

**Уточнение кристаллической структуры природного сфенисцидита
(NH₄)Fe₃+2(PO₄)₂(OH)·2H₂O 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 (NH₄)Fe³⁺₂(PO₄)₂(OH)·2H₂O, который относится к группе лейкофосфита и является NH₄-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: (NH₄)_{0.55}K_{0.41}Ca_{0.02}Mg_{0.03}Fe_{1.20}Al_{0.80}P₂O_{8.05}(OH)·H₂O. 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 PO₄-тетраэдров ($\langle \text{P}-\text{O} \rangle = 1.529 \text{ \AA}$ и 1.533 \AA) с образованием гетерополиэдрического микропористого квазикаркаса (рис. 1б). Крупные полости и широкие каналы заполнены внекаркасными одновалентными катионами, в частности, NH₄⁺-группой, которая частично замещается катионом K⁺, и, вероятно, незначительным количеством H₃O⁺, 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

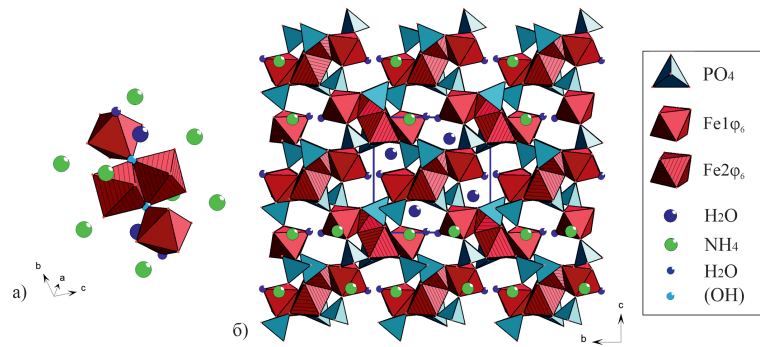


Рис. : Рис. 1. Четырехядерные октаэдрические [M4φ20]-кластеры (а) и гетерополиэдрический микропористый квазикаркас в структуре сфенисцидита (б).