

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ИЛЬМАЙОКИТА

Золотарев А.А. мл. (aazolotarev@gmail.com), Кривовичев С.В., Житова Е.С.
Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский Государственный Университет

THE CRYSTAL STRUCTURE OF ILMAJOKITE

Zolotarev A.A. jr., Krivovichev S.V., Zhitova E.S.

Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

Ильмайокит $(\text{Na,Ce,Ba})_{10}\text{Ti}_5\text{Si}_{14}\text{O}_{22}(\text{OH})_{44}\cdot n\text{H}_2\text{O}$ – неустойчивый водный титаносиликат характерного ярко-желтого цвета (Буссен и др., 1972). Ильмайокит — первый новый минерал, описанный в пегматитовой залежи «Юбилейная» г. Карнасурт (Ловозерские тундры, Кольский п-ов) (Пеков, 2001), где он является одним из самых поздних первичных минералов, образуется в богатой натрием среде при определенных условиях и является малоустойчивым минералом (Буссен и др., 1972). Вследствие неустойчивости ильмайокита возникают объективные трудности изучения его различными аналитическими методами, что отражается, например, в определении точного химического состава (особенно в отношении воды) и, как следствие, в написании формулы минерала. По этой же причине затруднено исследование ильмайокита рентген-дифракционными методами, так, ранее были получены только комбинированные порошковые данные на основе которых были вычислены примерные параметры элементарной ячейки: $a \sim 23$, $b \sim 24.4$, $c \sim 37$ Å (Буссен и др., 1972).

В данном докладе впервые представлены структурные данные для ильмайокита. Изученный образец минерала был предоставлен Минералогическим музеем им. А.Е. Ферсмана РАН (№86969). Соотношение катионов, определенное методом электронно-зондового анализа, имеет следующий вид: $(\text{Na}+\text{REE}+\text{Ba}+\text{Ca}+\text{K}):\text{Ti}:\text{Si} = 0.57:0.33:1$, что в целом хорошо согласуется с химическим составом определенным для голотипного образца (Буссен и др., 1972).

Структура ильмайокита была решена и уточнена в пространственной группе $C2/c$ до R -фактора 8.7% (работа по уточнению продолжается). Параметры элементарной ячейки: $a = 35.907(5)$, $b = 27.784(3)$, $c = 33.126(4)$ Å, $\beta = 96.494(3)^\circ$, $V = 32836(7)$ Å³, $Z = 96$.

Основу кристаллической структуры ильмайокита составляет сложный пористый титаносиликатный каркас, в котором кремнекислородные тетраэдры, объединяясь общими вершинами, образуют трехмерную постройку с ранее неизвестной топологией. Октаэдры TiO_6 в каркасе, объединяясь по ребрам, формируют димеры, которые посредством силикатного каркаса связываются в шестиядерные комплексы, в центре которых располагаются редкоземельные катионы. Эти комплексы, в свою очередь, объединяются через

кремнекислородные цепочки в каркас, полости которого заполнены катионами Na^+ , Ba^{2+} и молекулами H_2O .

Кристаллическую структуру ильмайокита можно назвать сверхсложной. Ее информационные параметры сложности (Krivovichev 2013, 2014) даже без учета атомов водорода составляют 7.827 бит/атом и 7106.506 бит/ячейку. Последняя величина превышает количество информации для паулингита (6766.998 бит/ячейку) второго по сложности минерала после юингита (Oldsetal. 2016). Таким образом, ильмайокит – минерал, известный с 1977 года, является вторым по структурной сложности минералом, известным на сегодняшний день.

Данная работа поддержана грантом для ведущих научных школ Совета по грантам Президента РФ НШ-10005.2016.5. Исследования проведены с использованием оборудования РЦ РДМИ и РЦ Геомодель Научного парка СПбГУ.

Krivovichev S.V. Structural complexity of minerals: information storage and processing in the mineral world // Mineral. Mag. 2013.Vol. 77. P. 275-326.

Krivovichev S.V. Which inorganic structures are the most complex? // Angew. Chem. Int. Ed. 2014. Vol. 53. P. 654–661.

Olds T.A., Plášil J., Kampf A.R., Burns P.C., Simonetti A., Sadergaski L.R. Ewingite, IMA 2016-012. CNMNCNewsletterNo. 31, June 2016 // Mineral. Mag. 2016.Vol. 80.P. 691–697.