НОВЫЕ МИНЕРАЛЫ

УДК 549.464

© Н. В. ЧУКАНОВ,* Д. И. БЕЛАКОВСКИЙ,** Р. К. РАСЦВЕТАЕВА,***
О. В. КАРИМОВА,**** А. Е. ЗАДОВ*****

НОВГОРОДОВАИТ $Ca_2(C_2O_4)Cl_2 \cdot 2H_2O$ — НОВЫЙ МИНЕРАЛ[1]

N. V. CHUKANOV, D. I. BELAKOVSKII, R. K. RASTSVETAEVA, O. V. KARIMOVA, A. E. ZADOV.
NOVGORODOVAITE $Ca_2(C_2O_4)Cl_2 \cdot 2H_2O$, A NEW MINERAL

* *Институт проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл., п. Черноголовка, E-mail: chukanov@icp.ac.ru*
** *Минералогический музей им. А. Е. Ферсмана РАН, 117901, Москва, В-71, Ленинский пр., 18, корп. 2*
*** *Институт кристаллографии РАН, 117333, Москва, Ленинский пр., 59*
**** *Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии (ИГЕМ) РАН, 109017, Москва, Старомонетный пер., 35*
***** *НПО «Регенератор», 127018, Москва, ул. Складочная, 6*

A new oxalate mineral novgorodovaite has been found in evaporite rock from Chelkar salt dome, W. Kazakhstan. It occurs as aggregates of colourless grains (up to 7 mm) together with anhydrite, gypsum, halite, bischofite, magnesite, hilgardite. Cleavage medium on (100) and (010); Mohs hardness 2.5, brittle, optically biaxial, negative, α 1.565(2), β 1.645(2), γ 1.725(4), $2V_{meas} = 88(10)$; $D_{meas} = 2.38(1)$ g/cm^3; $D_{calc} = 2.40(2)$ g/cm^3. The crystal structure is solved, $R = 0.029$. Monoclinic, $I1\ 2/m\ 1$, $a = 6.936(3)$, $b = 7.382(3)$, $c = 7.443(3)$ Å, $V = 380.0(2)$. $\beta = 94.3(1)°$, $V = 380.0(2)$ Å^3, $Z = 2$. Chemical composition (wt %): Ca 29.43, Cl 24.56 (electron microprobe); C 8.53, H 1.67 (selective sorption of combustion products in oxygen). Empirical formula: $Ca_{2.00}(C_2O_4)_{0.97}Cl_{1.89}(OH)_{0.17} \cdot 2.17\ H_2O$. The strongest lines of X-ray powder diffraction pattern *d*, Å (*I, hkl*) are: 5.062 (7, 110), 4.812 (5, 101), 4.323 (7, 11—1), 4.063 (7, 111), 3.644 (5, 020), 2.956 (8, 21—1), 2.917 (10, 112). IR specrtum is given. The mineral is named after well know mineralogist, director of Fersman Mineralogical Museum of Russian Academy of Sciences, Margarita Ivanovna Novgorodova (b.1938). The specimens of novgorodovaite are deposited at Fersman Mineralogical Museum of Russian Academy of Sciences, Moscow.

Класс оксалатов представлен относительно небольшим количеством минеральных видов: известно всего 15 минералов, содержащих группу $C_2O_4^{2-}$. В связи с этим находка в литосфере нового оксалата представляет определенный минералогический интерес.

Новый минерал найден в образцах № 69819 и 69820 из коллекции Минералогического музея им. А. Е. Ферсмана РАН, взятых из керна скважины (глубина 850—900 м), секущей эвапоритовые отложения соляного купола Челкар (Уральская область, Западный Казахстан), где он находится в ассоциации с ангидритом, гипсом, галитом, бишофитом, магнезитом, хильгардитом (Лобанова, 1963). Минерал получил название *новгородоваит* в честь известного минералога, директора Минералогического музея им. А. Е. Ферсмана РАН Маргариты Ивановны Новгородовой (р. 1938).

Новгородоваит образует зернистые агрегаты размером зерен до 7 мм. Отдельные зерна прозрачные, бесцветные; твердость по Моосу 2.5, хрупкий, спайность средняя по (100) и (010); плотность измеренная 2.38(1) г/см^3 (методом уравновешивания в

[1] Рассмотрено и рекомендовано к опубликованию Комиссией по новым минералам и названиям минералов Всероссийского минералогического общества РАН 16 мая 2000 г. Утверждено Комиссией по новым минералам и названиям минералов Международной минералогической ассоциации 10 октября 2000 г.

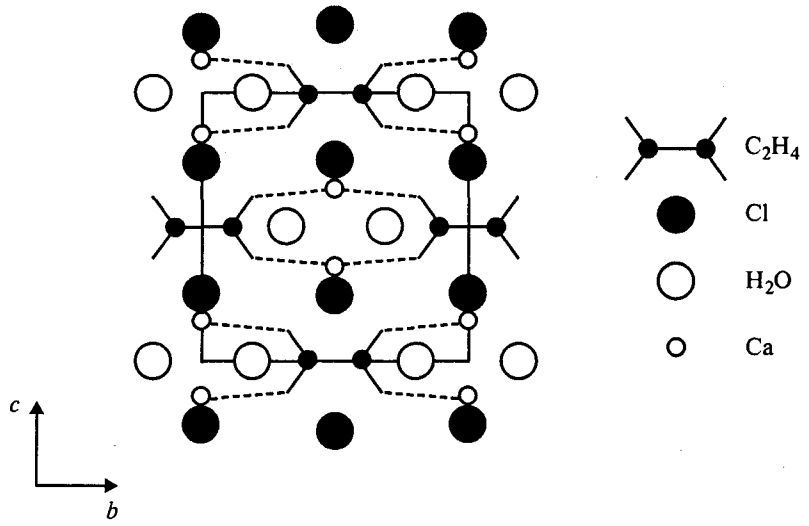

Рис. 1. Кристаллическая структура новгородоваита.

Fig. 1. Crystal structure of novgorodovaite.

тяжелых жидкостях), вычисленная 2.40(2) г/см³. Минерал двуосный, оптически отрицательный, характеризуется сильной псевдоабсорбцией. $n_p = 1.565(2)$, $n_m = 1.645(2)$, $n_g = 1.725(4)$, $2V_{набл} = 88(10)$, $2V_{выч} = 87(3)°$.

Химический состав новгородоваита изучен методом локального рентгеноспектрального анализа (микроанализатор CAMEBAX со спектрометром Link AN 10 000). При этом во избежание «выгорания» использовался расфокусированный (до диаметра 20 мкм) пучок электронов. Содержания Ca и Cl (мас.%), по данным пяти измерений, равны соответственно: 31.16 и 25.42, 28.07 и 24.22, 31.13 и 23.91, 28.05 и 24.29, 28.72 и 24.98 (средние значения 29.43 для Ca и 24.56 для Cl). Другие элементы (включая Na, Mg, Sr, Al, Si, S), по данным рентгеновской спектроскопии, не найдены.

Содержание H и C определено методом селективной сорбции продуктов сжигания в токе кислорода при 1100 C. По данным двух измерений (мас.%): для H 1.68

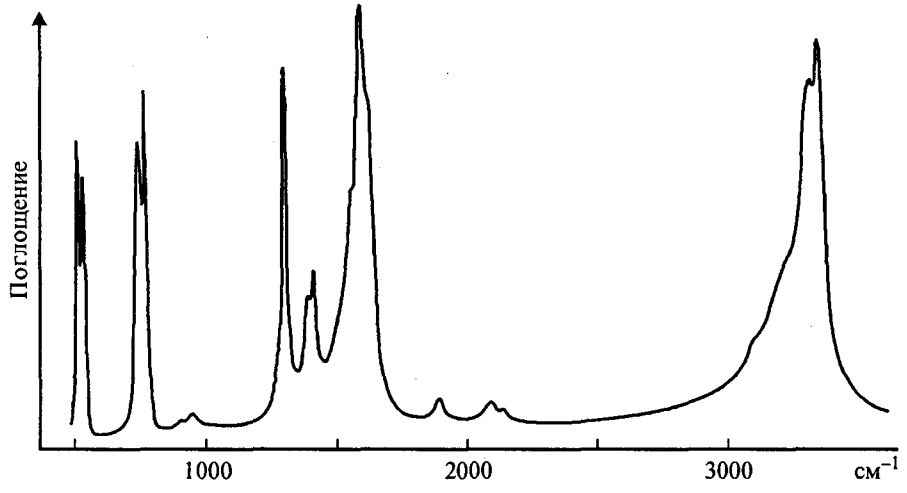

Рис. 2. Инфракрасный спектр новгородоваита.

Fig. 2. Infrared spectrum of novgorodovaite.

Результаты расчета рентгенограммы новгородоваита

X-ray powder diffraction data for novgorodovaite

I	$d_{изм}$	$d_{выч}$	*hkl*	*I*	$d_{изм}$	$d_{выч}$	*hkl*
7	5.062	5.047	110	4	1.862	1.862	321
5 ш	4.812	4.881	101	2	1.846	1.845	040
7 ш	4.323	4.284	$11\bar{1}$	5	1.834	1.836	312
7 ш	4.063	4.071	111	1 ш	1.817	1.817	$22\bar{3}$
5	3.644	3.691	020	3	1.743	1.745	033
2	3.465	3.458	200	3	1.690	1.689	$20\bar{4}$
1	3.345	3.377	$10\bar{2}$	3	1.670	1.668	$41\bar{1}$
2 ш	3.066	3.071	$11\bar{2}$	2	1.651	1.652	042
8	2.956	2.958	$21\bar{1}$	2	1.629	1.628	240
10	2.917	2.915	112	1	1.614	1.614	$40\bar{2}$
2	2.817	2.818	211	3	1.592	1.592	$23\bar{3}$
4	2.627	2.630	$20\bar{2}$	1	1.564	1.566	420
5	2.618	2.617	022	1	1.536	1.536	$22\bar{4}$
5	2.518	2.524	220	1	1.526	1.524	402
1	2.438	2.440	202	3	1.501	1.502	332
3	2.389	2.387	$10\bar{3}$	2	1.487	1.489	323
4	2.349	2.346	013	1	1.472	1.474	$10\bar{5}$
5	2.339	2.336	031	0.5	1.456	1.457	224
5	2.320	2.318	130	1	1.448	1.448	051
5	2.280	2.276	103	1	1.440	1.441	340
4	2.250	2.250	$30\bar{1}$	2	1.433	1.433	143
3	2.200	2.201	310	4	1.371	1.371	314
4 ш	2.121	2.142	$22\bar{2}$	1	1.335	1.333	125
4 ш	2.101	2.088	$20\bar{3}$	1	1.306	1.307	215
3	2.041	2.036	222	4	1.291	1.291	$52\bar{1}$
3	2.011	2.009	$21\bar{3}$	2	1.237	1.239	$42\bar{4}$
3	1.992	2.004	$12\bar{3}$	1	1.229	1.230	060
4	1.984	1.989	$13\bar{2}$	2	1.215	1.219	$23\bar{5}$
2	1.957	1.957	$23\bar{1}$	1	1.204	1.205	$25\bar{3}$
3	1.943	1.944	132	2	1.161	1.165	352
1	1.888	1.880	213				

Примечание. *ш* — широкая линия.

и 1.66 (среднее 1.67), для C 8.70 и 8.36 (среднее 8.53). Эмпирическая формула с учетом структурных данных (см. ниже), в расчете на 2 атома Ca, с учетом требований баланса заряда $Ca_{2.00}(C_2O_4)_{0.97}Cl_{1.89}(OH)_{0.17} \cdot 2.17H_2O$. Идеализированная формула новгородоваита $Ca_2(C_2O_4)Cl_2 \cdot 2H_2O$.

Теоретический состав для идеализированной формулы (мас.%): Ca 29.14, C 8.73, Cl 25.77, H 1.47, O 34.89. Пониженное (по сравнению с теоретическим) содержание хлора и повышенное содержание водорода в исследованном образце может объясняться замещением части хлора группой OH^-, а также экспериментальной погрешностью. Сходимость состава, оптических параметров и плотности (Mandarino, 1981) хорошая: $1 - K_p/K_c = -0.044$.

Потеря массы порошком минерала в вакууме при температуре 330 °C в течение 30 мин составляет 13.8 %, что соответствует потере приблизительно двух молекул воды на формулу.

Кристаллическая структура новгородоваита изучена для монокристалла размером $0.25 \times 0.1 \times 0.1$ мм с использованием 345 независимых отражений; $R = 0.029$. Минерал моноклинный, пр. гр. *I*1 2/*m* 1, параметры элементарной ячейки: $a = 6.936(3)$, $b = 7.382(3)$, $c = 7/443(3)$ Å, $\beta = 94.3(1)$, $V = 380.0(2)$ Å^3, $Z = 2$. В структуре новгоро-

доваита (рис. 1) атомы кальция образуют восьмивершинники с участием атомов Cl, молекул H_2O и атомов кислорода групп C_2O_4. Полиэдры CaX_8 соединяются в гофрированные колонки, вытянутые в направлении *b*. В двух других направлениях колонки связаны через общие ребра полиэдров CaX_8 (с участием общих молекул H_2O и атомов Cl) с образованием жесткого каркаса. Молекулы воды образуют слабые симметричные водородные связи с атомами кислорода оксалантных анионов.

Рентгенограмма новгородоваита получена в камере Гинье диаметром 114.6 мм, на CuK_{α_1}-излучении (см. таблицу). При расчете $d_{выч}$ использованы параметры элементарной ячейки, найденные из данных рентгеноструктурного анализа минерала.

Волновые числа после ИК-спектра (см$^{-1}$; см. рис. 2; подчеркнуты сильные линии): 3357, 3325, 3235 (плечо), 3120 (плечо), 2160, 2120, 1915, 1645 (плечо), 1621, 1583, 1428, 1403, 1319, 953, 922, 783, 762, 538, 518. Полосы при 3357 и 3325 см$^{-1}$ относятся к валентным колебаниям, плечо при 1645 см$^{-1}$ — к деформационным колебаниям молекул воды, образующих слабые водородные связи; остальные полосы ИК-спектра относятся к основным колебаниям и обертонам иона $C_2O_4^{2-}$.

Новгородоваит является природным аналогом синтетического соединения $CaC_2O_4 \cdot CaCl_2 \cdot 2H_2O$ (Jones, White, 1946), имеющего близкий состав, положения линий дебаеграммы (5.25, 3.71, 2.95, 2.63, 2.51, 2.32, 1.98, 1.85, 1.75, 1.67, 1.59 Å; выделены наиболее интенсивные линии) и оптические характеристики ($n_p = 1.571$, $n_m = 1.648$, $n_g = 1.718$, $2V_{набл} = 85$).

Список литературы

Лобанова В. В. Новый минерал татарскит // ЗВМО. **1963.** Вып. 6. С. 697—702.

Jones F. T., White L. M. The composition, optical, and crystallographical properties of two calcium oxalate-chloride double salts // J. Amer. Chem. Soc. **1946.** Vol. 68. P. 1339—1342.

Mandarino J. A. The Gladstone—Dale relationship: Part IV. The compatibility concept and its application // Canad. Miner. **1981.** Vol. 19. P. 441—450.

Поступила в редакцию
5 февраля 2001 г.