

КРИСТАЛЛОХИМИЯ ВЕЗУВИАНА ИЗ СКАРНОВОГО
МЕСТОРОЖДЕНИЯ МОНЕТНАЯ ДАЧА (УРАЛ, РОССИЯ)

**Паниковровский Т.Л. (rotor_vlg@list.ru) Золотарев А.А. мл.
(aazolotarev@gmail.com), Кривовичев С.В., Антонов А.А.**
Санкт-Петербургское отделение. СПбГУ

CRYSTAL CHEMISTRY OF VESUVIANITE FROM THE MONETNAYA
DACHA SKARN DEPOSIT (URALS, RUSSIA)

Panikorovskiy T.L. Zolotarev A.A. jr., Krivovichev S.V., Antonov A.A.
Saint Petersburg branch. SPSU

Минералы группы везувиана – это орто-диортосиликаты с общей схематической формулой: $X_{19}Y_{13}Z_{18}T_{0-5}O_{68}W_{10}$, где в позиции X могут находиться Ca, Na, REE, K, Pb^{2+} , Sb^{3+} , Fe^{2+} , Mn (катионы с координационным числом 7-9); в позиции Y - Al, Mg, Ca, Fe^{2+} , Fe^{3+} , Ti^{4+} , Cr, Mn, Zn, Cu (катионы в октаэдрической координации); Z - Si, Al; T - B; W - OH, F, O.

Везувиан характеризуется доменной структурой и в зависимости от размеров упорядоченных доменов выделяют две структурные формы везувиана — высокосимметричный и низкосимметричный (высокий и низкий). Высокий везувиан является разупорядоченной разновидностью (пр. группа $P4/nnc$), низкий характеризуется упорядочением катионов (пр. группа $P4/n$ и $P4nc$) (Groat et.al. 1992, Allen et.al. 1992). Та или иная пространственная группа будет определяться количеством и размером однородных доменов в каждой конкретной структуре.

Важнейшими факторами, влияющими на упорядочение катионов в структурах везувианов являются химизм среды и температура образования. Для низких везувианов характерны температуры $<300^{\circ}C$, в то время как высокосимметричные разупорядоченные разновидности – кристаллизуются при температурах $400-800^{\circ}C$ (Armbruster et al.2000).

В данной работе представлены данные структурных исследований, данные инфракрасной спектроскопии, микронного анализа образцов везувиана из скарнового месторождения Монетная дача. Кристаллохимическая формула образца:

$Ca_{18}[Ca_{0,8}Fe_{1,2}](Ti_{0,4}Al_{9,4}Mg_{1,7}Fe_{0,5}Mn_{0,2})_{12,2}Si_{18}O_{69}(OH)_9$

Съемка образцов проводилась авторами на дифрактометрах Bruker SMART APEX, оснащенным CCD детектором и STOE IPDS II, оснащенным детектором Image plate. Параметры элементарной ячейки $a = 15.568(1)$, $b = 11.838(1)$ Å, $V = 2869.0(6)$ Å³ определены и уточнены методом наименьших квадратов, поправка на поглощение была введена с учетом формы кристалла. Расшифровка структуры проводилась с помощью программ SHELX (Sheldrick 1997). ИК исследования проводились на Фурье спектрометре Bruker Vertex 70 при комнатной температуре.

Нами были уточнена структура исследуемого везувиана в трех пространственных группах: $P4/nnc$, $P4/n$ и $P4nc$ R-фактор сходимости = 0,071, 0,037 и 0,077 соответственно. Проанализировав структурные данные, выбор был сделан в пользу пространственной группы $P4/n$. Помимо значения R-фактора, такой выбор обоснован большим количеством систематических нарушений при уточнении в более высокосимметричных пространственных группах. Так, например, среди 3242 уникальных рефлексов (на дифрактометре Bruker) с $|F_o| \geq 4\sigma_F$ при уточнении в пространственной группе $P4/nnc$ наблюдалось 981 систематических нарушений (в $P4nc$ – 980). В то время как в пространственной группе $P4/n$ наблюдалось всего 2 систематических нарушения. При исследовании везувианов на дифрактометре STOE количество систематических нарушений для группы $P4/nnc$ было меньше (52), как и меньше общее количество рефлексов с $|F_o| \geq 4\sigma_F$ (1947). На реконструкциях сечений обратного пространства, представленных на рисунке 1, наблюдается наличие рефлексов, запрещенных правилами погасаний для пространственных групп $P4/nnc$ и $P4nc$.

Следует отметить, что спектральные картины низких и высоких везувианов существенно различаются. Для высоких везувианов характерен интенсивный пик 3560 см^{-1} и чуть менее интенсивный пик 3450 см^{-1} с широким плечом в области 3200 см^{-1} . Тогда как у низких везувианов наблюдается более сложная картина (Kurazhkovskaya et.al 2003, Groat 1995) По данным ИК спектров образцы везувианов из месторождения Монетная дача можно отнести к низким структурным разновидностям, что подтверждает данные рентгено-структурного анализа.

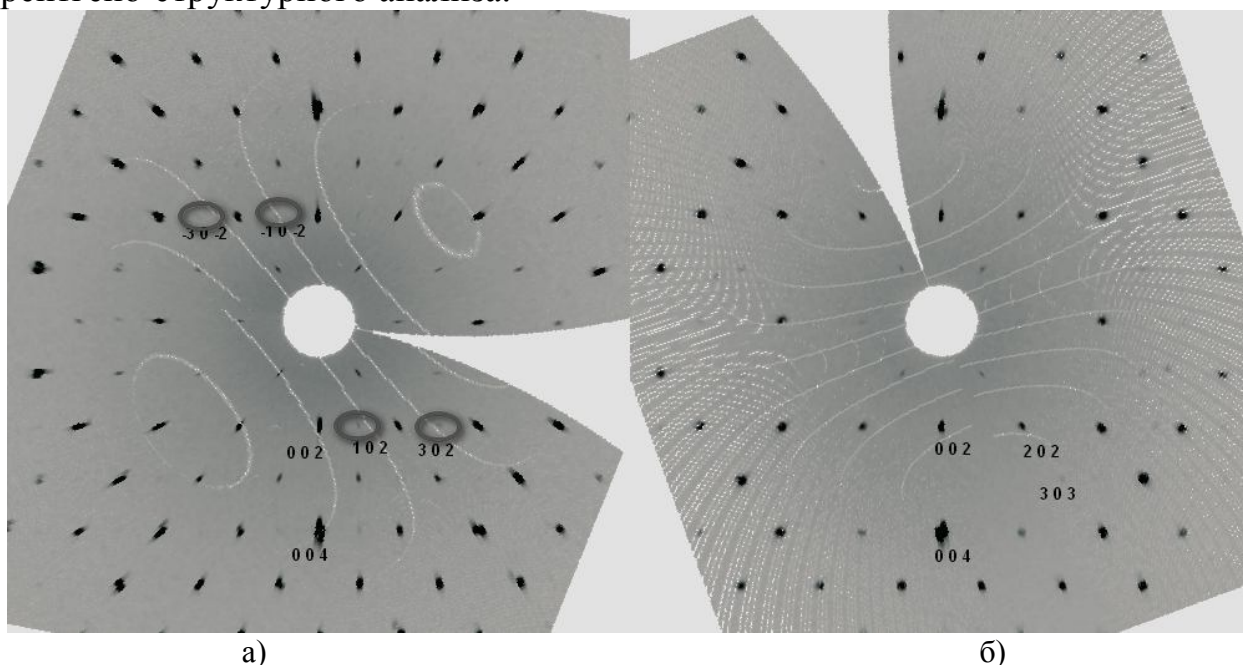


Рис.1. Реконструкция обратного пространства для везувиана из месторождения Монетная дача сечение (010) (а) и образца высокого везувиана из Норвегии (б). Наличие рефлекса (102) и (302) нарушает погасание для плоскости n ($h+l=2n$), тогда как у высокого везувиана эта плоскость присутствует.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта ФЦП «Исследования редких минералов с уникальными свойствами из коллекции

Минералогического музея Санкт-Петербургского государственного университета ММ СПбГУ.

Allen F.M. and Burnham C.W.. A comprehensive structure-model for vesuvianite: symmetry variations and crystal growth // *Can. Mineral.*, Vol. 30, 1992, p. 1-18.

Armbruster T. and Gnos E. $P4/n$ and $P4nc$ long-range ordering in low-temperature vesuvianites // *Amer. Mineral.*, Vol. 85, 2000, p. 563–569.

Groat L.A., Hawthorne F.C., Ercit T.S. The role of fluorine vesuvianite: a crystal-structure study // *Can. Mineral.*, Vol. 30, 1992, p. 1065-1075.

Groat L.A., Hawthorn F.C., Rossman G.R., Scott T.E. The infrared spectroscopy of vesuvianite in the OH region // *Can. Mineral.* Vol. 33, 1995, p 609-626.

Kurazhkovskaya V.S., Borovikova E.Ya., Dorokhova G.I., Kononov O.V., Stefanovich S.Yu. IR spectra of high-symmetric and low symmetric vesuvianites. *Proc. RMS*, N 1, 2003 p 109-121.

Sheldrick G.M. SHELXL-97, Program for the refinement of crystal structures. Universität Göttingen, Germany, 1997.