

А. А. КАШАЕВ

О КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ КИМРИТА

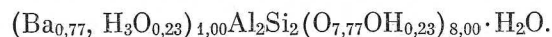
(Представлено академиком Н. В. Беловым 17 II 1966)

Кимрит как новый минерал был установлен в 1949 г. ⁽¹⁾. На основании результатов химического анализа навески 7 мг с учетом размеров элементарной ячейки была предложена формула $BaAlSi_3O_8(OH)$.

В Советском Союзе кимрит был найден только в Прибайкалье А. М. Пауллер (Иркутское геологическое управление) и исследован автором. Параметры ячейки минерала оказались близки к приведенным в ⁽¹⁾, $a = 5,324 \pm 0,005$, $c = 7,662 \pm 0,005$ Å, дифракционная симметрия $R\bar{6}/m\bar{3}m$. Структура не имеет центра симметрии, так как кристаллы обнаруживают отчетливый пьезоэффект. На рентгенограммах наблюдаются слабые рефлексы, соответствующие периоду $8a = 42,6$ Å, что ранее тоже отмечалось ⁽¹⁾. Рефлексы располагаются на плоскостях обратной решетки, перпендикулярных оси c , и имеют индексы: $8n$, $8n \pm 1$, l ; $8n \pm 1,8n$, l ; $8n \pm 1,8n - 1$, l ; $8n - 1,8n + 1$, l .

По разверткам нулевых слоевых линий были построены проекции функции межатомных расстояний. Проекция вдоль оси a представлена на рис. 1. На основании анализа расположения пиков на проекциях была предположена модель структуры кимрита из непрерывных сдвоенных алюмокремнекислородных тетраэдров с расположением атомов бария в межслоевом пространстве против центров шестерных колец подобно расположению атомов калия в слюдах. Такой мотив был установлен для α -цельзиана ⁽²⁾ и позднее уточнен ⁽³⁾. Рассчитанные структурные факторы для такого слоя, формула которого $Ba(Al, Si)_4O_8$, оказались в хорошем согласии с экспериментальными. Однако оставалось неясным положение OH и было непонятно, за счет чего появляется пьезоэффект, так как структура слоя центросимметрична.

В это время в печати появилась статья ⁽⁴⁾, в которой предлагалась следующая химическая формула: $2BaO \cdot 2,5Al_2O_3 \cdot 5SiO_2 \cdot 3,65H_2O$ (формула выведена по результатам анализа навески 700 мг). Эта формула не соответствует данным рентгеноструктурного анализа. Поэтому нами был произведен перерасчет на основе $Al + Si = 4$, что дало следующее выражение:



В этой формуле существенным отличием от прежней ⁽¹⁾ является присутствие молекулы воды вместо гидроксила.

На проекции Патерсона $P(yz)$ оставался не расшифрованным пик с координатами 0.0.0,429 (рис. 1). Этот пик и был приписан группе H_2O . Высота его примерно в два раза меньше высот пиков соответствующих атомам кислорода, так как последние удвоены вследствие центросимметричного расположения. Такое положение воды (см. рис. 2 и 3) в какой-то мере объясняет наличие пьезоэффекта. Учет воды при расчете структур-

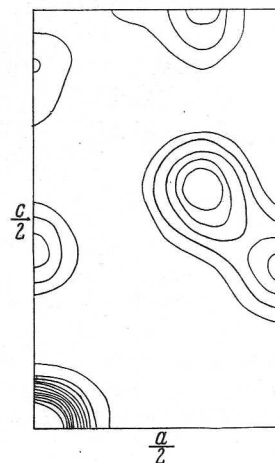


Рис. 1. Проекция функции Патерсона вдоль оси a

