

Академик Н. В. БЕЛОВ, Б. А. МАКСИМОВ, Ю. З. НОЗИК, Л. А. МУРАДЯН

УТОЧНЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ДИОПТАЗА
 $\text{Cu}_6[\text{Si}_6\text{O}_{18}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ МЕТОДАМИ РЕНТГЕНОВСКОЙ
И НЕЙТРОННОЙ ДИФРАКЦИИ

В «Структуре силикатов» В. Л. Брэгг (¹), следуя авторитету крупнейшего минералога Г. Чермака (²), перевел давно известный метасиликат диоптаз $\text{CuSiO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ с неустановленной тогда кристаллической структурой в группу ортосиликатов с формулой $\text{H}_2\text{Cu}[\text{SiO}_4]$. В рамках общей ромбоэдрической группы $R\bar{3}$ диоптаз оказался рядом с уже расшифрованным ортосиликатом фенакитом $\text{Be}_2[\text{SiO}_4]$. В 1942 г. одним из авторов настоящей работы чермаковское недоразумение было разъяснено (³) и диоптаз вернулся в группу метасиликатов, но с усложненной формулой $\text{Cu}_6[\text{Si}_6\text{O}_{18}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, в которой квадратными скобками зафиксировано шестерное кремнекислородное кольцо, но с симметрией не чисто гексагональной, как в классическом берилле $\text{Be}_3\text{Al}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$, а ромбоэдрической с тремя Si-тетраэдрами, «смотрящими» вверх от средней плоскости центрoсимметричного кольца, и тремя, «смотрящими» вниз (рис. 1).

Позднейшими исследованиями (⁴⁻⁷) была подтверждена метасиликатная природа диоптаза с шестерными бериллоподобными кольцами $[\text{Si}_6\text{O}_{18}]^{12-}$ и химическая формула минерала $\text{Cu}_6[\text{Si}_6\text{O}_{18}] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$.

В наших дифракционных исследованиях использован монокристалл природного диоптаза из Минералогического музея Московского геологоразведочного Института (известное месторождение Алтын-Тюбе, Казахстан). Уточненная гексагональная «дважды центрированная» ячейка характеризуется параметрами $a=b=14,569 \pm 0,002 \text{ \AA}$, $c=7,779 \pm 0,002 \text{ \AA}$, $\gamma=120^\circ$ с примитивной ромбоэдрической $a_{rh}=8,802 \text{ \AA}$, $\alpha_{rh}=111^\circ 42'$.

Ромбоэдрическая федоровская группа $C_{3i}^2=R\bar{3}$, $Z=18$. В рентгеновском эксперименте Mo K_α -излучение было монохроматизировано отражением

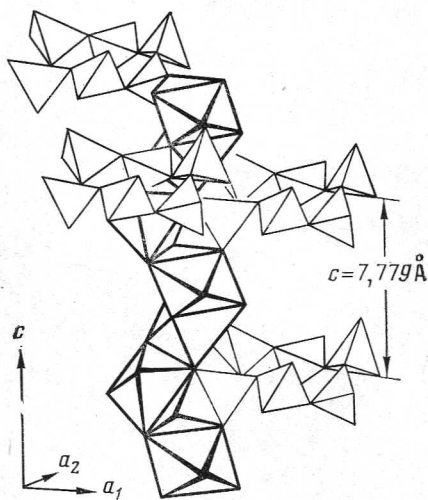


Рис. 1. Колонка из $\text{Cu}(\text{O}, \text{OH})_6$ -октаэдров, ориентированная по тройной винтовой оси с шестерными кремнекислородными кольцами $[\text{Si}_6\text{O}_{18}]^{12-}$ на трех уровнях

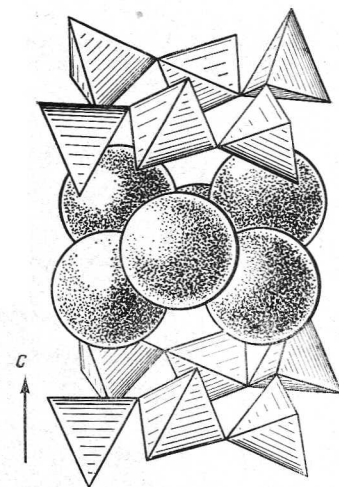


Рис. 2. Схема приспособления кремнекислородного радикала структуры диоптаза к конфигурации почти точной вырезки из структуры льда — ледяного кольца $(\text{H}_2\text{O})_6$

