

ОСОБЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КУРЧАТОВИТА И
КЛИНОКУРЧАТОВИТА

**Панкова Ю.А. (y.pankova.spbu@gmail.com)¹, Кривовичев С.В.^{1,2},
Пеков И.В.³**

¹ Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский Государственный Университет. ² Кольское отделение. Геологический институт Кольского научного центра РАН. Апатиты.

³ Московское отделение. Московский университет.

FEATURES OF THE CRYSTAL STRUCTURES OF KURCHATOVITE AND
CLINOKURCHATOVITE

Pankova Yu.A.¹, Krivovichev S.V.^{1,2}, Pekov I.V.³

¹Saint Petersburg branch, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia. ²Kola branch, Geological Institute, Kola Science Centre of RAS. Apatity, Russia. ³Moscow branch. Moscow State University, Moscow, Russia.

Курчатовит, природный борат с формулой $\text{Ca}(\text{Mg}, \text{Mn}, \text{Fe})[\text{B}_2\text{O}_5]$, впервые был описан С.В. Малинко и др. на скарновом месторождении Солонго, Забайкалье (Малинко и др., 1966), а его моноклинный аналог, клинокурчатовит – на месторождении Саяк-IV, Казахстан, в 1983 г. (Малинко, Перцев, 1983). Кристаллическая структура курчатовита была решена О.В. Якубович и др. (1976), а клинокурчатовита – Симоновым и др. (1980). Структуры обоих минералов уточнялись А. Каллегари с соавторами (Callegari et al., 2003). Кристаллические структуры курчатовита и клинокурчатовита образованы тремя типами координационных полиэдров: группами B_2O_5 , образованными двумя боратными треугольниками с общей вершиной, октаэдром MgO_6 , в котором атом Mg может изоморфно замещаться атомами Mn и Fe, а также полиэдром CaO_7 .

Объектами исследования в данной работе стали монокристаллы курчатовита (месторождение Солонго, Забайкалье, Россия) и клинокурчатовита (месторождение Саяк-IV, Казахстан). Кристаллические структуры курчатовита и клинокурчатовита были исследованы при помощи метода монокристалльного рентгеноструктурного анализа (дифрактометр Bruker «SMART APEX»: MoK α - излучение, плоский CCD детектор). Решение и уточнение структур обоих образцов проводилось в пакете программ SHELXL-97. Условия съемки и структурные данные приведены в таблице 1.

Химический состав курчатовита и клинокурчатовита был изучен методом микронзондового анализа. Основываясь на результатах химического анализа и необходимости соблюдения баланса зарядов, а также на результатах были рассчитаны химические формулы исследованных минералов (табл. 2). Расчет проводился на 5 атомов кислорода в формуле. На основании результатов рентгеноструктурного анализа (уточнение заселенности позиций) были записаны химические формулы курчатовита и клинокурчатовита (табл. 2). Данные

химического анализа и рентгеноструктурного анализа согласуются между собой в пределах погрешности этих методов.

Результаты кристаллохимического исследования показывают, что, несмотря на то, что курчатовит и клинокурчатовит состоят из блоков одного типа, их следует рассматривать не как политипы, а, скорее, как модулярные структуры, поскольку конфигурации диборатных групп в соседних блоках существенно различаются.

Таблица 1

Структурные данные, параметры рентгеновского эксперимента и уточнения структуры курчатовита (Солонго, Россия) и клинокурчатовита (Саяк-IV, Казахстан)

Соединение		курчатовит	клинокурчатовит
Пространственная группа, Z		<i>Pbca</i> 12	<i>P2₁/c</i> 4
Параметры элементарной ячейки	<i>a</i> , Å	11.1543(5)	12.330(1)
	<i>b</i> , Å	5.5078(2)	11.147(1)
	<i>c</i> , Å	36.357(2)	5.5154(5)
	β , °	90	101.604(1)
<i>V</i> , Å ³		2233.6(2)	742.6(1)
$\theta_{\min} - \theta_{\max}$		1.12° - 36.27°	1.686° - 36.194°
$I > 2\sigma_I / F_{\text{obs}}^{\text{un}} > 4.0\sigma_F$		5260/4240	3425/2480
R/ wR		0.032/0.087	0.035/0.094
GOF		0.794	1.128

Таблица 2

Химические формулы кристаллов курчатовита (Солонго, Россия) и клинокурчатовита (Саяк-IV, Казахстан)

Метод	Химическая формула	
	Курчатовит	Клинокурчатовит
Микрозондовый анализ	Ca _{1.01} (Mg _{0.87} Mn _{0.11} Fe _{0.02})[B _{1.99} O ₅]	Ca _{0.94} (Mg _{0.91} Fe _{0.10} Mn _{0.04})[B _{2.01} O ₅]
Рентгеноструктурный анализ	Ca(Mg _{0.86} Mn _{0.14})[B ₂ O ₅]	Ca(Mg _{0.91} Fe _{0.09})[B ₂ O ₅]

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 17-05-01027. Рентгеноструктурные исследования проводились на оборудовании Ресурсного центра рентген-дифракционных исследований СПбГУ.

Малинко С.В., Лисицын А.Е., Дорофеева К.А., Островская И.В., Шашкин Д.П. Курчатовит, новый минерал // Записки ВМО. 1966. Т. 95. С. 203-209.

Малинко С.В., Перцев Н.Н. Клинокурчатовит - новая структурная модификация Курчатовита // Записки ВМО. 1983. Т. 112. Вып. 4. С. 483-487.

Симонов М.А., Егоров-Тисменко Ю.К., Ямнова М.А., Белоконева Е.Л., Белов Н.В. Кристаллическая структура природного моноклинного курчатовита Ca₂(Mg_{0.86}Fe_{0.14})(Mg_{0.92}Fe_{0.08})[B₂O₅]₂ // Доклады Академии наук СССР. 1980. Т. 228. С. 842-845.

Якубович О.В., Ямнова Н.А., Щедрин Б.М., Смирнов М.А., Белов М.В. Кристаллическая структура Ca, Mg-диортотрибората (пиробората) курчатовита CaMg[B₂O₅] // Доклады Академии наук СССР. 1976. Т. 230. С. 837-840.

Callegari A., Mazzi F., Tadini C. Modular aspects of the crystal structures of kurchatovite and clinokurchatovite // European Journal of Mineralogy. 2003. Vol. 15. P. 277-282.