

**Особенности кристаллической структуры гидратированного аналога
науязкита $\text{Na}_2\text{Fe}[\text{Al}_4\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$**

Научный руководитель – Вотьяков Сергей Леонидович

Рянская Анастасия Дмитриевна

Аспирант

Институт геологии и геохимии им. академика А.Н. Заварицкого Уральского отделения
РАН, Екатеринбург, Россия
E-mail: tosenka2008@gmail.com

Кристаллическая структура гидратированного образца науязкита исследована методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа с целью изучения процесса гидратации, оксонизации и аморфизации первичного науязкита. Алумосиликат науязкит распространен в щелочных пегматитах массива Илимауссак (Гренландия) и Ловозера (Кольский полуостров). Исследуемый минерал найден на месторождении Нарсак (Гренландия). Параметры моноклинной ячейки: $a = 14,983(8) \text{ \AA}$, $b = 7,998(4) \text{ \AA}$, $c = 10,403(6) \text{ \AA}$, $\beta = 113,874(8)^\circ$; $V = 1140,0(11) \text{ \AA}^3$. Экспериментальный набор интенсивностей получен при 120 К с использованием монокристалльного дифрактометра Bruker «Smart Apex II Duo» с графитовым монохроматором, $\text{MoK}\alpha$ -излучение ($\lambda = 0,71073 \text{ \AA}$) и CCD-детектором. Дифракционный эксперимент содержал 10441 отражений. В соответствии с анализом систематических погасаний выбрана пространственная группа $C2/m$. Структурная модель определялась методом «charge flipping» с использованием компьютерной программы SUPERFLIP. Уточнение структуры МНК с использованием программного пакета Jana2006 привело к итоговому R-фактору 5.58 для 1246 независимых отражений с $I > 2\sigma(I)$.

Кристаллохимическая формула минерала имеет вид ($Z = 2$): $[(\text{H}_2\text{O}, \text{H}_3\text{O})_4\text{Na}_2][\text{FeAl}_4\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH}, \text{O})_4]$.

Структура исследованного минерала аналогична ранее изученным в науязките [1] и манганонауязките [2]. В ее основе лежат параллельные (001) двоянные тетраэдрические слои состава $[\text{Si}_8(\text{Si}, \text{Al})_{16}\text{O}_{52}]^{-16}$, объединенные дискретными Fe-октаэдрами в ажурный каркас, отрицательный заряд которого компенсируется атомами Na в каналах.

Основной отличительной особенностью исследованного минерала является высокий уровень гидратации по схеме замещения катионов: $4\text{Na}^+ + 2\text{O}^{2-} \leftrightarrow 2(\text{H}_3\text{O})^+ + 2(\text{H}_2\text{O})^0 + 2(\text{OH})^-$. Структурная особенность минерала - присутствие каналов двух типов, занятых $(\text{H}_2\text{O} / \text{H}_3\text{O})$ -молекулами и Na^+ -катионами соответственно.

Локальный баланс валентных усилий подтверждает наличие OH-групп и молекул воды в структуре науязкита. Анализ расстояний донор-акцептор по [3] указывает на наличие сильных, а также частично бифуркированных водородных связей.

Источники и литература

- 1) Халилов А.Д., Джафаров Н.К., Мамедов К.С. Кристаллическая структура науязкита - $\text{Na}_6\{\text{Fe}_2 + [(\text{Si}, \text{Al})_8\text{Si}_4\text{O}_{26}]\}$ // Докл. АН АзССР, 1977. Т. 33 No.7. С. 35-40.
- 2) Хомяков А.П., Нечелостов Н.Н., Феррарис Дж., Ивальди Г. Манганонауязкит $\text{Na}_6(\text{Mn}, \text{Fe})\text{Al}_4\text{Si}_8\text{O}_{26}$ - новый минерал из Ловозерского щелочного массива (Кольский полуостров) // Записки РМО, 2000. Т. 129. No 4. С. 48-53.
- 3) Brown ID, Altermatt D Bond-valence parameters obtained from a systematic analysis of the inorganic crystal structure database // Acta Cryst, 1985. В 41:244-247