усилий на этом анионе составляет 1.34 (для O) и 1.0 (в случае F).

Позиция внутри пятивершинника в изученных ранее везувианах обычно заселена Fe, Mn, Cu, Mg, в манганвезувиане эта позиция занята Mn^{3+} . Подобная полуоктаэдрическая координация титана распространена в ряде минералов, например в группе лампрофиллита, шюллерите и др.

Слова благодарности

Благодарю своих научных руководителей, Расцветаеву Р.К. и Аксенова С.М.