

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПРИРОДНОГО ТАУСОНИТА

Панкова Ю.А.¹ (yulika1314@gmail.com), Попова Е.А.¹, Кривовичев С.В.¹,
Яковенчук В.Н.²

¹ Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет;

² Кольское отделение. Геологический институт КНЦ РАН

CRYSTAL STRUCTURE OF NATURAL TAUSONITE

Pankova Y.A.¹, Popova E.A.¹, Krivovichev S.V.¹, Yakovenchuk V.N.²

¹ Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University;

² Kola branch. Geological Institute Kola SC RAS

Минерал таусонит с идеальной формулой SrTiO_3 – представитель обширного семейства природных и синтетических соединений со структурным типом перовскита и общей формулой ABX_3 . Структура таусонита представляет собой трехмерный каркас из октаэдров TiO_6 , в пустотах которого располагаются крупные катионы Sr. Состав кристаллов таусонита варьирует от очень близких к чистому таусониту SrTiO_3 , до твердых растворов таусонита и лопарита, которые характеризуются содержанием значительного количества Na и REE.

Первооткрыватели таусонита Воробьев и др. (1984) обнаружили, что его порошковая рентгенограмма ($a = 3.9048 \text{ \AA}$) полностью совпадает с рентгенограммой синтетического соединения SrTiO_3 ($a = 3.905 \text{ \AA}$), и что по аналогии минерал должен иметь пространственную группу $Pm\bar{3}m$. В работах (Mitchell et al., 2000; Yamanaka et al., 2002) проводились структурные исследования синтетических соединений изоморфных рядов таусонит-лопарит $(\text{Sr}_{1-2x}\text{Na}_x\text{La}_x)(\text{TiO}_3)$ и перовскит-таусонит $(\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x)(\text{TiO}_3)$; было обнаружено, что с увеличением количества ионов Na, La или Ca в позиции A происходит понижение симметрии соединения с кубической $Pm\bar{3}m$ до тетрагональной $I4/mcm$.

Нами впервые была изучена кристаллическая структура природного таусонита при помощи метода монокристалльного рентгеноструктурного анализа. Объектом исследования был монокристалл таусонита (Таусонитовая горка, Мурунский массив, республика Саха, Россия).

Химический анализ природного таусонита проведен с помощью электронного микроскопа CamScan MX2500S, оборудованного системой INCA Energy 200 с энергодисперсионным спектрометром фирмы Oxford Instruments (РЦ СПбГУ «Геомодель»). Кристаллическая структура таусонита была изучена с помощью монокристалльного дифрактометра Bruker «SMART APEX» (РЦ СПбГУ «Рентгендифракционные методы исследования»).

На основании результатов химического анализа природного таусонита и рентгеноструктурного анализа была получена следующая

кристаллохимическая формула исследуемого соединения: $(\text{Sr}_{0.57}\text{Ca}_{0.14}\text{Na}_{0.13}\text{Ce}_{0.11}\text{La}_{0.05})\text{TiO}_3$. Результаты рентгеноструктурных исследований природного таусонита приведены в табл. 1. Кристаллическая структура исследуемого образца относится к тетрагональной сингонии (пр.гр. $I4/mcm$), а не к кубической (пр.гр. $Pm\bar{3}m$), к которой принято относить природный таусонит. Понижение симметрии обусловлено качанием октаэдров TiO_6 в противофазе относительно оси четвертого порядка L_4 . Полученные данные находятся в согласии с данными Митчелла и др. (2000) и Яманаки и др. (2002) для синтетических соединений с похожим распределением катионов а позиции A (табл. 1, 2).

Таблица 1

Структурные данные, параметры рентгеновского эксперимента и уточнения структуры таусонита в сравнении с ранее полученными данными для синтетических аналогов

Образец		Наши данные	Mitchell et al., 2000	Yamanaka et al., 2002
Пр. гр., Z		$I4/mcm$, 4	$I4/mcm$, 4	$I4/mcm$, 4
$a = b$, Å		5.5225(8)	5.5073(2)	5.473(6)
c , Å		7.801(1)	7.8018(5)	7.742(9)
V , Å ³		237.93(6)	236.63	231.9
T , К		296	296	296
R/ wR		0.030/0.082	0.046	0.032
Goof		0.953	-	-
A^*	x	0.5	0	0
	y	0	0.5	0.5
	z	0.25	0.25	0.25
	$U_{eq}(B)$	0.0080(1)	-	0.42(4)
B^{**}	x	0	0	0
	y	0	0	0
	z	0	0	0
	$U_{eq}(B)$	0.0061(1)	-	0.52(5)
O1	x	0	0	0
	y	0	0	0
	z	0.25	0.25	0.25
	$U_{eq}(B)$	0.0204(6)	-	1.49(49)
O2	x	0.2599(2)	0.235(2)	0.766(3)
	y	0.2401(2)	0.735(2)	0.266(2)
	z	0	0	0
	$U_{eq}(B)$	0.0194(4)	-	1.32(24)

* A = Sr, Ca, Na, Ce, La

** B = Ti

Таблица 2

Сравнение химического состава и кристаллической структуры таусонита с исследованными ранее синтетическими аналогами

Ссылка	Химическая формула	Пр. группа
Наши данные	$(\text{Sr}_{0.60}\text{Ca}_{0.14}\text{Na}_{0.12}\text{Ce}_{0.10}\text{La}_{0.04})\text{TiO}_3$	$I4/mcm$
Mitchell et al., 2000	$(\text{Sr}_{0.6}\text{Na}_{0.2}\text{La}_{0.2})\text{TiO}_3$	
Yamanaka et al., 2002	$\text{Sr}_{0.65}\text{Ca}_{0.035}\text{TiO}_3$	

Рентгеновские исследования выполнены в РЦ СПбГУ «Рентгendifракционные методы исследования» и РЦ СПбГУ «Геомодель».

Воробьев, Е.И.; Конев, А.А.; Малышонок, Ю.В.; Афонина, Г.Г.; Сапожников, А.Н. (1984) Таусонит SrTiO₃ - новый минерал из группы перовскита, ЗВМО, ч. СХІІІ, вып. 1, с. 86-89.

Mitchell, R.H.; Chakhmouradian, A.R.; Woodward, P.M. (2000) Crystal chemistry of perovskite-type compounds in tausonite-loparite series, (Sr_{1-2x}Na_xLa_x)TiO₃, Physics and Chemistry of Minerals, Germany, vol. 27, p. 583-589.

Yamanaka, T.; Hirai, N.; Komatsu, Y. (2002) Structure change of Ca_{1-x}Sr_xTiO₃ perovskite with composition and pressure, American Mineralogist, vol. 87, p. 1183-1189.