

МИКРОДВОЙНИКОВАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ
СТРУКТУРЫ ЩЕЛОЧНОГО ЛИТИЕВОГО АМФИБОЛА
НЕОБЫЧНОГО СОСТАВА

Аксенов С.М.¹ (aks.crys@gmail.com), Расцветаева Р.К.¹,
Мирошкина А.Е.¹, Коноваленко С.И.², Ананьев С.А.³, Чуканов Н.В.⁴
¹ Московское отделение. ИК РАН. ² Томское отделение. ТПУ.
³ Красноярское отделение. СФУ. ⁴ Московское отделение. ИПХФ РАН.

MICROTWINNING AND CRYSTAL STRUCTURE FEATURES OF THE
ALKALINE LITHIUM AMPHIBOLE WITH UNUSUAL COMPOSITION

Aksenov S.M.¹ (aks.crys@gmail.com), Rastsvetaeva R.K.¹, Miroshkina A.E.¹,
Konovalenko S.I.², Ananyev S.A.³, Chukanov N.V.⁴
¹ Moscow branch. IC RAS. ² Tomsk branch. TSU. ³ Krasnoyarsk branch. SFU.
⁴ Moscow branch. IPCP RAS.

Амфиболы являются важными породообразующими минералами с общей формулой $A_1B_2C_5[T_4O_{11}]_2W_2$, где $A = K, Na$; $B = Ca, Na, Mg, Fe^{2+}, Mn, Li$; $C = Mg, Fe^{3+}, Fe^{2+}, Al, Mn, Li, Ti, (Cr, V, Ni)$; $T = Si, Al, (Ti)$ и $W = OH, O, Cl, F$ (Hawthorne et al., 2012). Структурный тип амфиболов характеризуется бесконечными вдоль кратчайшего периода $\sim 5.3 \text{ \AA}$ амфиболовыми лентами T -тетраэдров, между которыми зажаты стержни из реберно связанных C -октаэдров, совместно формирующие трехслойные TOT -блоки. С двух сторон октаэдрической ленты располагаются B -катионы. Через вершины тетраэдров амфиболовых лент блоки объединяются в трехмерную постройку, в каналах которой располагаются A -катионы.

Среди литиевых минералов супергруппы амфиболов выделяется подгруппа педрисита, которая определяется следующим условием: $^A(Na+K+2Ca) > 0.5$ атома; $^C Li > 0.5$ атома. К настоящему моменту в подгруппе утверждены четыре минеральных вида и составы еще четырех теоретически предсказаны (Hawthorne et al., 2012). Методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа нами изучен потенциально новый представитель подгруппы с эмпирической формулой ($Z = 2$): $(Na_{0.55}K_{0.02}) (Li_{1.85}Na_{0.11}Ca_{0.04}) (Al_{1.86}Fe^{2+}_{1.02}Mg_{0.9}Li_{0.67}Fe^{3+}_{0.44}Mn_{0.07}) [Si_{7.73}Al_{0.27}O_{22}] (OH)_{1.35}F_{0.65}$. Соотношение $Fe^{2+} / Fe^{3+} = 0.687 / 0.313$ установлено по данным ЯГР. С учетом преобладания Fe^{2+} над Mg изученный минерал следует рассматривать как *ферро-педрисит* (Hawthorne et al., 2012).

Минерал найден в Сутлугском проявлении, которое входит в субширотный Южно-Сангиленский пегматитовый пояс. Пегматиты пояса представлены главным образом сподуменовым типом. Литиевый амфибол Сутлугского проявления развивается вдоль контакта крупных прожилков, присутствуя как в эндо-, так и в экзоконтакте, однако более свойственен экзоконтакту, где он иногда образует мономинеральные участки и жилки. Минерал формирует агрегат хаотично ориентированных тонкоигльчатых или призматических кристаллов размером от 0.1 до 5 см по удлинению.

Параметры моноклинной ячейки: $a = 9.3716(4)$, $b = 17.649(1)$, $c = 5.2800(6)$ Å, $\beta = 102.22(1)^\circ$. Первоначально структура была решена в рамках пр. гр. $P2/m$, т.к. экспериментальный набор интенсивностей содержал значительное число (~10%) неслабых отражений, нарушающих C -решетку. Однако, высокое значение $R_{\text{int}} \sim 12.5$ и итогового R -фактора $\sim 9\%$ указывало на наличие в структуре двойникования. Анализ сечения обратного пространства плоскостью $h0l$ позволил установить, что в нашем образце присутствует двойникование по псевдомероэдрии с матрицей двоникования $[-1\ 0\ 0 / 0\ -1\ 0 / -0.75\ 0\ 1]$. В результате, структура решена методом “charge flipping” и уточнена в рамках пр. гр. $C2/m$ до итогового $R = 3.9$ в анизотропном приближении с использованием $4843I > 2\sigma(I)$. Компоненты двойника составили $0.681(3) / 0.319(3)$.

Основываясь на данных химического состава и межатомных расстояниях установлено, что позиция $M1$ ($\langle M1-O \rangle = 2.095$ Å) заполнена Fe (1.03 атома) и Mg (0.9 атома) с небольшой примесью Mn (0.07 атома). В наименьшей $M2$ -позиции доминирует алюминий со средним расстоянием 1.924 Å, недостаток которого компенсируется железом (0.14 атома). Самая крупная $M3$ -позиция ($\langle M3-O \rangle = 2.115$ Å) заполнена Li (0.67 атома) и Fe (0.33 атома). Исходя из кристаллохимических критериев, можно заключить, что в позиции $M2$ находится Fe^{3+} , а в $M3$ – Fe^{2+} , в то время как в позиции $M1$ железо присутствует в двух степенях окисления.

Октаэдрическая лента с двух сторон обрамлена литием, который образует крупные искаженные шестивершинники с расстоянием $\langle B-O \rangle = 2.271$ Å. Недостаток лития компенсируется за счет натрия (0.11 атома) и кальция (0.04 атома). A -позиция заселена преимущественно атомами натрия (0.55 атома) с небольшой примесью калия (0.02 атома).

Структура изученного *ферро-педрисита* в целом аналогична другим минералам группы амфибола, а основные особенности отражены в его кристаллохимической формуле ($Z = 2$): ${}^A(\text{Na}_{0.55}\text{K}_{0.02})$ ${}^B(\text{Li}_{1.85}\text{Na}_{0.11}\text{Ca}_{0.04})$ ${}^C[{}^{M1}(\text{Fe}_{1.03}\text{Mg}_{0.9}\text{Mn}_{0.07})$ ${}^{M2}(\text{Al}_{1.86}\text{Fe}_{0.14})$ ${}^{M3}(\text{Li}_{0.67}\text{Fe}_{0.33})]$ ${}^T[\text{Si}_{7.73}\text{Al}_{0.27}\text{O}_{22}]$ ${}^W[(\text{OH})_{1.35}\text{F}_{0.65}]$.

Таким образом, методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа изучена кристаллическая структура *ферро-педрисита* – потенциально нового минерала подгруппы педрисита, отличающегося от ранее установленных суммарным преобладанием Fe^{2+} над Mg. Установлено наличие микродвойникования в структуре осью второго порядка вдоль $[100]$, которое приводит к формальному понижению симметрии до пр. гр. $P2/m$. Учет двойникования позволил получить модель в рамках истинной пр. гр. $C2/m$ и распределить катионы по ее структурным позициям.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 14-05-31150 мол_а) и Совета при Президенте РФ по грантам и финансовой поддержке молодых кандидатов наук (грант МК-4990.2014.5) и ведущих научных школ (грант НШ-2150.2012.5.).

Hawthorne F.C., Oberti R., Harlow G.E., et al. // Amer. Mineral. 2012. V. 97. P. 2031–2048.