УДК 549:548

О.А.МУРЗИНСКАЯ, А.В.НЕПОЧАТОВА
Геолого-разведочный факультет, группа МГП-05

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ И СТРУКТУР РЕДКИХ МИНЕРАЛОВ: ЗАВАРИЦКИТ, БЕТЕХТИНИТ, ШАФРАНОВСКИТ

Дана краткая характеристика трех редких минералов: заварицкита (BiOF), шафрановского ($K_2Na_3(Mn, Fe, Na)_4[Si_9(O, OH)_{27}](OH)_2 \cdot nH_2O$, $n \approx 2{,}33$), бетехтинита ($Pb_2(Cu, Fe)_{21}S_{15}$). С использованием программ Shape и Atoms построены компьютерные модели форм кристаллов и их структур. Выявлены основные структурные мотивы, которые могут определять физические свойства изученных минералов.

Brief description of three rare minerals, zavaritskite (BiOF), shafranovskite ($K_2Na_3(Mn, Fe, Na)_4[Si_9(O, OH)_{27}](OH)_2 \cdot nH_2O$, $n \approx 2{,}33$) and betekhtinite ($Pb_2(Cu, Fe)_{21}S_{15}$), are given. Digital models of their crystal forms and structures are simulated with application of the Shape v.7 and Atoms v.5 software packages. Basic structural patterns which may determine physical properties of the studied minerals have been revealed.

Форма кристаллов является одним из важнейших диагностических признаков минерального вида как при полевых, так и при микроскопических исследованиях [1, 11]. Структура кристалла и его форма позволяют предсказывать его физические свойства (например, спайность, анизотропия теплового расширения) и его участие в геологических процессах [2, 7]. Вследствие этого компьютерное моделирование кристаллов и структур востребовано в минералогической практике. Разработка методик моделирования имеет не только научное, но и учебно-методическое значение, так как модели структур и кристаллов являются наглядными учебными пособиями.

Объекты исследования. В рамках настоящей работы изучены редкие минералы, названные в честь выдающихся профессоров Горного института: минералога акад. А.Г.Бетехтина, петрографа акад. А.Н.Заварицкого и кристаллографа проф. И.И.Шафрановского.

Бетехтинит ($Pb_2(Cu,Fe)_{21}S_{15}$). Впервые найден в жилах, секущих медистые сланцы (Мансфельд, Германия) в ассоциации с самородным серебром, борнитом, халькопиритом, галенитом, кальцитом [13]. Минерал относится к подклассу арсеносульфидов меди, принадлежит к ромбической сингонии (пространственная группа *Immm*). Структура описана в [9]. Встречается в виде таблитчатых или удлиненно-призматических и тонкоигольчатых кристаллов серого или черного цвета с бурым оттенком; твердость по Моосу 3; плотность 6,13-6,14 г/см^3; имеет матовый или слабый металлический блеск на гранях и сильный металлический в изломе [4, 6, 10].

Заварицкит (BiOF). Впервые описан Е.И.Доломановой в 1962 г. в образцах месторождения Шерловая гора (Забайкалье) в ассоциации с топазом, флюоритом и висмутином [3]. Относится к классу оксигалоидов и гидроксигалоидов (по Дана), галогенидов (по Штрунцу), группе матлокита. Принадлежит к тетрагональной сингонии (пространственная группа *P4/nmm*). Структура описана в [14]. Образует плотные пленки, корочки и псевдоморфозы по висмутину серого цвета с полуметаллическим или жирным блеском; твердость по Моосу 2-2,5; плотность 7,88-8,34 г/см^3 [3, 5].

Шафрановскит ($K_2Na_3(Mn, Fe, Na)_4 \times [Si_9(O, OH)_{27}](OH)_2 \cdot nH_2O$, $n \approx 2{,}33$). Впервые обнаружен А.П.Хомяковым в 1978 г. в нефелин-сиенитовых пегматитах Хибинского и Ловозерского массивов (Кольский п-ов) [8]. Образует ассоциацию с виллиомитом, натрофосфатом, олимпитом, сидоренкитом,

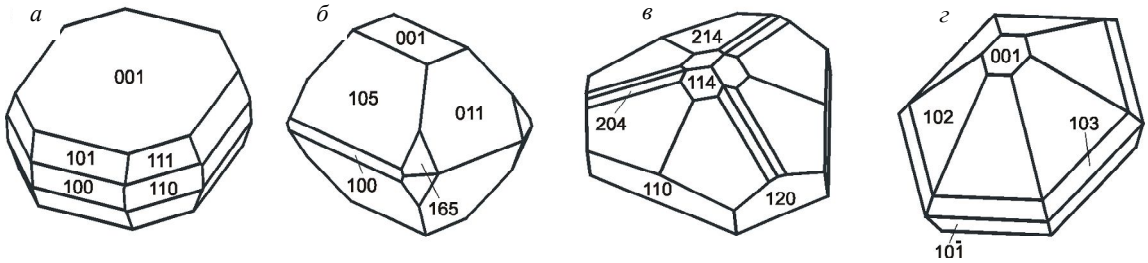


Рис.1. Модели идеальных кристаллов заварицкита (*а*), бетехтинита (*б*), шафрановскита (по аналогии с кронстедтитом – *в*, спанголитом – *г*)

фосинаитом и игольчатым эгирином (гора Расвумчорр), а также с казаковитом, коашвитом (горы Ньюрпахк, Коашкар, Коашва). Относится к слоистым силикатам, принадлежит к тригональной сингонии (пространственная группа $P3_1c$). Структура шафрановскита впервые описана С.В.Кривовичевым в 2004 г. [12]. Образует мономинеральные обособления, сложенные плотным тонкозернистым агрегатом разноориентированных изометричных зерен оливково-зеленого, желтовато-зеленого цвета с сильным стеклянным блеском; твердость по Моосу 2-3; плотность 2,74-2,78 г/см^3 [8, 12].

Методика работы. Модели идеальных кристаллов были построены в программе Shape 7.1.2, использующей в качестве исходных данных вид симметрии и параметры элементарной ячейки, а также символы простых форм. Если кристаллы минерального вида не были описаны, для создания их моделей выбирались наиболее развитые простые формы изоструктурных или близких по структуре минералов. Поиск необходимых данных осуществлялся в опубликованных описаниях кристаллов [4, 12] и базах данных (WebMineral.com, MinDat.org, MinCryst ИЭМ РАН).

Кристаллические структуры минералов построены при помощи программы Atoms 5.1. Использовались структурные данные из базы данных MinCryst ИЭМ РАН. Для наглядного описания основных характеристик структур выбирались подходящие координационные многогранники.

Модели кристаллов. Кристаллы заварицкита не описаны. Уплощенный таблитчатый облик модели идеального кристалла (рис.1, *а*) был выбран по аналогии с описанными кристаллами матлокита (изоструктурен заварицкиту). Природный кристалл бетехтинита был описан Т.А.Яковлевской, поэтому его модель (рис.1, *б*) построена по данным справочника [4]. Шафрановскит не имеет изоструктурных минералов, поэтому в качестве аналогов были использованы два минерала, близких по структуре: слоистый силикат кронстедтит с пространственной группой $P3_1m$ и слоистый сульфат спанголит с пространственной группой шафрановскита $P3_1c$. Полученные модели идеальных кристаллов шафрановскита имеют уплощенный облик, весьма вероятный для слоистого силиката (рис.1, *в*, *г*).

Кристаллические структуры. Кристаллическая структура заварицкита представляет собой плотную упаковку анионов фтора и кислорода: слои атомов кислорода чередуются с двумя слоями атомов фтора, в пустотах которой находятся атомы висмута с координационным числом 9 (рис.2, *а*). Бетехтинит обладает сложной структурой координационного типа, в которой катионы меди занимают восемь, а аниона серы – шесть неэквивалентных позиций. Основу структуры шафрановскита образует трехслойный пакет: слой марганецкислородных октаэдров окружен с двух сторон слоями кремнекислородных тетраэдров (рис.2, *б*). Между пакетами располагаются катионы K^+, Na^+ и молекулы воды. Кристаллическая структура шафрановскита похожа на структуру слюд, но отличается присутствием дополнительных кремнекислородных тетраэдров в межслоевом пространстве.

Таким образом, в результате проведенных исследований собраны подробные справочные данные по минералам, назван-

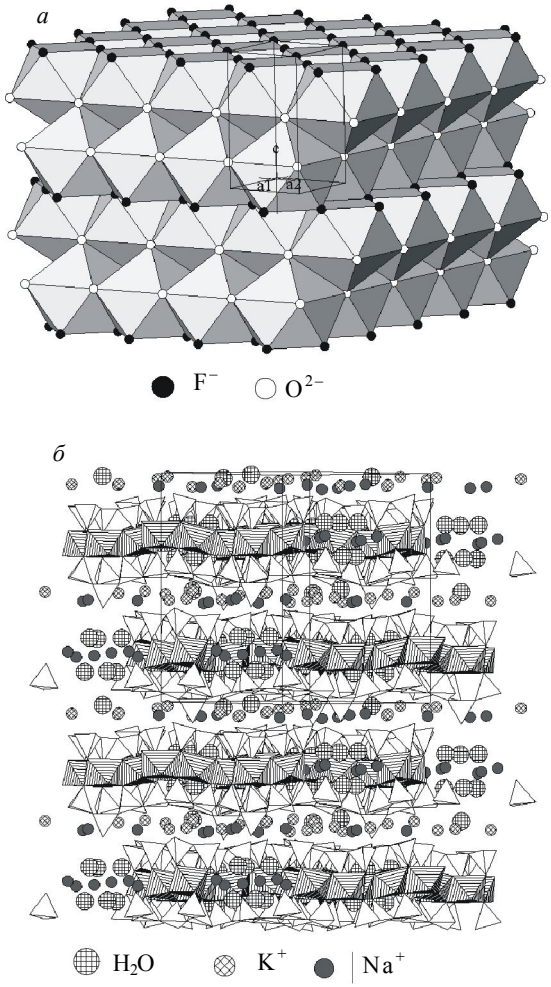


Рис.2. Кристаллические структуры заварицкита (*а*) и шафрановскита (*б*)

ным в честь выдающихся профессоров Горного института, созданы компьютерные модели кристаллов и их структур, предсказана форма кристаллов шафрановскита и заварицкита.

Авторы выражают благодарность за ценные консультации С.В.Кривовичеву (СПбГУ) и научному руководителю М.В.Морозову (СПГГИ) за оказанную помощь в работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Болдырев А.К.* Определитель кристаллов / А.К.Болдырев, В.В.Доливо-Добровольский, И.И.Шафрановский. Л.-М.: ЦНИГРИ, 1937. Т.1. 438 с.

2. *Булах А.Г.* Общая минералогия. СПб: Изд-во СПбГУ, 2002. 356 с.

3. Доломанова Е.И. Заварицкит (BiOF) – новый минерал из группы оксифторидов / Е.И.Доломанова, В.М.Сендерова, М.Т.Янченко // Доклады АН СССР. 1962. Т.146. № 3. С.680-682.

4. Минералы: Справочник. М.: Изд-во АН СССР, 1960. Т.1. 617 с.

5. Минералы: Справочник. М.: Изд-во АН СССР, 1963. Т.2. Вып.1. 296 с.

6. *Сатпаева Т.А.* Бетехтинит в рудах Джезказганского месторождения // Известия АН Каз. ССР. Сер. Геология, 1959. Вып.1. С.95-103.

7. *Филатов С.К.* Высокотемпературная кристаллохимия. Теория, методы и результаты исследований. Л.: Недра, 1990. 288 с.

8. Шафрановскит (Na, K)$_6$(Mn, Fe)$_3$Si$_9$O$_{24}$·6H$_2$O – новый минерал / А.П.Хомяков, З.В.Врублевская, Б.Б.Звягин, Н.А.Матвеева, Г.О.Пилоян // Зап. Всес. минер. общества. 1982. Вып.1. С.475-480.

9. *Domberger-Schiff K.* Die Kristallstruktur des Betechtinit Pb$_2$(Cu, Fe)$_{21}$S$_{15}$ / K.Domberger-Schiff, E.Höhne // Acta Crystallogr. 1959. Vol.12. P.646-651.

10. *Anthony J.W.* Handbook of mineralogy / J.W.Anthony, R.A.Bideaux, K.W.Bladh. Vol.1: Elements, sulfides, sulfosalts. Tucson, Arizona: Mineral Data Publishing. 1990. Vol.8. 588 p.

11. *Kostov I.* Crystal habits of minerals / I.Kostov, R.I.Kostov. Sofia: Pensoft Publ., 1999. 415 p.

12. *Krivovichev S.V.* Synchrotron X-ray diffraction study of the structure of shafranovskite, $K_2Na_3(Mn, Fe, Na)_4[Si_9(O, OH)_{27}](OH)_2 \cdot_n H_2O$, a rare manganese phyllosilicate from the Kola peninsula, Russia / S.V.Krivovichev, V.N.Yakovenchuk, T.Armbruster and others // Am. Mineral., 2004. Vol.89. P.1816-1821.

13. *Fleischer M.* New mineral names // Am. Mineral., 1956. Vol.41. № 3-4. P.371-372.

14. *Wyckoff R.W.G.* Crystal Structures. 1964. Vol.1. P.294-296.

Научный руководитель к.г.-м.н. доц. *М.В.Морозов*