

Уточнение кристаллической структуры метавивианита

Аксенов Сергей Михайлович

Соискатель

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, лаборатория РМА и СИ,  
Москва, Россия

E-mail: aks.crys@gmail.com

Метавивианит впервые описан как минерал с формулой  $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ . На основе сходства порошкограмм установлена его изоструктурность арсенату симплезититу и диморфность вивианиту [2]. Последующие исследования метавивианита из Керченского месторождения, в том числе рентгеноструктурные [1], показали, что минерал содержит значительные количества  $\text{Fe}^{3+}$  и не диморфен вивианиту. Однако высокое значение  $R$ -фактора ( $13.3\text{Fe}^{2+}_{3-x}\text{Fe}^{3+}_x(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_x \cdot (8-x)\text{H}_2\text{O}$ ) не отражали кристаллохимических особенностей минерала, в частности, распределение  $\text{Fe}^{2+}$  и  $\text{Fe}^{3+}$  по двум независимым позициям структуры.

Нами исследован гомогенный образец метавивианита из пегматита Бо Виста (Бразилия). Химический состав определен методом локального рентгеноспектрального анализа (wt. сочетании с мессбауэровскими данными Минерал триклинный с параметрами ячейки  $a=4.629(1)$ ,  $b=7.989(1)$ ,  $c=9.321(2)$   $\alpha=108.59(2)$ ,  $\beta=97.34(1)$ ,  $\gamma=95.96(1)^\circ$ ,  $V=320.18(11)$   $\text{Å}^3$ . Дифракционный эксперимент получен на дифрактометре Xcalibur Oxford Diffraction с CCD-детектором. Структура решена методом “charge flipping” и уточнена в пр. гр.  $P$  в анизотропном приближении с  $R$ -фактором 6.0  $|F| > 3\sigma_F$ . Кристаллохимическая формула метавивианита ( $Z=1$ ):  $[(\text{Fe}^{2+}_{0.93}\text{Mn}_{0.07}) (\text{H}_2\text{O})_4] [(\text{Fe}^{3+}_{0.81}\text{Fe}^{2+}_{0.11}\text{Mg}_{0.08})_2(\text{H}_2\text{O},\text{OH})_4] [\text{PO}_4]_2$ . Распределение катионов по октаэдрическим позициям сделано на основе соотношения  $\text{Fe}^{2+}:\text{Fe}^{3+}=43:57$ , полученного из мессбауэровских спектров, и с учетом размеров октаэдров

Структурный мотив метавивианита (рис.) в целом соответствует найденному ранее. Его основой служат слои, содержащие пары реберносвязанных октаэдров  $[\text{Fe}^{3+}_2\text{O}_4(\text{H}_2\text{O},\text{OH})_4]$  и одиночные октаэдры состава  $[\text{Fe}^{2+}\text{O}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ . Спаренные Fe2-октаэдры объединяются Р-тетраэдрами в колонки, идущие вдоль короткого направления  $a=4.6197$ ; между которыми находятся дискретные Fe1-октаэдры, связанные с колонками через свободные вершины Р-тетраэдров. Слои объединяются водородными связями молекул воды и OH-групп. Установленное нами распределение  $\text{Fe}^{2+}$  и  $\text{Fe}^{3+}$  компонентов в Fe1- и Fe2-октаэдрах противоположно найденному в структуре керченского образца. Метавивианит с идеализированной формулой  $\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}_2(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  является диморфным по отношению к ферроштрунциту.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 10-05-00092а) и НШ-2883.2012.5.

Литература

1. Dormann, J., Gaspérin, M. and Poullen, J.-F. // Bulletin de Miner. 1982. V. 105. P. 147 – 160
2. Ritz, C., Essene, E.J. and Peacor, D.R. // Amer. Miner. 1974. V. 59. P. 896 – 899.

Иллюстрации

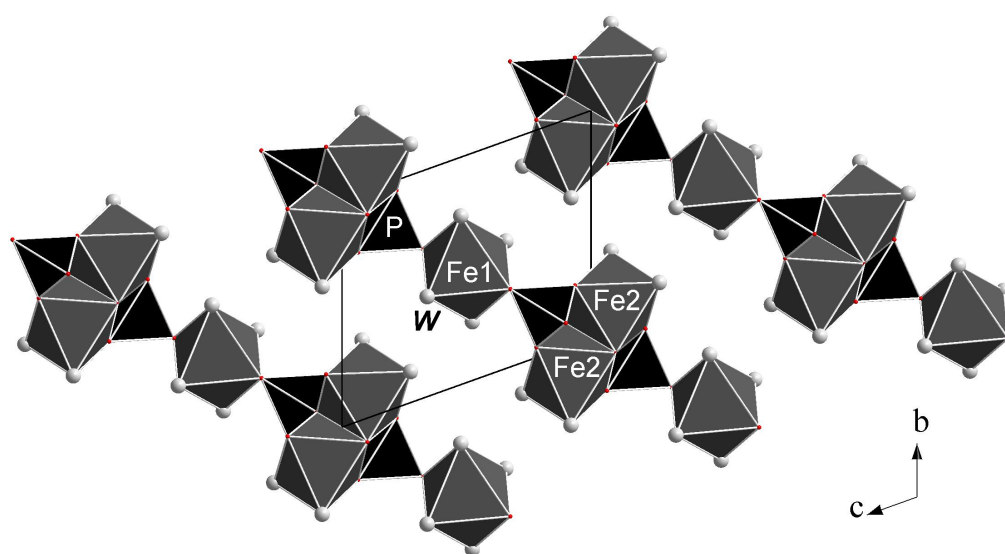


Рис. 1: Структура метавивинита