

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ МИНЕРАЛОВ ИЗОМЕРТИИТА,
Pd₁₁Sb₂As₂, И ТОРНРУСИТА, Pd₁₁As₂Te₂

**Каримова О.В.¹ (oksa@igem.ru), Гроховская Т.Л.¹ (tlg@igem.ru),
Золотарев А.А. мл.² (aazolotarev@gmail.com), Гуржий В.В.²
(vladgeo17@mail.ru)**

¹ Московское отделение. ИГЕМ РАН;

² Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

ISOMERTIEITE, Pd₁₁Sb₂As₂, AND TÖRNROOSITE, Pd₁₁As₂Te₂, - CRYSTAL
STRUCTURE REFINEMENT

Karimova O.V.¹, Grokhovskaya T.L.¹, Zolotarev A.A. jr.², Gurzhiy V.V.²

¹ Moscow branch. Institute of Geology of Ore Deposits RAS;

² Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

Изучены кристаллические структуры минералов изомертиита, Pd₁₁Sb₂As₂ (I) (месторождение Мончетундра, Мончегорский комплекс, Кольский п-ов, Россия), и торнрусита, Pd₁₁As₂(Te_{1.7}Bi_{0.3})_{Σ2} (IIa) и Pd₁₁As₂(Te_{1.3}Bi_{0.7})_{Σ2} (IIb) (месторождение Южная Сопча, Мончегорский комплекс, Кольский п-ов, Россия).

Первая модель кристаллической структуры изомертиита опубликована в 1978 г. (Shi et.al.), и имеет достаточно высокий R-фактор – 15%. Полученная структурная формула минерала: Pd₅AsSb. L. Cabri (1981) предложил изменить формулу – Pd₁₁As₂Sb₂, - основываясь на данных химического анализа изомертиитов из разных месторождений и кристаллохимических расчетах. В настоящей работе проведено уточнение кристаллической структуры изомертиита, и подтверждена кристаллохимическая формула минерала – Pd₁₁As₂Sb₂.

Минерал торнрусит был открыт в 2011 (Kojonen et.al.) Кристаллическая структура торнрусита исследуется впервые.

Показано, что минералы изомертиит и торнрусит являются изоструктурными соединениями. Структура кубической сингонии, пр. гр. Fd-3m, Z=8, параметр элементарной ячейки для (I): a=12.297(5) Å, V=1859.3(2) Å³; для (IIa): a=12.350(2) Å, V=1883.6(4) Å³, и для (IIb): a=12.370(1) Å, V=1892.9(3) Å³.

Для рентгеноструктурных исследований были выбраны: кристалл изомертиита (I) и два кристалла торнрусита (IIa, IIb) с различным содержанием Bi. Экспериментальный набор интенсивностей получен на монокристалльном дифрактометре Bruker Карра APEX II DUO, оснащенный CCD детектором и микрофокусной трубкой (λMo_{Kα}-излучение). Структуры изомертиита и торнрусита решены прямыми методами и уточнены до значений R-факторов 0.056 (I), 0.014 (IIa), 0.018 (IIb). Установлен характер распределения изоморфных примесей по позициям в структуре: Cu и Ni – в

изомертиите, и Вi – в торнрусите. Показано, что замещение Вi→Те в торнрусите не влияет на общую топологию структуры.

В кристаллической структуре изомертиита и торнрусита содержится три кристаллографически независимые позиции Pd: M1, M2 и M3. Заселенность M-позиций в структуре изомертиита: M1= $\text{Pd}_{0.59}\text{Ni}_{0.41}$, M2= $\text{Pd}_{0.91}\text{Cu}_{0.09}$, M3= $\text{Pd}_{0.86}\text{Cu}_{0.14}$. В структуре торнрусита позиции M1, M2 и M3 полностью заселены атомами Pd, а заселенность позиции M4 составляет: $\text{Te}_{0.87}\text{Vi}_{0.13}$ (IIa) и $\text{Te}_{0.67}\text{Vi}_{0.33}$ (IIb).

Атомы Pd в позициях M1 и M2 координируются атомами As и Sb (I), или As и Te (II) с образованием тетраэдров: M1As₄, M2As₂Sb₂ (I) или M2As₂Te₂ (II). Атомы в позиции M3 координированы тремя атомами Sb (I) или Te (II) с образованием зонтичной координации: M3Sb₃ (I) или M3Te₃ (II).

Тетраэдры M1As₄ и M2As₂Sb₂ (I) или M2As₂Te₂ (II) объединяются друг с другом через общие ребра в трехмерный каркас в структуре изомертиита и торнрусита. Полиэдры M3 образуют кластеры из четырех соединенных общими ребрами треугольников. Кластеры [M3Sb₃]₄ или [M3Te₃]₄ присоединяются через общие ребра к тетраэдрам M1 и M2, образуя трехмерную каркасную постройку из полиэдров разного типа.

Экспериментальные данные получены в Центре Дифракционных Исследований Санкт-Петербургского Университета. Работа выполнена в рамках Программы Фундаментальных Исследований Российской Академии Наук (IGEM RAS №72-3).

Cabri, L.J. (1981): The platinum-group minerals. In The Platinum Group Elements: Mineralogy, Geology, Recovery (L. J. Cabri, ed.) *Canadian Institute of Mining Metallurgy, Spec. Vol. 23*, 83-150.

Kojonen, K. K., McDonald, A. M., Stanley, C. J., Johanson, B. (2011): Törnroosite, Pd₁₁As₂Te₂, a new mineral species related to isomertieite from Miessijoki, Finnish Lapland, Finland. *The Canadian Mineralogist*. 49, 1643-1651.

Shi, N., Ma, Z., Zhang, N., Ding, X. (1978): Crystal structure of isomertieite (fengluanite). *Kexue Tongbao*. 23, 499-50.