

НОВЫЕ МИНЕРАЛЫ

УДК 549.6

© В. В. РУДНЕВ,* д. чл. Н. В. ЧУКАНОВ,** Г. Н. НЕЧЕЛЮСТОВ,* Н. А. ЯМНОВА***

ГИДРОКСИЛБОРИТ, $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)(\text{OH})_3$ — НОВЫЙ МИНЕРАЛ
И ИЗОМОРФНЫЙ РЯД ФЛЮОБОРИТ—ГИДРОКСИЛБОРИТ¹V. V. RUDNEV, N. V. CHUKANOV, G. N. NECHELYUSTOV, N. A. YAMNOVA. HYDROXYLBORITE,
 $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)(\text{OH})_3$, A NEW MINERAL, AND THE ISOMORPHOUS
FLUOBORITE—HYDROXYLBORITE SERIES* Всероссийский научно-исследовательский институт минерального сырья (ВИМС),
119017, Москва, Старомонетный пер., 31; e-mail: vims-rudnev@mail.ru

** Институт проблем химической физики (ИПХФ РАН),

142432, Московская обл., Черноголовка; e-mail: chukanov@icp.ac.ru

*** Московский государственный университет, 119234, Москва, Воробьевы горы

A new mineral species hydroxylborite, an analogue of fluoborite with $\text{OH} > \text{F}$, has been approved by the IMA CNMMN (IMA No. 2005-054). Type material has been collected in the Titovskoe deposit, Chersky ridge, the river Dogdo basin, Sakha Republic (Yakutia), Russia ($57^\circ 41' \text{ N}$, $125^\circ 22' \text{ E}$). Hydroxylborite prismatic crystals are formed mainly by the $\{1100\}$ faces, without distinct end-forms, up to $(1\text{--}1.5) \times (0.1\text{--}0.2)$ mm, and radial aggregates of such crystals in a mineralized marble near the contact with boron ores (suanite-kotoite-ludwigite). Associated minerals — calcite, dolomite, Mg-rich ludwigite, kotoite, szaibelyite, clinohumite, magnetite, serpentine, chlorite. The mineral is colorless, streak white, transparent with vitreous luster; brittle, Mohs' hardness $3\frac{1}{2}$. Imperfect cleavage observed on $\{0001\}$. $D_{\text{meas}} = 2.89(1) \text{ g/cm}^3$ (by equilibration in heavy liquids); $D_{\text{calc}} = 2.872 \text{ g/cm}^3$. Wave numbers of the bands in IR spectrum are (cm^{-1} , sh — shoulder): 3668, 1233, 824, 742, 630 sh, 555 sh, 500 sh, 450 sh, 407. Hydroxylborite is optically uniaxial, negative; $\omega = 1.566(1)$, $\epsilon = 1.531(1)$. Chemical composition (electron microprobe, H_2O — by Penfield method; wt %): B_2O_3 18.43; MgO 65.71, F 10.23, H_2O 9.73; $-\text{O} = \text{F}_2 - 4.31$; total 99.79. The empirical formula (based on 6 anions *pfu*) is: $\text{Mg}_{3.03}\text{B}_{0.98}[(\text{OH})_{2.00}\text{F}_{1.00}]\text{O}_{3.00}$. Hydroxylborite is hexagonal, space group $P6_3/m$; $a = 8.912(8) \text{ \AA}$, $c = 3.112(4) \text{ \AA}$; $V = 214.05(26) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$. Strongest lines of X-ray powder diffraction pattern are d , $\text{\AA}$ (I , %): (hkl): 7.69(52)(0110); 4.45(82)(1120), 2.573(65)(0330), 2.422(100)(0221), 2.128(60)(1231). Compatibility index 1 — (K_p/K_c) is 0.038 («excellent») with D_{calc} and 0.044 («good») with D_{meas} . Holotype material is deposited in the Fersman Mineralogical Museum of Russian Academy of Sciences (inventory number 91968) and the Geological Museum of the All-Russian Scientific Research Institute of Mineral Resources (inventory number M-1663).

ВВЕДЕНИЕ

Ортоборат магния гидроксилборит (hydroxylborite) является ОН-доминантным ($\text{OH} > \text{F}$) членом изоморфной серии флюоборит $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)\text{F}_3$ —гидроксилборит $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)(\text{OH})_3$ с предполагаемым полным изоморфизмом между F и OH. Минерал получил название по химическому составу.

Минералы группы флюоборита распространены широко, хотя редко образуют достаточно крупные скопления. Наиболее типичны они для руд и минерализованных кальцифиров борных, олово-борных и бор-железородных месторождений формации магнезиальных скарнов (Tilley, 1951; Граменицкий, 1966; Перцев, 1971; Александров,

¹ Рассмотрен Комиссией по новым минералам и названиям минералов РМО 21 ноября 2005 г. Утвержден Комиссией по новым минералам и названиям минералов Международной минералогической ассоциации 2 февраля 2006 г.

1982; Marincea, 2000, и др.), встречаются в скарнированных породах и рудах оловянных (Ahlfeld e. a., 1938; Сергеев, Новикова, 1969; Kwak, Nicholson, 1988; Šrein e. a., 2000, и др.) и полиметаллических (Bauer, Berman, 1929) месторождений, в аподоломитовых грейзенах (Гуляев, 1971), серпентинитах (Ойдул и Кудрявцева, 1999), в ксенолитах метаморфизованных известняков среди вулканических туфов (Brisi, Eitel, 1957), в галит-ангидритовых и галит-кальцитовых породах (Аполлонов и др., 1988).

Впервые фторгидроксилортоборат магния из железорудного месторождения Норберг (рудник Талльгрюван) в Швеции описал П. Гейер (Geijer, 1926), назвав его *флюоборитом*. Борат был обнаружен в ассоциации с магнетитом, минералами гумитовой группы, форстеритом, людвигитом и характеризовался значительным преобладанием ОН над F [гидроксильность $h = \text{ОН}/(\text{ОН} + \text{F})$ — около 70 мол. %]. Высокофтористый ($\text{F} > \text{ОН}$) представитель рассматриваемой группы был обнаружен в известняках среди вулканических туфов Ноцера близ Неаполя, Италия [A. Scacchi (1881) и F. Zambonini (1919), по: Brisi, Eitel, 1957] и первоначально рассматривался как «минеральный вид» с составом $\text{Mg}_3\text{Ca}_3\text{O}_2\text{F}_8$, названный по месту находки *ноцеритом*. Однако Ч. Бриси и В. Эйтель определили, что данный состав отвечает смеси существенно фтористого флюоборита и флюорита (Brisi, Eitel, 1957). Несмотря на то что название «ноцерит» первоначально было присвоено минеральной смеси, Ч. Бриси и В. Эйтель сохранили за идентифицированным боратом это имя, что, по нашему мнению, некорректно.

Фтористые члены рассматриваемой минеральной группы встречаются в природе несколько чаще гидроксильных, однако и ОН-доминантные представители не являются минералогической редкостью (Утехин, 1960; Kwak, Nicholson, 1988; Šrein e. a., 2000; наши образцы из Верхоянья, и др.). Еще Л. Г. Байер и Г. Берман, изучая флюоборит из Sterling Hill (New Jersey, USA), отметили, что в подходящих условиях разумно ожидать существования бесфторного «флюоборита» (Bauer, Berman, 1929). В. Т. Шаллер (Schaller, 1942) и позднее А. А. Бровкин с соавторами (1967), анализируя результаты изучения химического состава и свойств минералов группы флюоборита с общей формулой $\text{Mg}_3\text{VO}_3(\text{F}, \text{OH})_3$, показали реализацию изоморфного замещения между ОН и F в широком интервале их содержаний.

В опытах по гидротермальному синтезу фторборатов состава $\text{Mg}_3\text{VO}_3(\text{F}, \text{OH})_3$ были получены минеральные разновидности от чисто фтористой ($h = 0\%$) (Flamini e. a., 1979) до существенно гидроксильной ($h = 57\%$); при этом было установлено, что повышение давления в экспериментах благоприятствует синтезу минералов с более гидроксильным составом (Некрасов и др., 1970).

Авторы настоящей работы провели изучение гидроксил-доминантного минерального вида ($h = 67\%$) из кальцифиров месторождения Титовское, являющегося типичным представителем борных и олово-борных месторождений Верхояно-Индибирской рудной провинции (Лисицын и др., 1995). По результатам выполненных исследований и анализа опубликованных материалов предложено в непрерывной изоморфной серии бинарных соединений гидроксильный минеральный вид $\text{Mg}_3\text{VO}_3(\text{OH})_3$ называть **гидроксилборитом**, а за фтористым видом $\text{Mg}_3\text{VO}_3\text{F}_3$ сохранить название **флюоборит**, что будет отвечать особенностям их химического состава. Пределы изменения состава каждого из видов определять интервалом от состава конечного члена серии до точки 50 % соответствующего минала. Основные характеристики изученного голотипа гидроксилборита приведены в табл. 1.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

Химический состав гидроксилборита изучен в ВИМСе методом локального рентгеноспектрального анализа на электронно-зондовом микроанализаторе Superprobe-8100 при следующих условиях ускоряющих напряжений: 5—10 кВ для бора, 10 кВ для фтора и 15 кВ для магния, сила тока составляла соответственно 100, 50 и 20 нА. Стандарты: природный данбурит $\text{CaB}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ (для В) и синтетическое соединение MgF_2 (для Mg, F). Кристалл-анализатором при определении бора служил LDE2, а для фтора

Основные характеристики минералов флюоборит-гидроксилборитовой изоморфной серии

Main characteristics of minerals of the fluoborite-hydroxylborite isomorphous series

Характеристика	Флюоборит (синтезированный)	Гидроксилборит (обр. В-922)
Формула	$Mg_3BO_3F_3$	$Mg_{3,03}B_{0,98}O_{3,00}[(OH)_{2,00}F_{1,00}]$
Гидроксильность, $h = OH/(OH + F)$, мол. %	0	67
Сингония	Гексагональная	Гексагональная
Пр. группа	$P6_3/m$	$P6_3/m$
a , Å	$8.805_6 \pm 0.0015$	8.912(8)
c , Å	$3.097_5 \pm 0.001$	3.112(4)
c/a	0.3518	0.3492
V , Å ³	208.08	214.05(26)
Z	2	2
Интенсивные линии рентгенограммы I , d , hkl	30, 7.60, $10\bar{1}0$ 60, 4.38, $11\bar{2}0$ 50, 2.539, $30\bar{3}0$ — 100, 2.403, $20\bar{2}1$ 100, 2.108, $31\bar{4}0 + 21\bar{3}1$ 80, 1.795, $22\bar{4}1$ 50, 1.748, $31\bar{4}1$ 80, 1.549, $000\bar{2}$ 100, 1.465, $41\bar{5}1$ 50, 1.0574, $62\bar{8}0$	52, 7.69, $01\bar{1}0$ 82, 4.45, $11\bar{2}0$ 65, 2.573, $03\bar{3}0$ 49, 2.551, $11\bar{2}1$ 100, 2.422, $02\bar{2}1$ 44, 2.141, $13\bar{4}0$ 60, 2.128, $12\bar{3}1$ 35, 1.812, $22\bar{4}1$ 22, 1.765, $13\bar{4}1$ 22, 1.557, $000\bar{2}$ 36, 1.482, $14\bar{5}1$ —
D , г/см ³	3.012 (выч.)	2.89(1)
Оптический характер	Одноосный, отрицательный	Одноосный, отрицательный
N_o	1.503	1.566
N_e	1.482	1.531
$N_o - N_e$	0.021	0.035
Волновые числа полос ИК-спектра	3660, 1237, 851, 825, 740, 640, 616, 525, 460, 403	3668, 1233, 824, 742, 630, 555, 500, 450, 407
Цвет	Бесцветный	Бесцветный
Фотолюминесценция	?	Голубоватая
Литературная ссылка	Бровкин и др., 1967	Данная работа

и магния — ТАР. Измерение интенсивностей BK_α и FK_α проводилось с применением дифференциальной дискриминации. С целью минимизации влияния химической связи на результаты анализа бора и фтора K -отношение ($K = S_{обр.}/S_{эт.}$) определялось по интегральным интенсивностям. Для уменьшения термодиффузии атомов в процессе анализа измерение интенсивностей линии BK_α и FK_α проводились в режиме растра с излучающей поверхностью 30×30 мкм². Термоустойчивость минерала проверялась путем измерения интенсивности линии MgK_α в течение всего времени, необходимого для получения интегральной интенсивности BK_α . Изменение интенсивности линии MgK_α при выбранных условиях анализа не превышало 2 отн. %.

Расчет концентраций осуществлялся по программе CITZAF Version: 3.50, входящей в состав математического обеспечения микроанализатора. При режиме 5 кВ по-

лученные результаты по содержанию B_2O_3 в минерале оказались несколько заниженными (18.15 мас. % — среднее из 3 опр.) по сравнению с данными при 10 кВ.

Содержание H_2O определено методом Пенфилда в ИПХФ РАН (аналитик А. С. Астахова). Прокаливание производилось при 1000 °С в токе кислорода, в качестве поглотителя использован ангидрон — перхлорат магния $Mg[ClO_4]_2$.

ИК-спектры регистрировали на двухлучевом спектрофотометре SPECORD 75 IR (Carl Zeiss, Jena) в диапазоне волновых чисел 400—3800 cm^{-1} при спектральной ширине щели < 2 cm^{-1} для интервала 400—1400 cm^{-1} и < 8 cm^{-1} для интервала 1400—3800 cm^{-1} (ИПХФ РАН). В качестве эталонов использовали полистирол и газообразный аммиак. Образцы готовили в виде таблеток с избытком бромистого калия. При записи спектра в пучок сравнения помещали таблетку KBr, не содержащую минерала.

Плотность определяли методом уравнивания зерна в тяжелых жидкостях. Оптические измерения проводились в иммерсионных препаратах.² Рентгенограмма порошка гидроксилборита получена на дифрактометре RIGAKU с использованием монокроматического CuK_{α_1} -излучения (ИГЕМ РАН).

Рентгеноструктурные исследования гидроксилборита выполнены на автоматическом монокристалльном дифрактометре РТ «SYNTEX» в Лаборатории рентгеноструктурного анализа кафедры кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ. Структура решена прямым методом с использованием комплекса программ SHELX-97 (Sheldrick, 1997). Полученная модель уточнена методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для атомов Mg, B и O. Позиция атома водорода найдена на разностном распределении электронной плотности. Отсутствие на том же распределении значимых дополнительных максимумов подтвердило правильность модели структуры.

УСЛОВИЯ НАХОЖДЕНИЯ ГИДРОКСИЛБОРИТА

Борное оруденение Верхояно-Индигорской рудной провинции (РФ, Республика Саха-Якутия, горная система Черского) известно с 30-х годов прошлого столетия (Ваккар и др., 1934) и в дальнейшем детально изучалось многими исследователями (Перцев, 1971; Дорофеев, 1979; Александров, 1982; Лисицын и др., 1995, и др.). К настоящему времени в регионе установлено более 30 борных минералов, причем некоторые минеральные виды открыты впервые именно здесь: карбонатобораты кальция и магния — боркарит (Перцев и др., 1965) и сахаит (Островская и др., 1966), борат кальция — ольшанскит (Богомолов и др., 1969), силикато-магнезиоборат — перцевит (Schreyer e. a., 2003), глиноземистый железо-магниевый борат — алюмомагнезиогулсит (Pertsev e. a., 2004). Кроме того, на борных месторождениях Верхоянья установлены оригинальные разновидности боратов: глиноземистый людвигит (Перцев, Александров, 1964) и цирконийсодержащий норденшёльдин (Руднев, 1998).

Образцы для исследований гидроксилборита отбирались на участке Висячем, расположенном в восточной части месторождения Титовское (географические координаты — 57°41' с. ш., 125°22' в. д.). В геологическом строении участка принимают участие раннемеловые амфибол-биотитовые граниты, прорывающие палеозойскую (О-S-D) кремнисто-карбонатную толщу. Магнезиально-карбонатные породы преобразованы в магнезиальные скарны пироксенового, пироксен-форстеритового, шпинель-форстеритового, форстеритового (клиногумитового), флогопитового составов и кальцифиры, апопериклазовые бруситовые мраморы. Породы неравномерно серпентинизированы. В скарнах и кальцифирах локализуются борные руды, представленные людвигитовыми и суанит-котоитовыми минеральными типами, в которых ранние бораты с различной интенсивностью замещены ссайбелиитом. Для участка характерно

² Измерение плотности и определение показателей преломления выполнил А. Е. Задов (НПО «Регенератор», Москва).

развитие глиноземистого людвигита (Перцев, Александров, 1964) с железистостью $f_m = \text{Fe}/(\text{Fe} + \text{Mg})$ обычно не выше 9—10 мол. %. В редких находках в ассоциации с магнезиальным людвигитом в виде незначительной примеси отмечается гулсит. Минералы флюоборитовой серии встречаются как в оруденелых скарнах, так и в минерализованных кальцифирах и мраморах. Обычно они образуют неравномерную рассеянную вкрапленность, гнезда, маломощные оторочки на контактах людвигитовых руд с кальцифирами, тонкие полиминеральные прожилки совместно с серпентином и хлоритом. Локально на участке развиты апомагнезиальные известковые скарны с везувианом и сахаитом.

Гидроксилборит установлен в клиногумитовом кальцифире, контактирующем с людвигитовой рудой. Порода в основном сложена кальцитом, в котором имеются участки, обогащенные гидроксилборитом. Нередко наблюдается замещение гидроксилборита тонкоигольчатым и волокнистым ссайбелиитом. В ассоциации с названными боратами установлен людвигит, образующий игольчато-волокнистые агрегаты. В отдельных кристаллах гидроксилборита отмечаются включения игольчатого людвигита, ориентированные вдоль удлинения минерала-хозяина. Мелкие зерна клиногумита — часто простые или полисинтетические двойники (угол погасания двойников 9—12°) — неравномерно рассеяны в карбонатной матрице.

ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ

Кристаллы голотипного гидроксилборита имеют вид гексагональных призм $\{10\bar{1}0\}$, лишенных концевых граней, и достигают размеров 1—1.5 × 0.1—0.2 мм (рис. 1). Обычно они собраны в радиально-лучистые или веерообразные агрегаты (рис. 2). Минерал бесцветный, прозрачный, обладает стекляннным блеском. Спайность по $\{0001\}$ неясная, отдельность отсутствует, излом раковистый. Хрупкий, твердость по Моосу 3.5. Измеренная плотность $D_{\text{изм}} = 2.89(1)$ г/см³; плотность, вычисленная по данным состава и параметров элементарной ячейки, $D_{\text{выч}} = 2.872$ г/см³. Гидроксилборит одноосный, отрицательный, $N_o = 1.566(1)$, $N_e = 1.531(1)$; $N_o - N_e = 0.035$. Удлинение отрицательное. Минерал обладает фотолюминесценцией в коротковолновом ультрафиолете ($\lambda = 246$ нм) в голубоватых тонах. В концентрированной H_2SO_4

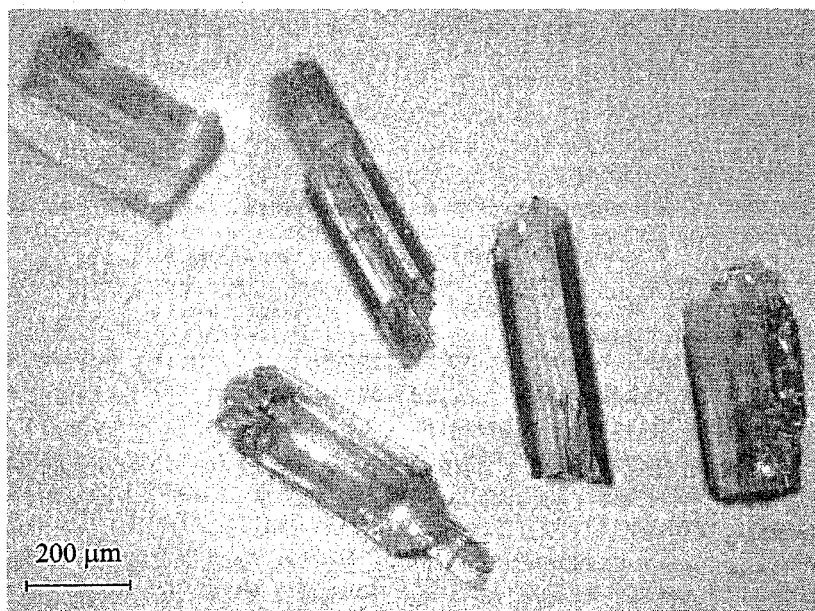


Рис. 1. Кристаллы гидроксилборита.

Fig. 1. Hydroxylborite crystals.



Рис. 2. Гидроксилборит — шестоватые агрегаты, частично замещенные ссайбелиитом, в клиногумитовом кальцифоре.

Микрофотография шлифа, николи скрещены.

Fig. 2. Hydroxylborite — columnar aggregates, partly replaced by szaibelyite, in clinohumite calciphyre. Microphotograph of thin section, with analyzer.

растворяется и с хинализарином быстро дает яркую реакцию на бор. В воде и разбавленной HCl не растворяется.

По химическому составу (табл. 2, обр. В-922) изученный гидроксилборит идентичен образцам из рудника Таллыгрюван в Норберге, Швеция (Geijer, 1926), Центрального Забайкалья, Россия (Канищев, 1966), месторождений олова в штате Новая Тасмания, Австралия (Kwak, Nicholson, 1988) и в Богемии, Чехия (Šrein e. a., 2000).

Эмпирическая формула гидроксилборита, рассчитанная по классическому (кислородному) методу на (O, OH)₅, — Mg_{3.03}B_{0.98}[(OH)_{2.00}F_{1.00}]O_{3.00}. Идеализированная фор-

Таблица 2

Химический состав гидроксилборита (мас. %)

Chemical composition of hydroxylborite (wt %)

Компонент	Пределы вариаций	Среднее из 3 анализов	Среднеквадратическое отклонение	(O, OH) = 5
B ₂ O ₃	18.20—18.61	18.43	0.2	0.98
MgO	65.13—66.03	65.71	0.4	3.03
F	10.04—10.48	10.23	0.2	1.00
H ₂ O	9.59—9.87	9.73		2.00
Сумма		104.10		
—O=F ₂		—4.31		
Сумма		99.79		

Примечание. Микрозонд Superprobe-8100. Аналитик Г. Н. Нечелюстов. Ca, Fe, Mn, Al, Cl, Ti, Zn не обнаружены. Содержание H₂O определено методом Пенфилда.

Результаты расчета рентгенограммы порошка гидроксилборита

X-ray powder diffraction data for hydroxylborite

$I, \%$	$d_{\text{изм}}, \text{\AA}$	$d_{\text{выч}}, \text{\AA}$	hkl	$I, \%$	$d_{\text{изм}}, \text{\AA}$	$d_{\text{выч}}, \text{\AA}$	hkl
52	7.69	7.72	01 $\bar{1}$ 0	22	1.765	1.764	13 $\bar{4}$ 1
82	4.45	4.46	11 $\bar{2}$ 0	8	1.685	1.684	14 $\bar{5}$ 0
1	3.860	3.859	02 $\bar{2}$ 0	11	1.640	1.640	04 $\bar{4}$ 1
42	2.916	2.917	12 $\bar{3}$ 0	22	1.557	1.556	0002
28	2.886	2.886	01 $\bar{1}$ 1	17	1.540	1.539	23 $\bar{5}$ 1
65	2.573	2.573	03 $\bar{3}$ 0	14	1.486	1.485	33 $\bar{6}$ 0
49	2.551	2.551	11 $\bar{2}$ 1	36	1.482	1.481	14 $\bar{5}$ 1
100	2.422	2.422	02 $\bar{2}$ 1	9	1.470	1.469	11 $\bar{2}$ 2
7	2.228	2.228	22 $\bar{4}$ 0	6	1.459	1.459	24 $\bar{6}$ 0
44	2.141	2.141	13 $\bar{4}$ 0	9	1.387	1.386	15 $\bar{6}$ 0
60	2.128	2.128	12 $\bar{3}$ 1	8	1.384	1.383	05 $\bar{5}$ 1
4	1.983	1.983	03 $\bar{3}$ 1	5	1.341	1.341	33 $\bar{6}$ 1
17	1.930	1.929	04 $\bar{4}$ 0	10	1.332	1.331	03 $\bar{3}$ 2
35	1.812	1.812	22 $\bar{4}$ 1	5	1.321	1.321	24 $\bar{6}$ 1
17	1.771	1.771	23 $\bar{5}$ 0				

мула — $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)(\text{OH})_3$. Ей отвечает состав: MgO 66.16, B_2O_3 19.05, H_2O 14.79, сумма 100.00 мас. %.

Сходимость между химическим составом, оптическими константами и плотностью хорошая: $1 - (K_p/K_c) = 0.038$ для $D_{\text{выч}}$; $1 - (K_p/K_c) = 0.044$ для $D_{\text{изм}}$.

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЕ И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ

Гидроксилборит кристаллизуется в гексагональной сингонии, пр. гр. $R\bar{6}_3/m$. Параметры элементарной ячейки, определенные из рентгенограммы порошка (табл. 3), равны: $a = 8.912$, $c = 3.112 \text{ \AA}$; $V = 214.05 \text{ \AA}^3$; $c/a = 0.3492$. $Z = 2$.

Волновые числа для максимумов полос поглощения в ИК-спектре равны (см^{-1} ; пл — плечо): 3668, 1233, 824, 742, 630 пл, 555 пл, 500 пл, 450 пл, 407 (рис. 3). От флюоборита гидроксилборит отличается более высокой интегральной интенсивностью ИК-спектральной полосы O—H -валентных колебаний (с максимумом при 3668 см^{-1}) и отсутствием четких максимумов поглощения в диапазоне $500\text{—}700 \text{ см}^{-1}$.

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Основные параметры эксперимента, результаты уточнения структуры и кристаллографические характеристики приведены в табл. 4. Заключительному фактору достоверности ($R_f = 0.054$) соответствуют координаты базисных атомов и межатомные расстояния, приведенные в табл. 5 и 6. Уточненное значение заселенности позиции $\text{O}(1)$, равное 0.52(2), предполагало статистическое заполнение данной позиции атомами O ($\sim 68\%$) и F ($\sim 32\%$). Соответственно данному соотношению кристаллохимическая формула гидроксилборита имеет вид $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)[(\text{OH})_{2.04}\text{F}_{0.96}]$ ($Z = 2$, $D_{\text{выч}} = 2.85 \text{ г/см}^3$). Решение структуры гидроксилборита подтвердило принадлежность минерала к структурному типу флюоборита $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)\text{F}_3$ (Takeuchi, 1950; Dal Negro, Tadipì, 1974), причем при одинаковой геометрии расположения атомов в структуре гидроксилборита и уточненной структуре флюоборита — $a = 8.86 \text{ \AA}$, $c = 3.10 \text{ \AA}$, $V = 211 \text{ \AA}^3$,

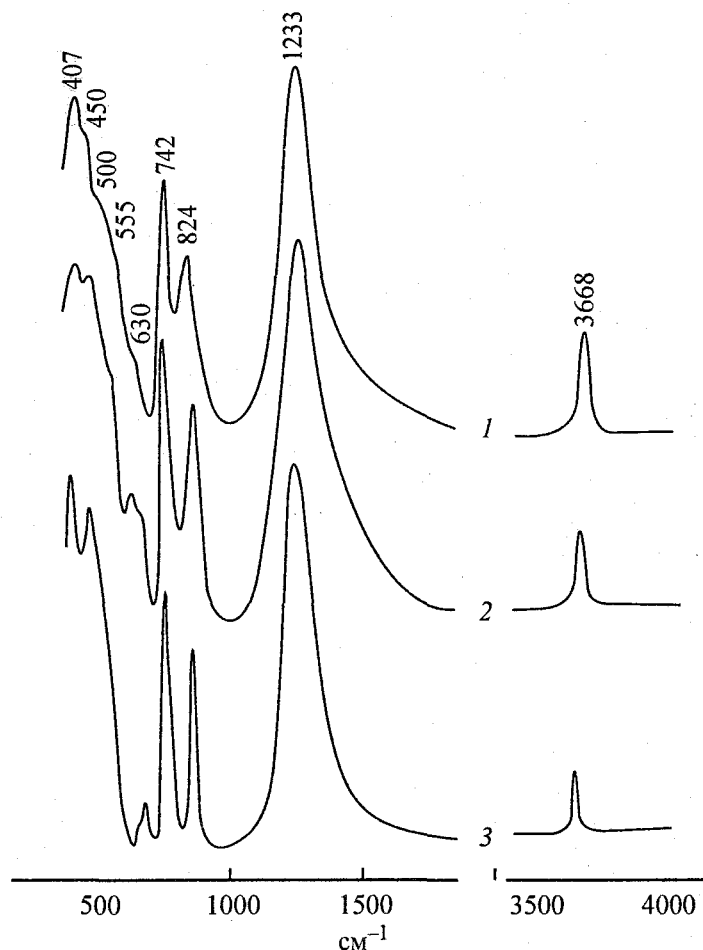


Рис. 3. ИК-спектр гидроксилборита, образец В-922 (1). Для сравнения приведены ИК-спектры флюоборита: образец из Пёла (Саксония, Германия) с 20.09 мас. % F (2) и образец из Бодена (около Франклина, Нью-Джерси, США) с 23.2 мас. % F (3).

Fig. 3. IR spectrum of hydroxylborite, sample B-922 (1); in comparison with IR spectra of fluoroborite from Pöhla (Saxony, Germany) with 20.09 wt % F (2) and from Boden (New Jersey, USA) with 23.2 wt % F (3).

пр. гр. $P6_3/m$ (Cámara, Ottolini, 2000) данные модели различаются выбором горизонтальных осей (X , Y , U) гексагональной элементарной ячейки. Переход от ячейки гидроксилборита к ячейке флюоборита отражается матрицей $(100/\bar{1}\bar{1}0/00\bar{1})$. Кроме того, в структуре гидроксилборита наблюдается преобладание ОН-групп в позиции О(1) (отношение F/ОН $\approx 0.3/0.7$). В структуре флюоборита в аналогичной позиции, по данным Ф. Камара и Л. Оттолини (Cámara, Ottolini, 2000), преобладает F (отношение F/ОН $\approx 0.8/0.2$). С уменьшением содержания F в структуре гидроксилборита связано увеличение значений расстояний Mg—O(1) до 1.998—2.039 Å и параметра a элементарной ячейки (8.924 Å) по сравнению с флюоборитом, где для двух изученных образцов минерала значения расстояний Mg—F(O₁) равны 1.9711—2.0115 Å и 1.9707—2.0115 Å, а параметров a — 8.8612 Å и 8.8602 Å. Параметры c , равные 3.116 Å в гидроксилборите и 3.1021 Å во флюоборите, а также значения расстояний В—О в В-треугольниках, равные 1.389 Å (гидроксилборит) и 1.389—1.387 Å (флюоборит), при замещении фтора ОН-группой изменяются в меньшей степени.

Основу структуры гидроксилборита, как и других родственных флюобориту соединений, составляют вытянутые вдоль оси c элементарной ячейки колонки, образованные из связанных по общим ребрам пар Mg-октаэдров и объединенные в трехмерный каркас со сквозными каналами двух типов: с шестиугольным и треугольным сечениями (рис. 4). В широких (пустых) каналах первого типа вокруг позиции (00z)

**Основные кристаллографические данные гидроксилборита
и характеристики эксперимента по уточнению структуры**

**Principal crystallographic data and parameters of experiment to refine
the crystal structure of hydroxylborite**

Характеристика	Формула и значение
Химическая формула	$\text{Mg}_3\text{BO}_3[(\text{OH})_{2.04}\text{F}_{0.96}]$
Сингония	Гексагональная
Пр. группа, Z	$P6_3/m, 2$
Параметры элементарной ячейки (Å):	
a	8.924(5)
c	3.116(1)
Объем элементарной ячейки, $V(\text{Å}^3)$	214.9(2)
$D_{\text{выч}}$ (г/см ³)	2.85
μ (мм ⁻¹)	0.67
Размеры кристалла (мм)	$0.075 \times 0.125 \times 0.300$
Дифрактометр	Р1 «SYNTEX»
Излучение, длина волны (Å)	$\text{MoK}_\alpha, 0.71069$
Метод сканирования	$2\theta : \theta$
Интервалы сканирования	$0 \leq h \leq 14$ $-14 \leq k \leq 12$ $0 \leq l \leq 6$
$\sin\theta/\lambda_{\text{макс}}$	0.99
Число зарегистрированных отражений	678
Число независимых отражений с $I \geq 2\sigma(I)$	238
$R_1/wR_2[I \geq 2\sigma(I)]$	0.054/0.115
Весовая схема в МНК (w)	$w = 1/[\delta^2(F^2) + (0.0742P)^2 + 0.00P]$, $P = (\max F_o^2 + 2F_c^2)/3$
s	0.974
$\Delta \rho_{\text{max}} (\text{eÅ}^{-3})/\Delta \rho_{\text{min}} (\text{eÅ}^{-3})$	1.23/—1.10
Число уточняемых параметров	33

Таблица 5

Координаты атомов и эквивалентные тепловые поправки для гидроксилборита

Coordinates of atoms and equivalent thermal parameters for hydroxylborite

Позиция	Кратность	x/a	y/b	z/c	$U_{\text{экв}} \times 100, \text{Å}^2$
Mg	6	0.3721(1)	0.3395(1)	0.25	1.00(4)
B	2	0.3333	0.6667	0.25	1.3(1)
O(1)	6	0.7924(3)	0.7053(3)	0.25	1.17(5)
O(2)	6	0.4462(3)	0.6020(3)	0.25	1.05(5)
H	6	0.90(1)	0.81(2)	0.25	5(3)

Примечание. 1. В скобках указаны стандартные отклонения. 2. Для позиции H приведено значение $U_{\text{изо}}$.

Межатомные расстояния в структуре гидроксилборита (Å)

Interatomic distances in the structure of hydroxylborite (Å)

Конфигурация	Расстояние	Конфигурация	Расстояние
Mg—O(1)*×2	2.039(2)	B—O(2)×3	1.389 (2)
O(1)**	1.998(3)	O(1)—H	0.95 (12)
O(2)*×2	2.117(2)	H—H	2.16 (12)
O(2)	2.092(3)		
	<2.067>		

Примечание. * $-x+1, -y+1, -z$; ** $-y+1, x-y, z$.

локализованы шесть связанных винтовой осью 6_3 атомов H, образующих OH-группы; в узких каналах второго типа вокруг позиций $(1/3 \ 2/3 \ z)$ и $(2/3 \ 1/2 \ -z)$ расположены BO_3 -треугольники. Кристаллохимический анализ родственных флюобориту ортотриборатов, диортосиликатов и цирконоборатов выявил их общую архитектурную основу — октаэдрический каркас с формулой $[\text{M}_9\text{X}_{18}]$ ($\text{M} = \text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Al}^{3+}$; $\text{X} = \text{O}^{2-}, \text{F}^-, \text{OH}^-$), различное заполнение узких каналов которого изолированными B-треугольниками, Si-диортогруппами или Zr-тригональными призмами создает разнообразие структурных типов среди указанных групп соединений (Белов, 1976; Moore, Araki, 1976; Ямнова и др., 1993).

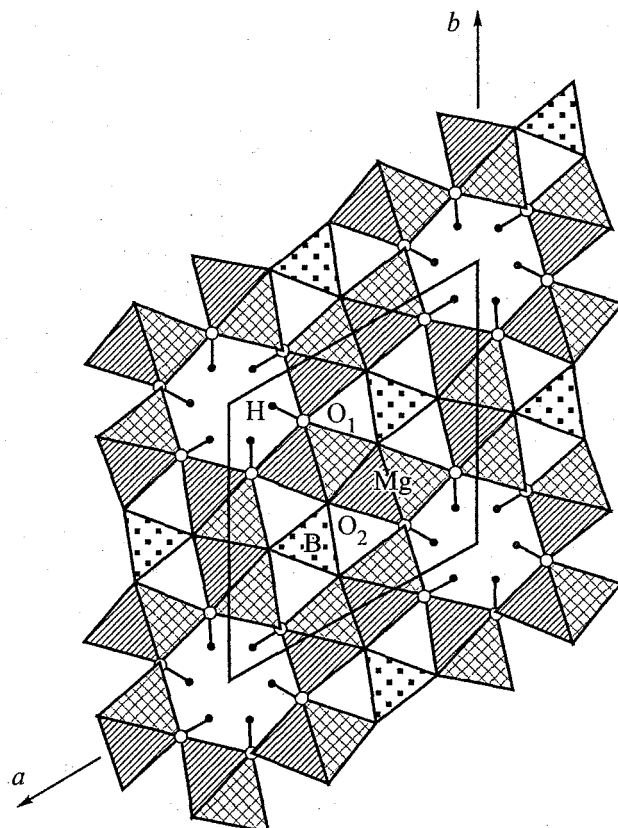


Рис. 4. Проекция структуры гидроксилборита вдоль $[001]$.

Жирными линиями показаны связи H—O₁.

Fig. 4. Projection of the hydroxylborite structure along $[001]$; bold lines show links H—O₁.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Анализ имеющихся опубликованных и оригинальных авторских данных изучения химического состава и свойств минералов флюоборит-гидроксилборитовой серии позволяет говорить о полной изоморфной смесимости между F и OH и наличии конечных членов с составами $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)\text{F}_3$ и $\text{Mg}_3(\text{BO}_3)(\text{OH})_3$.

Впервые установленные В. Т. Шаллером (Schaller, 1942) зависимости оптических констант и плотности минералов группы флюоборита от их химического состава под-

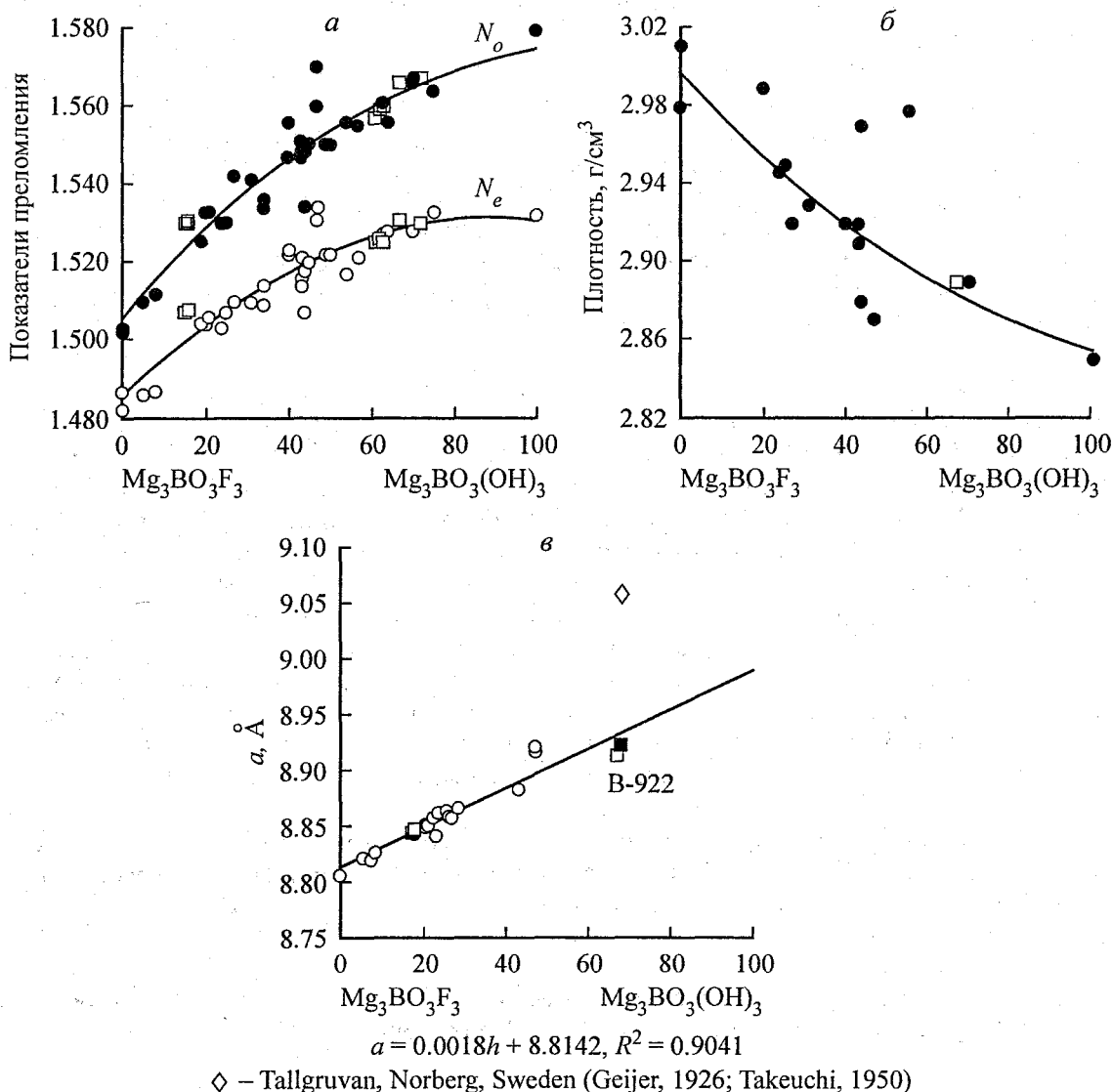


Рис. 5. Зависимость показателей преломления (а), плотности (б) и параметра a элементарной ячейки (в) минералов изоморфной серии флюоборит—гидроксилборит от их состава.

Круг — литературные данные: Schaller, 1942 ($h = 0$ и 100 мол. %, экстраполированные значения); Brisi, Eitel, 1957 (0 — синтез, 5, 8); Бровкин и др., 1967 (0 — синтез, 15, 20, 21, 31, 43, 47); Dal Negro, Tadini, 1974 (9); Лисицын и др., 1991 (18, 20, 22, 24); Гуляев, 1971 (19); Перцев, Никитина, 1959 (24); Johnston, Tilley, 1940 (25); Перцев, 1971 (27); Cámara, Ottolini, 2000 (28, 29); Граменицкий, 1966 (34, 43, 54, 75); Eskola, Juurinen, 1952 (34); Bauer, Berman, 1929 (40, 44); Попов, 1975 (40); Едовин, Утехин, 1962 (43); Сергеев и Новикова, 1969 (44); Ойдул, Кудрявцева, 1999 (45); Segnit, Lapcucki, 1963 (47); Tilley, 1951 (49, 64); Watanabe, 1939 (50); Утехин, 1960 (57); Gillson, Shannon, 1925 (63); Канищев, 1966 (70); Geijer, 1926 (70). Квадрат — наши данные (15, 16 — 2 обр., 61, 62, 63, 67, 72); знак без заливки (B-922) на рис. в — расчет рентгенограммы порошка, заливный — рентгеноструктурные исследования монокристалла.

Fig. 5. Dependence of refraction factors (a), density (б) and the unit cell a parameter (в) of minerals of the fluoborite-hydroxylborite isomorphous series on their composition.

тверждены на более обширном аналитическом материале (рис. 5, а, б). Выполненная в системе электронных таблиц Excel (среда Windows) аппроксимация экспериментальных данных³ полиномиальной линией тренда (в скобках указана величина достоверности сглаживания R^2) позволила получить уравнения для каждой зависимости: 1) для показателей преломления (рис. 5, а): $N_o — y = -6 \times 10^{-6} x^2 + 0.0012x + 1.5058$ ($R^2 = 0.9187$), $N_e — y = -6 \times 10^{-6} x^2 + 0.001x + 1.486$ ($R^2 = 0.8885$); 2) для плотности (рис. 5, б): $y = 9 \times 10^{-6} x^2 + 0.0023x + 2.9991$ ($R^2 = 0.7348$).

Период повторяемости по оси a при изоморфных замещениях, как это было показано ранее (Бровкин и др., 1967; Cámara, Ottolini, 2000), изменяется линейно.

Установлено значительное различие между параметрами элементарной ячейки для близких по составу гидроксилборитов из рудника Таллыгрюван [$a = 9.06$ Å при $h = 70$ % (Takeuchi, 1950)] и месторождения Титовское (обр. В-922, наши данные) [при $h = 67$ % $a = 8.912(8)$ Å] из расчета порошковой рентгенограммы и для монокристалла [$a = 8.924(5)$ Å]. Близкие значения параметра a , полученные независимыми методами, привели к решению использовать для аппроксимации данные по образцу В-922 и исключить из расчета данные для образца из Таллыгрювана. Возможно, повторное исследование состава и параметров ячейки фторгидроксильного бората из Швеции позволит установить причину расхождения с нашими результатами.

С учетом вышесказанного зависимость параметра a от состава боратов выражается уравнением: $y = 0.0018x + 8.8142$ ($R^2 = 0.9041$), где $y = a$, Å, $x = h$, мол. % (рис. 5, в).

Сравнение полученной линии тренда с аналогичной в публикации Ф. Камара и Л. Оттолини (Cámara, Ottolini, 2000, фиг. 2, а) показало, что линии пересекаются при значениях $h \approx 14—16$ % и значительно расходятся в области возрастающей гидроксильности боратов. Положение кривых во многом определяется точками, характеризующими ОН-доминантные составы. Причину расхождения кривых, кроме количества вовлеченных в расчеты данных (соответственно 24 и 9 точек), определяет то, что в цитируемой статье учитывались аналитические определения для образца из Норберга (по: Geijer, 1926; Takeuchi, 1950), исключенные в нашем варианте.

Для оперативной диагностики минералов рассматриваемой изоморфной серии следует отметить, что у членов изоморфного ряда с гидроксильностью больше 30 мол. % больший показатель преломления (N_o) всегда выше показателя преломления канадского бальзама (1.536), меньший показатель преломления (N_e) для всех составов не превышает показателя преломления канадского бальзама.

Эталонные образцы гидроксилборита переданы на хранение в Минералогический музей им. А. Е. Ферсмана РАН, инвентарный № 91968, и Геологический музей Всероссийского НИИ минерального сырья им. Н. М. Федоровского (ВИМС), инвентарный № М-1663.

Авторы выражают глубокую благодарность за помощь и заинтересованное обсуждение материалов статьи А. Е. Задову и Г. К. Кривоконевой.

Список литературы

- Александров С. М. Геохимия бора и олова в месторождениях магнезиально-скарновой формации. М.: Наука, 1982. 272 с.
- Аполлонов В. Н., Галкин Г. А., Кошуг Д. Г. и др. О борной минерализации в калиеносной пачке Непского месторождения // Геология и геофизика. 1988. № 3. С. 24—30.
- Белов Н. В. Очерки по структурной минералогии. М.: Недра, 1976. 344 с.

³ Значения гидроксильности рассчитывались по оригинальным данным, в первую очередь по химическому составу минералов. При отсутствии такового гидроксильность определялась на графиках В. Т. Шаллера (Schaller, 1942) по всем имеющимся показателям (N_o , N_e , D) и учитывалось среднее значение из установленных величин.

- Богомолов М. А., Никитина И. Б., Перцев Н. Н. Ольшанскит — новый борат кальция // Докл. АН СССР. 1969. Т. 184. № 6. С. 1398—1401.
- Бровкин А. А., Лазебник Ю. Д., Лебедева Л. И. Некоторые результаты изучения флюоборитов северо-востока СССР / Рентгенография минерал. сырья. М.: Недра. 1967. Вып. 6. С. 77—86.
- Вакар В. А., Книпович Э. В., Шафрановский И. И. Людвигит из Полярной Якутии // ЗВМО. 1934. Вып. 2. С. 381—385.
- Граменицкий Е. Н. Анализ парагенезисов флюоборита // Геология рудных месторождений. 1966. № 1. С. 16—32.
- Гуляев А. П. Флюоборит из аподоломитовых грейзенов (Казахстан) // ЗВМО. 1971. Вып. 5. С. 637—640.
- Дорофеев А. В. Бор. Верхояно-Инди́гирская провинция / Геология СССР. Т. XVIII. Якутская АССР, полезные ископаемые. М.: Недра, 1979. С. 335—342.
- Едовин Ю. И., Утехин Г. М. О флюоборите из Средней Азии // Докл. АН СССР. 1962. Т. 142. № 3. С. 674—676.
- Канищев А. Д. Находка флюоборита и людвигита в Центральном Забайкалье // ЗВМО. 1966. Вып. 2. С. 222—224.
- Лисицын А. Е., Малинко С. В., Руднев В. В. Бораты Питкяранты: распределение и состав // Минер. журн. 1991. № 1. С. 49—60.
- Лисицын А. Е., Дорофеев А. В., Руднев В. В., Боков А. А. Бороносность Верхояно-Инди́гирской рудной провинции // Руды и металлы. 1995. № 6. С. 16—29.
- Некрасов И. Я., Григорьев А. П., Григорьева Т. А. и др. Фторбораты магния (гл. 4) / Изучение высокотемпературных боратов. М.: Наука, 1970. С. 104—121.
- Ойду́п Ч. К., Кудрявцева А. И. О находке флюоборита в ультрабазитах Новоакхемского массива (Западная Тува) / Вопросы петрол., минерал., геохимии и геол. офиолитов. Новосибирск: Ин-т геол. СО РАН. Тувин. ин-т комплекс. освоения природ. ресурсов СО РАН, 1999. С. 146—149.
- Островская И. В., Перцев Н. Н., Никитина И. Б. Сахаит — новый карбонатоборат кальция и магния // ЗВМО. 1966. Вып. 2. С. 193—202.
- Перцев Н. Н. Парагенезисы борных минералов магнезиальных скарнов. М.: Наука, 1971. 193 с.
- Перцев Н. Н., Александров С. М. Людвигит с высоким содержанием глинозема // ЗВМО. 1964. Вып. 1. С. 13—20.
- Перцев Н. Н., Никитина И. Б. Флюоборит из Южной Якутии / Материалы по геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии. М.: Изд-во АН СССР, 1959. С. 308—310.
- Перцев Н. Н., Островская И. В., Никитина И. Б. Новый минерал — боркарит // ЗВМО. 1965. Вып. 2. С. 180—186.
- Попов В. С. Флюоборит / Минералы Узбекистана. Ташкент: Фан УзССР. 1975. Т. II. С. 149—150.
- Руднев В. В. Норденшюльдин и его цирконийсодержащая разновидность из Якутии // ЗВМО. 1998. № 3. С. 70—76.
- Сергеев А. Д., Новикова М. И. Флюоборит из оловорудного месторождения Забайкалья // ЗВМО. 1969. Вып. 5. С. 605—608.
- Утехин Г. М. Находка флюоборита в Восточном Забайкалье // ЗВМО. 1960. Вып. 6. С. 718—720.
- Ямнова Н. А., Сирп Х., Егоров-Тисменко Ю. К., Пуцаровский Д. Ю. Кристаллическая структура джаффита // Кристаллография. 1993. Т. 38. Вып. 5. С. 73—78.
- Ahlfeld F., Mosebach R., Öemichen H. Zinnervorkommen in der Provinz Huoan (China) // N. Jb. Miner., Geol., Paläont. 1938. B. 73. Hf. 3. Abt. A. S. 327—351.
- Bauer L. H., Berman H. Mooreite, a new mineral, and fluoborite from Sterling Hill, N. J. // Amer. Miner. 1929. Vol. 14. N 5. P. 165—172.
- Brisi C., Eitel W. Identity of nocerite and fluoborite // Amer. Miner. 1957. Vol. 42. N 3/4. P. 288—293.
- Cámara F., Ottolini L. New data on the crystal-chemistry of fluoborite by means of SREF, SIMS, and EMP analysis // Amer. Miner. 2000. Vol. 85. N 1. P. 103—107.
- Dal Negro A., Tadini C. Refinement of the crystal structure of fluoborite, $Mg_3(F, OH)_3(BO_3)$ // Tschermaks Miner. Petrogr. Mitt. 1974. Vol. 21. P. 94—100.
- Escola P., Juurinen A. Fluoborite from Pitkäranta // Bull. Commiss. Geol. Finland. 1952. N 157. P. 111—114.
- Flamini A., Graziani G., Pagliuca G. Synthesis of the fluorine end member of the fluoborite series // Amer. Miner. 1979. Vol. 64. N 2. P. 229—231.
- Geijer P. Norbergite and fluoborite, two new minerals from the Norberg mining district // Geol. Fören. I Stockholm Förhandl. 1926. Vol. 48. P. 84—85 (цитируется по: Bauer, Berman, 1929).
- Gillson S. L., Shannon E. V. Szaibelyite from Lincoln country, Nevada // Amer. Miner. 1925. Vol. 10. N 6. P. 137—139.
- Johnston R. W., Tilley C. E. On fluoborite from Selibin, Malaya // Geol. Mag. 1940. Vol. 77. N 2. P. 141.
- Kwak T. A. P., Nicholson M. Szaibelyite and fluoborite from the St Dizier Sn-borate skarn deposit, NW Tasmania, Australia // Miner. Mag. 1988. Vol. 52. P. 713—716.
- Marincea St. Fluoborite in magnesian skarns from Baita Bihor (Bihor Massif, Apuseni Mountains, Romania) // N. Jb. Miner. Mh. 2000. N 8. P. 357—371.

- Moore P. B., Araki T. Painite, $\text{CaZrB}[\text{Al}_9\text{O}_{18}]$: Its crystal structure and relation to jeremejevite, $\text{B}_5[\square_3\text{Al}_6(\text{OH})_3\text{O}_{15}]$, and fluoborite, $\text{B}_3[\text{Mg}_9(\text{F}, \text{OH})_9\text{O}_9]$ // Amer. Miner. 1976. Vol. 61. N 1/2. P. 88—94.
- Pertsev N. N., Schreyer W., Armbruster Th., Bernhardt H.-J., Medenbach O. Alumino-magnesioborite, a new member of the hulsite group, in kotoite marble from east of Verkhoyansk, Sacha-Yakutia, Russia // Eur. J. Miner. 2004. Vol. 16. P. 151—161.
- Schaller W. T. The identity of ascharite, camsellite and β -ascharite with szaibelyte and some relations of the magnesium borate minerals // Amer. Miner. 1942. Vol. 27. N 7. P. 467—486.
- Schreyer W., Armbruster Th., Bernhardt H.-J., Medenbach O. Pertsevite, a new silicatian magnesioborate mineral with an end-member composition $\text{Mg}_2\text{BO}_3\text{F}$ in kotoite marble from east of Verkhoyansk, Sacha-Yakutia, Russia // Eur. J. Miner. 2003. Vol. 15. P. 1007—1018.
- Segnit E. R., Lancucki C. J. Fluoborite from Crestmore, California // Amer. Miner. 1963. Vol. 48. N 5/6. P. 678—683.
- Sheldrick G. M. SHELX97: Program for the Solution and Refinement of Crystal Structures. Siemens Energy and Automation. Madison, WI, 1997.
- Šrein V., Št'astrný M., Langrová A., Hloušek J. Hulsite, szaibelyite and fluoborite from borate skarn of Zlatý Kopec tin deposit, NW Bohemia, Czech Republic // Acta Montana I RSM AS CR. 2000. Series A. N 17 (119). P. 51—56.
- Takeuchi Y. The structure of fluoborite // Acta Crystallogr. 1950. Vol. 3. Pt 3. P. 208—210.
- Tilley C. E. The zoned contact-skarns of the Broadford area, Skye: a study of boron-fluorine metasomatism in dolomites // Miner. Mag. 1951. Vol. 29. N 214. P. 621—666.
- Watanabe T. Kotoit, ein neues gesteinsbildendes magnesium Borat // Z. Kristallogr., Miner., Petrogr. Mitt. 1939. Abt. B. Bd 50. N 6. S. 441—463.

Поступила в редакцию
10 августа 2006 г.

УДК 549.643 + 548.

ЗРМО, № 1, 2007 г.
Zapiski RMO, N 1, 2007

© Д. чл. Н. В. ЧУКАНОВ, * д. чл. Р. К. РАСТВЕТАЕВА, ** д. чл. И. В. ПЕКОВ, *** А. Е. ЗАДОВ****

АЛЛОРИИТ $\text{Na}_5\text{K}_{1.5}\text{Ca}(\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)(\text{OH})_{0.5} \cdot \text{H}_2\text{O}$ — НОВЫЙ МИНЕРАЛ ГРУППЫ КАНКРИНИТА¹

N. V. CHUKANOV, R. K. RASTSVETAeva, I. V. PEKOV, A. E. ZADOV.

ALLORIITE, $\text{Na}_5\text{K}_{1.5}\text{Ca}(\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24})(\text{SO}_4)(\text{OH})_{0.5} \cdot \text{H}_2\text{O}$, A NEW MINERAL OF THE CANCRINITE GROUP

* Институт проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл., г. Черноголовка

** Институт кристаллографии РАН, 117333, Москва, Ленинский пр., 59

*** Московский государственный университет, 119899, Москва, Воробьевы горы

**** НПО «Регенератор», 127018, Москва, 3-й проезд Марьиной Рощи, д. 40

A new mineral alloriite has been found in volcanic ejectum at Cavalluccio Mt (Campagnano municipality, Roma province, Latium region, Italy), in association with sanidine, biotite, andradite, apatite. The mineral is named for an amateur mineralogist and prominent mineral collector Roberto Allori (b. 1933) who carried out extensive and detailed field mineralogical investigations of volcanogenic localities in the Latium region. Alloriite forms short-prismatic and tabular crystals up to 1.5×2 mm in size. Transparent, colorless or pale-violet; streak is white, luster vitreous. Non-fluorescent, brittle, Mohs' hardness 5; imperfect cleavage on $\{10\bar{1}0\}$. $D_{\text{meas}} = 2.35 \text{ g/cm}^3$ (by equilibration in heavy liquids). Calculated density is 2.358 g/cm^3 (with single-crystal data) and 2.333 g/cm^3 (with powder data). Uniaxial, positive, $\omega = 1.497(2)$, $\epsilon = 1.499(2)$. IR spectrum is given. Chemical composition (electron microprobe, water — by Penfield method, CO_2 — by selection sorption, wt %): Na_2O 13.55, K_2O 6.67, CaO 6.23, Al_2O_3 26.45, SiO_2 34.64, SO_3 8.92, Cl 0.37, H_2O 2.1, CO_2 0.7, $-\text{O} = \text{Cl} - 0.08$, total 99.55. Empirical formula ($Z = 1$) is: $\text{Na}_{19.16}\text{K}_{6.21}\text{Ca}_4.87(\text{Si}_{25.26}\text{Al}_{22.74}\text{O}_{96})(\text{SO}_4)_{4.88}(\text{CO}_3)_{0.70}\text{Cl}_{0.46}(\text{OH})_{0.76} \cdot 4.73\text{H}_2\text{O}$. Simplified formula (taking into account structural data, $Z = 4$) is: $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})][\text{Na}_4\text{K}_{1.5}(\text{SO}_4)] \cdot [\text{Ca}(\text{OH}, \text{Cl})_{0.5}](\text{Si}_6\text{Al}_6\text{O}_{24})$. The crystal structure has been studied ($R = 0.052$). Alloriite is trigonal, space group $P31c$, $a = 12.892(3) \text{ \AA}$, $c = 21.340(5) \text{ \AA}$, $V = 3071.6(15) \text{ \AA}^3$. The crystal structure of alloriite is based on the same tetrahedral framework as that of afghanite. Unlike afghanite containing $[\text{Ca}-\text{Cl}]^+$ clusters and the chains

¹ Новый минерал аллориит и его название рассмотрены Комиссией по новым минералам и названиям минералов РМО 8 мая 2006 г. и утверждены Комиссией по новым минералам и названиям минералов Международной минералогической ассоциации 2 августа 2006 г.