

ОСОБЕННОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ РОМБИЧЕСКОГО ЛАЗУРИТА ПО ПОРОШКОВЫМ РЕНТГЕНОВСКИМ ДАННЫМ

Е. В. Канева, А. Н. Сапожников

Институт геохимии СО РАН, г. Иркутск, kev604@mail.ru

На месторождениях Прибайкалья известны четыре структурные модификации лазурита, минерала группы содалита с общей формулой $\text{Na}_6\text{Ca}_2\{\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}\}(\text{SO}_4, \text{S})_2$: кубическая, моноклинная, триклинная и ромбическая, дифракционные картины которых обнаруживают различия. Анизотропные разновидности минерала характеризуются ячейками с параметрами $a = a_{\text{куб}}$, $b = a_{\text{куб}}\sqrt{2}$, $c = n a_{\text{куб}}\sqrt{2}$, где n целое и изменяется от 2 до 4 [Минералы, 2003]. Для ромбической модификации лазурита параметры элементарной ячейки по отношению к субъячейке следующие: $a = a_{\text{куб}}$, $b = a_{\text{куб}}\sqrt{2}$, $c = 3a_{\text{куб}}\sqrt{2}$. На кфорограммах сверхструктурные отражения располагаются в узловых рядах, параллельных одному из шести направлений $hk0$ базисной ячейки [Сапожников и др., 1993].

Рентгенографическое изучение ромбического лазурита из Тултуйского месторождения выполнено на порошковом автодифрактометре D8 ADVANCE. Дифракционная картина минерала содержит два типа отражений – основные рефлексы и сверхструктурные. Основные рефлексы определяют содалитовую субъячейку – базисную ячейку. Измерения, выполненные на дифрактограммах с помощью программного обеспечения «Eva» дифрактометра D8, выявили уширение основных линий ромбического лазурита, при этом разница между полушириной соответствующих линий ромбического и кубического лазуритов составила от 0 до 0.11° (2θ) (табл. 1).

Таблица 1

Результаты измерения полуширины линий базисной субъячейки на дифрактограммах ромбического и кубического лазурита

$hkl_{\text{куб}}$	Ромбический лазурит (Тултуйское месторождение)	Кубический лазурит (Малобыстринское месторождение)	Δ (разность полуширин)
	Полуширина рефлекса (в град. 2θ)	Полуширина рефлекса (в град. 2θ)	
110	0.140	0.140	0
200	0.158	0.138	0.02
211	0.172	0.159	0.013
220	0.112	0.104	0.008
310	0.202	0.168	0.034
222	0.183	0.172	0.011
321	0.184	0.160	0.024
400	0.217	0.204	0.013
330	0.226	0.206	0.02
420	0.166	0.164	0.002
332	0.168	0.162	0.006
422	0.237	0.174	0.063
510	0.265	0.193	0.072
521	0.254	0.159	0.095
440	0.258	0.167	0.091
530	0.245	0.134	0.111
600	0.290	0.184	0.106
611	0.281	0.186	0.095

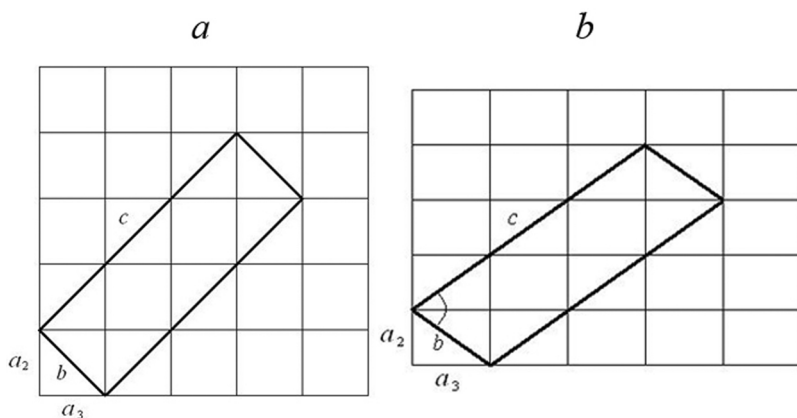


Рис. 1. Ориентация осей и варианты элементарной ячейки лазурита в зависимости от соотношения параметров ортогональной базисной ячейки: *a* – ромбическая элементарная ячейка, если базисная ячейка тетрагональная ($a_1 \neq a_2 = a_3$), *b* – моноклинная элементарная ячейка, если базисная ячейка ромбическая ($a_1 \neq a_2 \neq a_3$).

Полученные результаты позволили предположить, что базисная ячейка ромбического лазурита является псевдокубической. В таком случае, отмеченные выше соотношения между параметрами элементарной ячейки и субъячейки будут выполняться лишь приближенно. Анализ геометрии базисной ячейки с ортогональными ребрами a_1 , a_2 , и a_3 показал, что при выполнении условия $a_1 \neq a_2 = a_3$ и соотношений $a = a_1$, $b = a_2\sqrt{2}$, $c = 3a_3\sqrt{2}$ элементарная ячейка минерала будет метрически орторомбической (рис. 1, *a*). При условии $a_1 \neq a_2 \neq a_3$ и соотношениях $a = a_1$, $b = \sqrt{a_2^2 + a_3^2}$, $c = 3\sqrt{a_2^2 + a_3^2}$ элементарная ячейка минерала становится моноклинной из-за отклонения угла α от ортогональности (рис. 1, *б*). Условие $a_1 \neq a_2 = a_3$ и соотношения $a = a_1$, $b = a_2\sqrt{2}$, $c = 3a_3\sqrt{2}$ были использованы при расчете параметров элементарной ячейки. Из межплоскостных расстояний основных линий на дифрактограмме ромбического лазурита был рассчитан параметр кубической базисной ячейки $a_{куб} = 9.088$ А, по которому вычислили предварительные параметры элементарной ячейки минерала: $a = a_{куб}$, $b = a_{куб}\sqrt{2}$, $c = 3a_{куб}\sqrt{2}$. По величине этих параметров с учетом индексов рефлексов, установленных из кфорограмм, выполнено индцирование сверхструктурных отражений на дифрактограмме минерала.

Заключительная величина параметров элементарной ячейки: $a = 9.066$, $b = 12.851$, $c = 38.549$ А рассчитана МНК по межплоскостным расстояниям сверхструктурных отражений, расположенных в интервале углов 2θ от 24 до 63 градусов, так как, в отличие от основных линий, сверхструктурные отражения не испытывают уширения, определяемого псевдокубичностью базисной ячейки.

Опыты по прокаливанию ромбического лазурита показали, что псевдокубичность уменьшается при нагревании. При отжиге образца при 700 °С в течение 24 часов практически все сателлитные рефлексы на дифрактограмме исчезают, а полуширина основных линий уменьшается.

Таким образом, в результате проведенного исследования выявлено уширение линий базисной ячейки на дифрактограммах ромбического лазурита и обоснована необходимость расчета параметров элементарной ячейки минерала по межплоскостным расстояниям сверхструктурных отражений.

Литература

Минералы. Справочник. Т. 5: Каркасные силикаты. Вып. 2: Фельдшпатоиды. М.: Наука. 2003. 379 с.

Сапожников А. Н., Иванов В. Г., Левицкий В. И., Пискунова Л. Ф. Структурно-минералогические особенности лазурита Юго-Западного Памира // ЗВМО. 1993. № 1. С. 108–115.