

С. Т. АМПРОВ, М. О. АСРАТКУЛУ, Х. С. МАМЕДОВ, академик Н. В. БЕЛОВ

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ЦЕОЛИТА-ГОННАРДИТА**



Редкий цеолит-гоннардит нами обнаружен в вулканических породах Мартунинского района АзербССР. Как и ранее отмеченные в этом районе цеолиты — патролит и анальцим <sup>(1)</sup> — радиальнолучистые агрегаты кристаллов гоннардита — заполняют гнезда в вулканических породах и, по-видимому, связаны также с постмагматической минерализацией.

Найденные параметры ромбической (псевдотетрагональной) элементарной ячейки согласуются с приведенными в литературе <sup>(2)</sup>:  $a = 13,40$ ,  $b = 13,40$ ,  $c = 6,63 \text{ \AA}$ ;  $Z = 2$  единицы  $\text{Na}_2\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}]_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (при уд. весе  $2,28 \text{ г/см}^3$ ).

На Мо-излучении были сняты развертки нулевой, первой — четвертой слоевых линий вращения вокруг оси  $c$ , а также развертка нулевой слоевой

Таблица 1

Координаты базисных атомов в структуре гоннардита

АТОМЫ	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$B$	АТОМЫ	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$B$
Si <sub>1</sub>	0,309	0,119	0,247	1,0	O <sub>5</sub>	0,314	0,163	0,475	1,4
Si <sub>2</sub>	0,115	0,195	0,000	1,1	O <sub>6</sub>	0,161	0,197	0,768	2,8
Si <sub>3</sub>	0,250	0,250	0,618	1,1	(H <sub>2</sub> O) <sub>I</sub>	0,131	0,000	0,628	3,5
O <sub>1</sub>	0,353	0,000	0,222	1,1	(H <sub>2</sub> O) <sub>II</sub>	0,389	0,000	0,706	4,0
O <sub>2</sub>	0,188	0,121	0,151	1,8	(H <sub>2</sub> O) <sub>III</sub>	0,000	0,150	0,500	3,5
O <sub>3</sub>	0,000	0,141	0,000	0,2	Ca	0,500	0,000	0,000	3,1
O <sub>4</sub>	0,389	0,184	0,089	2,5	Na	0,056	0,000	0,268	0,3

вращения вокруг  $a$ . Систематические погасания на двух развертках нулевых слоевых (отсутствуют рефлексy с  $h + k = 2n + 1$  из  $hk0$  и  $k = 2n + 1$  из  $0kl$ ) соответствуют федоровским группам  $Pb2n$  и  $Pbmn$ . Выбор в пользу голоэдрической  $Pbmn$  сделан при первоначальном анализе трехмерной патерсоновской функции, строившейся по интенсивностям 440 нулевых рефлексов, замеренных по 2<sup>1/4</sup>-шкале почернений.

Из анализа  $P(uvw)$  обычными <sup>(3)</sup> приемами удалось определить координаты трех кристаллографически независимых атомов Si(Al). Рассчитанный по этим координатам трехмерный синтез электронной плотности  $\rho(xyz)$  ( $R \sim 40\%$ ) позволил установить положения атомов O, а также Na и Ca. Две серии последовательных приближений привели к локализации молекул H<sub>2</sub>O, и одновременно уточнились координаты всех атомов в структуре.

Фактор расходимости с применением метода наименьших квадратов (при изотропной температурной поправке  $B = 1,01 \text{ \AA}^2$ ) для всех зарегистрированных не нулевых рефлексов (Mo  $K_{\alpha}$ ;  $\sin \theta/\lambda \leq 0,83$ ) удалось снизить до  $R_{hkl} = 0,144$ . Координаты атомов, соответствующие указанному значению  $R_{hkl}$ , даны в табл. 1.

В алюмосиликатном каркасе для трех кристаллографически независимых Si(Al) расстояния Si(Al)—O находятся в пределах 1,62—1,75  $\text{\AA}$ .

Среднее Si(Al)—O равно 1,70 Å при разбросе соответствующих O—O (ребер тетраэдров) 2,67—2,88 Å. Углы  $Si_1 - O_2 - Si_2 = 139^\circ$ ,  $Si_1 - O_1 - Si_1^* = 140^\circ$ ,  $Si_1 - O_4 - Si_1^* = 131^\circ$ ,  $Si_1 - O_5 - Si_3 = 137^\circ$ ,  $Si_2 - O_3 - Si_2^* = 129^\circ$ ,  $Si_2 - O_4^* - Si_1^* = 131^\circ$ ,  $Si_2 - O_6 - Si_3 = 138^\circ$ .

Основной строительной деталью структуры гоннардита, как у других членов (Na—Si)-группы, можно считать четко выделяющиеся вдоль оси вытянутости кристалла  $c = 6,63$  Å «зуньитовые» (Z) цепочки  $[Si_5O_{12}]_\infty$  (\*).

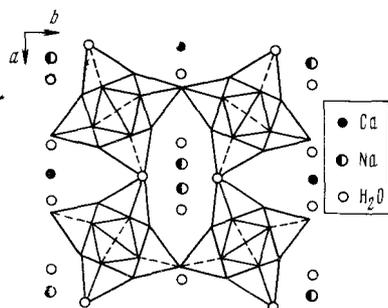


Рис. 1. Гоннардит. Проекция структуры при луче зрения вдоль [001]. Четыре зуньитовые цепочки  $[Al_2Si_3O_{12}]_\infty$  создают сквозные каналы с восьмерными входными окнами

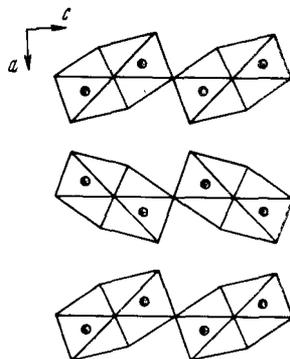


Рис. 2. Зигзагообразные цепочки из Na-восьми-вершинников

В пустотах каркаса гоннардита, составленного из этих цепочек  $[Al_2Si_3O_{12}]$  размещены катионы и входящие в координацию последних молекулы воды (рис. 1). Катионы кальция находятся в центрах симметрии и окружены шестью O из каркаса и двумя молекулами воды. Связанные с Ca

Таблица 2

Межатомные расстояния (в Å) в структуре гоннардита  $Na_2Ca[Al_2Si_3O_{12}]_2 \cdot 6H_2O$

Si <sub>1</sub> (Al)-тетраэдр	Si <sub>2</sub> (Al)-тетраэдр	Si <sub>3</sub> (Al)-тетраэдр	Na-полнэдр	Ca-полнэдр
Si <sub>1</sub> —O <sub>1</sub> 1,71	Si <sub>2</sub> —O <sub>2</sub> 1,72	Si <sub>3</sub> —O <sub>5</sub> 1,73 (2)	Na—O <sub>2</sub> 2,51 (2)	Ca—O <sub>I</sub> 2,48 (2)
O <sub>2</sub> 1,74	O <sub>3</sub> 1,72	O <sub>6</sub> 1,72 (2)	O <sub>3</sub> 2,71 (2)	O <sub>4</sub> 2,94 (4)
O <sub>4</sub> 1,75	O <sub>4</sub> * 1,69	среднее 1,725	(H <sub>2</sub> O) <sub>P</sub> * 2,61	H <sub>2</sub> O <sub>II</sub> 2,45 (2)
O <sub>5</sub> 1,61	O <sub>6</sub> 1,65		H <sub>2</sub> O <sub>I</sub> 2,59	
среднее 1,70	среднее 1,695		H <sub>2</sub> O <sub>III</sub> 2,64 (2)	
O <sub>1</sub> —O <sub>2</sub> 2,77	O <sub>2</sub> —O <sub>3</sub> 2,72	O <sub>5</sub> —O <sub>5</sub> * 2,88		
O <sub>4</sub> 2,67	O <sub>4</sub> * 2,74	O <sub>6</sub> 2,87 (2)		
O <sub>5</sub> 2,79	O <sub>6</sub> 2,75	O <sub>6</sub> * 2,73 (2)		
O <sub>2</sub> —O <sub>4</sub> 2,85	O <sub>3</sub> —O <sub>4</sub> * 2,82	O <sub>6</sub> —O <sub>6</sub> * 2,78		
O <sub>5</sub> 2,81	O <sub>6</sub> 2,74	среднее 2,82		
O <sub>4</sub> —O <sub>5</sub> 2,76	O <sub>4</sub> —O <sub>6</sub> 2,74			
среднее 2,77	среднее 2,75			

\* Звездочкой отмечены атомы, связанные с базисными операциями симметрии. В скобках дано число связей.

молекулы H<sub>2</sub>O и два из шести атомов O образуют первую координационную сферу. Расстояния до этих лигандов близки к сумме ионных радиусов 2,45—2,48 Å ( $R_0 + R_{Ca} = 2,4$  Å). Расстояния до остальных O-лигандов, дополняющих координацию кальция до 8, значительно больше (2,94 Å). Катионы Na, так же как и Ca, находятся на зеркальных плоскостях. Имеющий форму томсоновского куба восьмивершинник вокруг Na образован четырьмя молекулами H<sub>2</sub>O и четырьмя атомами O из восьмерных окон каркаса.

Обобщая грани (образованные молекулами воды) и ребра (связывающие атомы O), восьмивершинники Na выстраиваются в зигзагообразную цепочку, тянущуюся вдоль оси *c* (рис. 2).

Расстояния от Na до окружающих O-лигандов в пределах 2,51—2,70 Å, а до четырех молекул воды 2,59—2,64 Å (табл. 2).

Вся вычислительная часть анализа выполнена на ЭВМ М-220 Института кибернетики АН АзербССР, сотрудникам которого авторы выражают глубокую признательность.

Институт неорганической и физической химии  
Академии наук АзербССР  
Баку

Поступило  
17 XII 1971

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> Ф. А. Ахундов, Кандидатская диссертация, Баку, 1969. <sup>2</sup> Х. Штруиц, Минералогические таблицы, М., 1962. <sup>3</sup> М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, М., 1961. <sup>4</sup> С. Т. Амиров, Х. С. Мамедов, Геохимия, № 11 (1968).