*Moore P. B., Araki T.* Painite, CaZrB[Al<sub>9</sub>O<sub>18</sub>]: Its crystal structure and relation to jeremejevite,  $B_5[\Box_3Al_6(OH)_3O_{15}]$ , and fluoborite,  $B_3[Mg_9(F,OH)_9O_9] / / Amer. Miner. 1976. Vol. 61. N 1/2. P. 88–94.$ 

Pertsev N. N., Schreyer W., Armbruster Th., Bernhardt H.-J., Medenbach O. Alumino-magnesiohulsite, 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  $\beta$ -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 Mg<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>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'astný M., Langrová A., Hloušek J.* Hulsite, szaibelyite and fluoborite from borate skarn of Zlatý Kopec tin deposit, NW Bohemia, Czech Republic // Acta Montana IRSM 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 gesteinbildendes 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.

2

3РМО, № 1, 2007 г. Zapiski RMO, N 1, 2007

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

## АЛЛОРИИТ Na<sub>5</sub>K<sub>1.5</sub>Ca(Si<sub>6</sub>Al<sub>6</sub>O<sub>24</sub>)(SO<sub>4</sub>)(OH)<sub>0.5</sub> · H<sub>2</sub>O — НОВЫЙ МИНЕРАЛ ГРУППЫ КАНКРИНИТА<sup>1</sup>

N. V. CHUKANOV, R. K. RASTSVETAEVA, I. V. PEKOV, A. E. ZADOV. ALLORIITE,  $Na_5K_{1.5}Ca(Si_6Al_6O_{24})(SO_4)(OH)_{0.5} \cdot H_2O$ , 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  $1.5 \times 2$  mm in size. Transparent, colorless or pale-violet; streak is white, luster vitreous. Non-fluorescent, brittle, Mohs' hardness 5; imperfect cleavage on {1010}.  $D_{meas} =$ = 2.35 g/cm<sup>3</sup> (by equilibration in heavy liquids). Calculated density is 2.358 g/cm<sup>3</sup> (with single-crystal data) and 2.333 g/cm<sup>3</sup> (with powder data). Uniaxial, positive,  $\omega = 1.497(2)$ ,  $\varepsilon = 1.499(2)$ . IR spectrum is given. Chemical composition (electron microprobe, water — by Penfield method, CO<sub>2</sub> — by selection sorption, wt %): Na<sub>2</sub>O 13.55, K<sub>2</sub>O 6.67, CaO 6.23, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 26.45, SiO<sub>2</sub> 34.64, SO<sub>3</sub> 8.92, Cl 0.37, H<sub>2</sub>O 2.1, CO<sub>2</sub> 0.7,  $-O = Cl_2 - 0.08$ , total 99.55. Empirical formula (Z = 1) is: Na<sub>19.16</sub>K<sub>6.21</sub>Ca<sub>4.87</sub>(Si<sub>25.26</sub>Al<sub>22.74</sub>O<sub>96</sub>)(SO<sub>4</sub>)<sub>4.88</sub>(CO<sub>3</sub>)<sub>0.70</sub>Cl<sub>0.46</sub>(OH)<sub>0.76</sub> · 4.73H<sub>2</sub>O. Simplified formula (taking into account structural data, Z = 4) is: [Na(H<sub>2</sub>O)][Na<sub>4</sub>K<sub>1.5</sub>(SO<sub>4</sub>)] · [Ca(OH,Cl)<sub>0.5</sub>](Si<sub>6</sub>Al<sub>6</sub>O<sub>24</sub>). The crystal structure has been studied (R = 0.052). Alloriite is trigonal, space group P31c, a = 12.892(3) Å, c = 21.340(5) Å, V = 3071.6(15) Å<sup>3</sup>. The crystal structure of alloriite is based on the same tetrahedral framework as that of afghanite. Unlike afghanite containing [Ca—Cl]<sup>+</sup> clusters and the chains

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> 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.



Рис. 1. Кристаллы аллориита. Fig. 1. Crystals of alloriite.

...Ca—Cl—Ca—Cl..., alloritic contains  $[Na – H_2O]^+$  clusters and the chains ...—Na—H<sub>2</sub>O—Na—H<sub>2</sub>O—... The strongest lines of the powder diffraction pattern [*d*, Å (*l*, %) (*hkl*)] are: 11.3 (70)(100), 4.85 (90)(104), 3.76 (80)(300), 3.68 (70)(301), 3.33 (100)(214), 2.694 (70)(314, 008). Holotype material is deposited in the Fersman Mineralogical Museum of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia; the registration number 3459/1.

Новый минерал из группы канкринита установлен в образце с ЮЮВ склона горы Монте Каваллуччио, расположенной в северной части кальдеры вулкана Сакрофано (предполагаемое время последнего извержения 400—500 тыс. лет назад), входящего в состав вулканического комплекса Сабатино, Лацио, Италия. Он был найден и передан для изучения группе российских исследователей известным итальянским минералогом-любителем и коллекционером Роберто Аллори. В его честь этот новый минерал получил название **аллориит**. Р. Аллори (р. 1933) внес значительный вклад в полевые исследования и документацию вулканогенных комплексов Лацио. Эти работы проводятся им с 1960 года по настоящее время, и во многом на основе их результатов создана база данных по минералогии этого региона. Результаты наблюдений Р. Аллори и собранные им образцы горных пород и минералов широко использовались для проводившихся в Римском университете научных исследований, в ходе которых, в частности, были открыты два новых минеральных вида — уиллхендерсонит и пьергорит.

Образец с новым минералом представляет собой сложенную санидиновым сиенитом вулканическую бомбу шаровидной формы, имеющую диаметр около 4.5 см. В состав породы кроме санидина входят небольшие количества биотита, андрадита и апатита. Аллориит образует прозрачные бесцветные и бледно-фиолетовые кристаллы размером до 1.5 × 2 мм, нарастающие на стенки мелких миароловых полостей (рис. 1).

Кристаллы аллориита имеют гексагональный габитус, короткопризматические, изометричные или уплощенные по пинакоиду {0001}; образованы простыми формами {0001}, {1010}, {1013}, {1014}, {1120}. Минерал хрупкий, обладает несовершенной спайностью по {1010}, излом раковистый. Твердость по шкале Мооса 5. Плотность аллориита, измеренная методом уравновешивания в тяжелых жидкостях, равна 2.35(1) г/см<sup>3</sup>. Вычисленные значения плотности составляют 2.358 г/см<sup>3</sup> (из структурных данных) и 2.333 г/см<sup>3</sup> (из эмпирической формулы и параметров ячейки, рассчитанных из порошкограммы).



Рис. 2. ИК-спектры афганита из Ляджвардаринского месторождения лазурита (Памир, Таджикистан) (1) и аллориита с горы Монте Каваллуччио (Лацио, Италия) (2).

Fig. 2. IR spectra of afghanite from the Ladjvardara lazurite deposit, the Pamirs, Tadjikistan (1) and allorite from Cavalluccio Mt., Latium, Italy (2).

Волновые числа полос ИК-спектра равны (см<sup>-1</sup>; sh — плечо; волновые числа наиболее сильных полос подчеркнуты; рис. 2): 3660sh (О—Н-валентные колебания групп OH<sup>-</sup>?); 3500, 3430 (О—Н валентные колебания молекул H<sub>2</sub>O); 1630 (деформационные колебания молекул H<sub>2</sub>O); 1490, 1463 (валентные колебания ионов CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>); 1185sh, <u>1123</u> (валентные колебания ионов SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>); 1105sh, <u>1006</u> (валентные колебания тетраэдрического каркаса); 750sh, 710sh (внутриплоскостные деформационные колебания ионов CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>?), 670, 646, 619, 596, 543 (деформационные колебания ионов SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> и тетраэдрического каркаса), <u>445</u>, 425sh (деформационные колебания Si—O—Si). По положениям большинства полос ИК-спектр аллориита близок к спектру афганита (см.: Ballirano e. a., 1996), отличаясь от последнего главным образом наличием довольно сильных полос молекул H<sub>2</sub>O и групп CO<sub>3</sub>, а также иным соотношением интенсивностей полос. Важным отличительным признаком аллориита является отсутствие в его ИК-спектре полосы при 685 см<sup>-1</sup>, которая является характеристической для афганита как из вулканогенных формаций, так и из скарновых лазуритовых месторождений.

Микроскопические исследования установили, что новый минерал оптически одноосный, положительный. Показатели преломления:  $n_o = 1.497(2)$ ,  $n_e = 1.499(2)$ . Аллориит микроскопически бесцветен, плеохроизма не наблюдается.

Химический состав аллориита был изучен методом рентгеноспектрального анализа (среднее из 5 локальных анализов) (табл. 1). Вода определена методом Пенфильда. Содержание CO<sub>2</sub> определено методом селективной сорбции на аскаритовом сорбенте из газообразных продуктов прокалки в токе кислорода при температуре 1000 °C и атмосферном давлении.

Эмпирическая формула, рассчитанная на (Si, Al)<sub>48</sub> (Z = 1) с учетом правила баланса зарядов, имеет вид Na<sub>19.16</sub>K<sub>6.21</sub>Ca<sub>4.87</sub>(Si<sub>25.26</sub>Al<sub>22.74</sub>O<sub>96</sub>)(SO<sub>4</sub>)<sub>4.88</sub>(CO<sub>3</sub>)<sub>0.70</sub>Cl<sub>0.46</sub>(OH)<sub>0.76</sub> · 4.73H<sub>2</sub>O. Упрощенная формула при Z = 4 может быть записана в виде [Na(H<sub>2</sub>O)][Na<sub>4</sub> · K<sub>1.5</sub>(SO<sub>4</sub>)][Ca(OH,Cl)<sub>0.5</sub>](Si<sub>6</sub>Al<sub>6</sub>O<sub>24</sub>). В последней формуле атомы сгруппированы с учетом структурных данных (см. ниже).

Идеализированная формула аллориита — Na<sub>5</sub>K<sub>1.5</sub>Ca(Si<sub>6</sub>Al<sub>6</sub>O<sub>24</sub>)(SO<sub>4</sub>)(OH)<sub>0.5</sub> · H<sub>2</sub>O. Ей соответствует химический состав Na<sub>2</sub>O 14.75, K<sub>2</sub>O 6.72, CaO 5.34, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 29.11, SiO<sub>2</sub> 34.31, SO<sub>3</sub> 7.62, H<sub>2</sub>O 2.14; сумма 99.99 мас. %.

Компонент	Содержание, мас. %	Пределы содержаний	Среднеквадратичное отклонение	Эталон
Na <sub>2</sub> O	13.55	12.76—14.27	0.65	Альбит
K <sub>2</sub> O	6.67	6.20-7.04	0.3	Микроклин
CaO	6.23	5.42-7.01	0.6	Волластонит
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	26.45	26.08-26.93	0.3	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
SiO <sub>2</sub>	34.64	34.26-35.15	0.3	SiO <sub>2</sub>
$SO_3$	8.92	8.30-9.92	0.6	FeS <sub>2</sub>
Cl	0.37	0.15—0.64	0.2	NaCl
H <sub>2</sub> O	$2.1 \pm 0.2$			
CO <sub>2</sub>	$0.7 \pm 0.1$			
$-O=Cl_2$	-0.08			
Сумма	99.55			

Химический состав аллориита

Chemical composition of alloriite

Примечание. Содержания Mg, Mn, Fe, Sr, Ba, Pb, P, F — ниже порогов обнаружения (т. е. <0.05—0.3 мас. %).

Кристаллическая структура аллориита изучена на монокристалле (автодифрактометр ENRAF-NONIUS, Мо-излучение, 3040 рефлексов с F > 6sF) до R = 0.052. Минерал тригональный, пространственная группа P31c. Параметры элементарной ячейки: a = 12.892(3), c = 21.340(5) Å; V = 3071.6(15) Å<sup>3</sup>.

В основе структуры аллориита (рис. 3, 4) лежит тетраэдрический каркас, аналогичный каркасу афганита (Победимская и др., 1991; Расцветаева и др., 1993; Ballirano e. a., 1997) и имеющий состав Si<sub>6.65</sub>Al<sub>5.35</sub>O<sub>24</sub>, с упорядоченным распределением кремния и алюминия. Рефлексы словвых линий, кратных 4, сильнее остальных. Это зна-

чит, что период аллориита, как и афганита, кратен периоду канкринита. Из четырех независимых позиций алюминия три имеют средние расстояния Al—O от 1.718 до 1.731 Å, а четвертый — 1.702 Å, что косвенно свидетельствует о замещении в последнем тетраэдре части Al на Si. Каркас аллориита и афганита характеризуется последовательностью тетраэдрических слоев типа *ABABACAC* и содержит каналы двух типов — широкие и узкие.

Каналы первого типа, вытянутые вдоль осей 3-го порядка ( $1/3 \ 2/3 \ z$ ) и ( $2/3 \ 1/3 \ z$ ), состоят из чередующихся крупных (лиоттитового типа) и меньших (канкринитового типа) полостей. Полости разделены сужениями каналов в местах пересечения последних тетраэдрическими слоями типа *C* (Ballirano e. a., 1997). Полость лиоттитового типа *ABABAC* 

Рис. 3. Фрагмент афганитоподобного каркаса аллориита.

Fig. 3. Fragment of the afghanite-type framework of alloriite.





Рис. 4. Узкий канкринитовый канал в афганите (*a*) и аллориите (*б*). Fig. 4. Narrow cancrinite-type channel in afghanite (*a*) and in alloriite (*б*).

может вмещать до трех групп SO<sub>4</sub>. В аллориите часть групп SO<sub>4</sub> замещена карбонатными группами, содержание которых составляет  $0.3CO_3$  в каждой лиоттитовой полости. Канкринитовые полости *AC* могут содержать кластеры [Ca · Cl]<sup>+</sup> (в давине, микросоммите, квадридавине и афганите) или кластеры [Na · H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> (в канкрините, вишневите, питильяноите и аллориите). Таким образом, одной из отличительных черт аллориита (по сравнению с афганитом) является преобладание групп OH над Cl в малых (канкринитового типа) полостях широких каналов. Состав этих полостей Ca<sub>4</sub>Cl<sub>2</sub> для афганита (Ballirano e. a., 1997) и Ca<sub>4</sub>(OH)<sub>1.66</sub>Cl<sub>0.34</sub> для аллориита (наши данные). Позиция Cl надежно фиксируется на оси 3-го порядка в канкринитовой полости с заселенностью 0.2. Ее дополняет позиция O вокруг оси.

Каналы второго типа [узкие, вытянутые вдоль осей 3-го порядка (00*z*)] образованы последовательностью канкритовых полостей. В афганите часть кальция и хлора нахо-

Таблица 2

### Некоторые сравнительные данные для сульфатных минералов группы канкринита\*

	-		
Последовательность тетраэдрических слоев	a, Å b, Å	Минералы с цепочкой —Са—Сl—Са—Cl— в канкринитовом канале	Минералы с цепочкой —Na—H <sub>2</sub> O—Na—H <sub>2</sub> O— в канкринитовом канале
AB	12.7—13.0	Давин	Вишневит
AB	5.3—5.4 22.1—22.2	Микросоммит	Питильяноит
ABABACAC	5.2—5.3 12.8—12.9 21.3—21.5	Афганит	Аллориит

#### Selected comparative data for sulfate cancrinite-group minerals

Примечание. \* В таблицу включены только минералы, содержащие полости канкринитового и лиоттитового типов (и их комбинации) (см.: Победимская и др., 1991; Ballirano e. a., 1996, 1997; Bonaccorsi, Merlino, 2005; Della Ventura e. a., 2005).

# Результаты расчета порошкограммы аллориита

# X-ray powder diffraction data for alloriite

I <sub>изм</sub> , %	<i>D</i> <sub>ИЗМ</sub> , Å	<i>D</i> <sub>выч</sub> , Å	hkl
70	11.3	11.21	100
20	10.7	10.705	002
30	6.53	6.470	110
20	6.03	6.019	103
40	5 35	5.421	201
90	4.85	4.830	104
20	4.36	4.407	203
40	4.15	4.155	211
60	4.03	4.000	105
80	3.76	3,736	300
70	3.68	3.680	301
100	3.33	3.321	214
50	3.096	3, 125, 3, 108, 3,097, 3,076	116, 310, 222, 311
40	2.970	2.985, 2.951	312, 107
30	2.855	2.850	313
60	2.795	2.802, 2.778, 2.769	400, 40 1, 224
70	2.694	2.688, 2.676	314,008
30	2.626	2.608	403
10	2.528	2.515	315
40	2.488	2.482	404
20	2.390	2.397, 2.384	226, 412
60	2.165	2.176, 2.157	308, 330
30	2.070	2.074, 2.066, 2.062	219, 407, 228
20	2.010	2.017, 2.000	510, 334
40	1.941	1.935	408
30	1.890	1.889, 1.884	319, 514
50	1.812	1.813, 1.805	409, 418
30	1.766	1.769, 1.763, 1.763, 1.762	2.1.11, 604, 3.1.10, 1.0.12
30	1.745	1.746, 1.742	329, 434
30	1.647	1.655, 1.655, 1.644	525,606,2.1.12
30	1.619	1.618	440
10	1.564	1.562, 1.562, 1.562	2.2.12, 533, 703
10	1.551	1.554, 1.552, 1.550, 1.548, 1.547	620, 3.2.11, 621, 444, 3.1.12
30	1.532	1.534, 1.534, 1.532	534, 704, 608
20	1.506	1.505	4.0.12
50	1.386	1.384	448
50	1.357	1.355	804
20	1.339	1.338	0.0.16
20	1.311	1.310	1.1.16
30	1.299	1.298	718
10	1.283	1.282	4.3.12
10	1.275	1.274, 1.274, 1.272	814, 807, 4.0.15
40	1.248	1.254, 1.249, 1.248, 1.245	815, 638, 3.2.15, 900

### Таблица 4

### Сравнительные данные для аллориита и афганита

Comparative data for alloriite and afghanite

Минерал	Аллорнит	Афганит	
Формула	$Na_2K_{1.5}Ca(Si_6Al_6O_{24})$ (SO <sub>4</sub> )(OH) <sub>0.5</sub> ·H <sub>2</sub> O	(Na,K) <sub>5.5</sub> Ca <sub>2.5</sub> (Si <sub>6</sub> A1 <sub>6</sub> O <sub>24</sub> ) (SO <sub>4</sub> ) <sub>1.5</sub> Cl <sub>1.5</sub>	
Симметрия	Тригональный	Тригональный или гексагональный	
Пространственная группа	P31c	Р31с или Р6 <sub>3</sub> тс	
a, Å	12.892	12.77—12.88	
<i>c</i> , Å	21.340	21.35—21.46	
<i>V</i> , Å <sup>3</sup>	3072.1	3015—3086	
Z	4	4	
Сильные линии рентгенограммы порошка: d, Å (I, %)	11.3 (100), 4.85 (90), 4.03 (60), 3.76 (80), 3.68 (70), 3.33 (100), 2.795 (60), 2.694 (70), 2.165 (60)	4. 8257 (30), 3.9993 (12), 3.6943 (100), 3.3009 (56), 2.7495 (12), 2.6775 (25), 2.1339 (18)	
Волновые числа сильных (по интегральным интенсивностям) полос ИК-спсктра, см <sup>-1</sup> *	<u>3500, 3430,</u> 1123, 1006, 619, 596, 543, 445	1121, 1004, <u>685, 667</u> , 613, 595, 542, 430	
Оптические данные			
ω	1.497	1.522—1.528	
з	1.499	1.528—1.533	
Плотность, г/см <sup>3</sup>	<ul> <li>2.358 (вычислена из структурных данных)</li> <li>2.334 (вычислена из эмпирической формулы и параметров ячейки, уточненных по порошкограмме)</li> <li>2.35 (измерена)</li> </ul>	2.65 (вычислена) 2.55 (измерена)	
Ссылки	Настоящая работа	Bariand e. a., 1968; Победимская и др., 1991; Расцветасва и др., 1993; Ballirano e. a., 1994, 1996, 1997; Bonaccorsi, Merlino, 2005	

Примечание. \* Подчеркнуты волновые числа диагностических полос.

дится внутри этих каналов, образуя цепочки ...Ca—Cl—Ca—Cl... В аллориите же в узких каналах находятся водно-натриевые цепочки (идеализированно —...—Na— H<sub>2</sub>O-\_Na—H<sub>2</sub>O—...). Небольшая часть натрия в узких каналах замещена кальцием, поэтому точный состав последних цепочек описывается формулой [(Na<sub>3.54</sub>Ca<sub>0.46</sub>)· (H<sub>2</sub>O)<sub>3.5</sub>(OH)<sub>0.5</sub>]. Таким образом, второе (и важнейшее) различие между аллориитом и афганитом аналогично различиям между другими парами родственных минералов группы канкринита: давином (с цепочками ...Ca—Cl—Ca—Cl...) и членами ряда канкринит—вишневит (с цепочками ...\_Na—H<sub>2</sub>O—Na—H<sub>2</sub>O—...), а также между микросоммитом (с цепочками ...\_Ca—Cl—Ca—Cl...) и питильяноитом (с цепочками ...\_Na—H<sub>2</sub>O—Na—H<sub>2</sub>O—...) (табл. 2).

В колонке канкринитовых полостей, как и в канкринитовых полостях широких каналов, фиксируется расщепление позиции кислорода на две — на оси и вокруг нее. При аппроксимации О-позиций на оси ОН-группами, а вокруг оси — молекулами H<sub>2</sub>O учитывалось то обстоятельство, что ОН-группы сопоставимы по размеру с атомами Cl и, следовательно, могут разместиться на оси, в то время как молекулы воды значительно крупнее и имеют тенденцию к распределению вокруг оси, как это неоднократно наблюдалось, например, в структуре эвдиалитов. Избыток положительных зарядов требует замены H<sub>2</sub>O на OH, однако преобладание Si над Al делает невозможным замену каркасных атомов О на группы OH, так как в этом случае требовалось бы допустить существование фрагментов каркаса Si—OH—Si, нарушающих критерий локального баланса зарядов. Кроме того, ИК-спектр аллориита не содержит полос кислотных групп Si—OH (диапазон 1800—3200 см<sup>-1</sup>).

Дебаеграмма аллориита (табл. 3) получена в камере РКГ-86 на Fe-излучении. Параметры элементарной ячейки, уточненные из порошкограммы, равны: a = 12.940(2) Å, c = 21.409(5) Å; V = 3104.5(20) Å<sup>3</sup>.

Сравнительные характеристики аллориита и афганита приведены в табл. 4. Как видно в таблице, эти минералы существенно различаются не только по химическому составу, но и по физическим свойствам (ИК-спектрам, показателям преломления и плотности).

Корректность определений химического состава, показателей преломления и плотности аллориита подтверждается хорошей сходимостью по критерию Гладстоуна-Дейла:  $1 - K_p/K_c = -0.033$  для  $D_{\text{изм}}$ ;  $1 - K_p/K_c = -0.041$  для  $D_{\text{выч}}$  (из эмпирической формулы и порошкограммы);  $1 - K_p/K_c = -0.029$  для  $D_{\text{нич}}$  (из структурных данных).

Эталонный образец аллориита передан в Минералогический музей им. А. Е. Ферсмана РАН в Москве, рег. 3459/1.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 06-05-64024-а).

#### Список литературы

Победимская Е. А., Расцветаева Р. К., Терентьева Л. Е., Сапожников А. Н. Кристаллическая структура афганита // Докл. АН СССР. 1991. Т. 320. № 4. С. 882—886.

Расцветаева Р. К., Победимская Е. А., Терентьева Л. Е., Сапожников А. Н. Структурные особенности афганита и его место среди минералов группы канкринита // Кристаллография. 1993. Т. 38. Вып. 2. С. 94—103.

Ballirano P., Maras A., Buseck P. R., Wang S., Yates A. M. Improved powder X-ray data for cancrinites: I. Afghanite // Powder Diffraction. **1994**. Vol. 9. N 1. P. 68—73.

Ballirano P., Maras A., Buseck P. R. Crystal chemistry and IR spectroscopy of CI- and SO<sub>4</sub>-bearing cancrinite-like minerals // Amer. Miner. **1996**. Vol. 81. P. 1003–1012.

Ballirano P., Bonaccorsi E., Maras A., Merlino S. Crystal structure of afghanite, the eightlayer member of the cancrinite group: evidence for long-range Si, Al ordering // Eur. J. Miner. 1997. Vol. 9. P. 21-30.

Bariand P., Cesbron F., Giraud R. Une nouvelle espèce minérale: l'afghanite de Sar-e-Sang, Badakhshan, Afghanistan. Comparison avec les minéraux du groupe de la cancrinite # Bull. Soc. Franc. Miner. Gristallogr. **1968**. Vol. 91. P. 34–42.

Bonaccorsi E., Merlino S. Modular microporous minerals: Cancrinite-Davyne Group and C—S—HPhases // Reviews in Mineralogy and Geochemistry. 2005. Vol. 57. P. 241–290.

Della Ventura G., Bellatreccia F., Bonaccorsi E. CO<sub>2</sub> in minerals of the cancrinite-sodalite group: pitiglianoite # Eur. J. Miner. 2005. Vol. 17. P. 847–851.

> Поступила в редакцию 3 сентября 2006 г.

> > 89