

**Уточнение кристаллической структуры природного сфенисцидита  
(NH<sub>4</sub>)Fe<sub>3</sub>+2(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(OH)·2H<sub>2</sub>O из Керченского железорудного бассейна**

**Научный руководитель – Аксёнов Сергей Михайлович**

*Вайтиева Юлия Алексеевна*

*Студент (специалист)*

Российский государственный геологоразведочный университет имени Серго

Орджоникидзе, Москва, Россия

*E-mail: yulia.vaitieva@yandex.ru*

Сфенисцидит – природный фосфат трехвалентного железа с формулой (NH<sub>4</sub>)Fe<sup>3+</sup><sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(OH)·2H<sub>2</sub>O, который относится к группе лейкофосфита и является NH<sub>4</sub>-доминантным представителем. Первоначально сфенисцидит был обнаружен в почвенном профиле в районе гнездования пингвинов на острове Элефант (остров Мордвинова), Британская антарктическая территория [3]. Минерал образовался в результате взаимодействия растворов фосфата аммония из гуано пингвинов со слюдистыми и хлоритовыми минералами в почве, а название минерала связано с латинским названием пингвинов – *Sphenisciformes*.

Изученный образец сфенисцидита найден в Керченском железорудном бассейне и характеризуется высоким содержанием калия и алюминия. Эмпирическая формула по данным микронзондового анализа: (NH<sub>4</sub>)<sub>0.55</sub>K<sub>0.41</sub>Ca<sub>0.02</sub>Mg<sub>0.03</sub>Fe<sub>1.20</sub>Al<sub>0.80</sub>P<sub>2</sub>O<sub>8.05</sub>(OH)·H<sub>2</sub>O. Кристаллическая структура изучена методом рентгеноструктурного анализа с использованием монокристалльного дифрактометра Rigaku XtaLAB Synergy-S (HyPix детектор). Параметры моноклинной элементарной ячейки:  $a = 9.8334(5) \text{ \AA}$ ,  $b = 9.6878(5) \text{ \AA}$ ,  $c = 9.7761(5) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 102.702(4)^\circ$ ; пр. гр.  $P2_1/n$ . Модель структуры уточнена до итогового значения  $R_1 = 4.59\%$ ,  $wR_2 = 10.89\%$ ,  $\text{GoF} = 1.11\%$  с использованием  $742I > 3\sigma(I)$ .

Кристаллическая структура сфенисцидита из Керченского бассейна (полуостров Крым) в целом аналогична природным синтетическим аналогам группы лейкофосфита [1,2], а ее основу составляют октаэдрические четырехядерные  $[M_4\phi_{20}]$ -кластеры ( $M = \text{Fe}^{3+}$ ;  $\phi = \text{O}^{2-}, \text{OH}^-, \text{H}_2\text{O}^0$ ). Два  $\text{Fe}2\phi_6$ -октаэдра ( $\langle \text{Fe}2-\phi \rangle = 2.020 \text{ \AA}$ ) имеют общее ребро OH–OH и образуют центральный октаэдрический димер, в то время как дополнительные  $\text{Fe}1\phi_6$ -октаэдры ( $\langle \text{Fe}1-\phi \rangle = 2.008 \text{ \AA}$ ) связаны с димером через общую OH-вершину (рис. 1а). Соседние  $[M_4\phi_{20}]$ -кластеры объединяются с помощью PO<sub>4</sub>-тетраэдров ( $\langle \text{P}-\text{O} \rangle = 1.529 \text{ \AA}$  и  $1.533 \text{ \AA}$ ) с образованием гетерополиэдрического микропористого квазикаркаса (рис. 1б). Крупные полости и широкие каналы заполнены внекаркасными одновалентными катионами, в частности, NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-группой, которая частично замещается катионом K<sup>+</sup>, и, вероятно, незначительным количеством H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>, а также внекаркасной молекулой воды. Уточненная кристаллохимическая формула сфенисцидита такова ( $Z = 4$ ):  $[(\text{NH}_4)_{0.73}\text{K}_{0.27}]\{(\text{Fe}_{1.2}\text{Al}_{0.8})(\text{PO}_4)_2(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})\} \cdot \text{H}_2\text{O}$ , где фигурные скобки обозначают состав гетерополиэдрического квазикаркаса.

### Источники и литература

- 1) Cavellec M., Riou D., Ferey G. Synthetic spheniscidite. Acta Crystallogr. C. 1994. 50:1379–1381.
- 2) Choudhury A., Natarajan S. A synthetic iron phosphate mineral, spheniscidite,  $[\text{NH}_4]^+[\text{Fe}_2(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})(\text{PO}_4)_2]^- \cdot \text{H}_2\text{O}$ , exhibiting reversible dehydration. Proc. Ind. Acad. Sci. 1999. 111:627–637.

- 3) Wilson M.J., Bain D.C. Spheniscidite, a new phosphate mineral from Elephant Island, British Antarctic Territory. Mineral Mag. 1986. 50:291–293.

### Иллюстрации

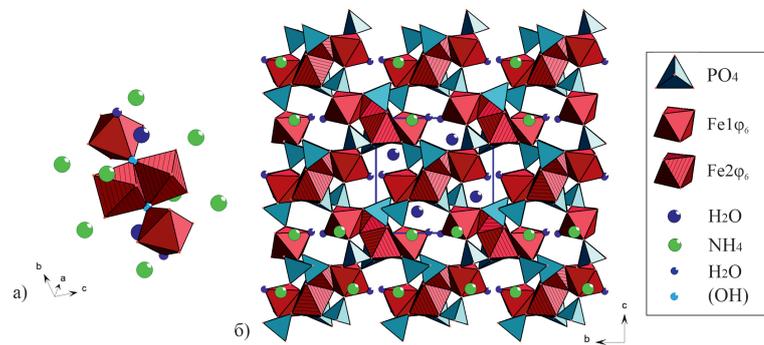


Рис. : Рис. 1. Четырехядерные октаэдрические [M4φ20]-кластеры (а) и гетерополиэдрический микропористый квазикаркас в структуре сфенисцидита (б).