

стей слоя вторичного расплава кислого и среднего состава (№ 1—7) изменяется при изменении температурных условий. В большинстве случаев наибольший по мощности слой расплава (при низких температурах первичного расплава и вмещающих пород) образуют аляскиты и граниты, а наименьший — диориты; при высоких температурах соотношения обратные. Наибольший диапазон изменения мощности слоя вторичного расплава характерен для сненита, который на контакте с «холодными» расплавами занимает одно из последних мест в ряду гранитоидов, а при максимальных температурах вмещающих пород и внедренного первичного расплава образует максимальный по мощности слой расплава. Диапазон изменения мощности расплава большой и у диорита (по характеру он аналогичен снениту) и у плагногранита (имеет противоположную тенденцию). Выявлено устойчивое понижение относительной мощности слоя вторичного расплава гранита (по сравнению с другими вторичными расплавами) с повышением температуры внедрения первичного расплава одного и того же состава. Отсюда следует, что при низких температурах образуются большие по мощности расплавы гранита, и при высоких — диорита и сненита, и, следовательно, на меньших глубинах следует ожидать преимущественное образование гранитных расплавов, а на больших — диоритовых и сненитовых.

Полученные данные свидетельствуют о том, что под влиянием магмы дунита при всех температурных условиях мощность вторичного слоя расплава габбро больше, чем вторичного слоя расплава троктолита. С повышением температур (т. е. с глубиной) эта разница увеличивается, поэтому в условиях верхней мантии образование больших по мощности слоев расплавов габбро более вероятно, чем троктолита. Таким образом, хотя слои вторичных расплавов наибольшей мощности образуются на контакте с первичными расплавами троктолита и дунита, роль последних в образовании вторичных расплавов кислого и среднего состава, по сравнению с первичным расплавом габбро, меньше из-за их меньшей распространенности. Полученные результаты хорошо согласуются с данными геолого-геофизических исследований о распространении в земной коре различных типов интрузивных горных пород.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кокс К. Г., Белл Дж. Д., Панкхерст Р. Дж. Интерпретация изверженных горных пород. М., 1982.
2. Ревердатто В. В. Фации контактового метаморфизма. М., 1970.
3. Соболев Р. Н., Авилина И. В. Влияние перегрева на длительность кристаллизации магм. расплавов. — Вестн. Моск. ун-та. Сер. геол., 1982, № 2, с. 25—35. Поступила в редакцию 07.01.83

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 4. ГЕОЛОГИЯ, 1986, № 1

УДК 548.736

О. В. Якубович, Е. Н. Матвиенко, М. А. Симонов, О. К. Мельников

#### КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СИНТЕТИЧЕСКОГО $Fe^{3+}$ -АРРОЯДИТА С ИДЕАЛИЗИРОВАННОЙ ФОРМУЛОЙ $K_2Na_5Fe^{2+}_{14}Fe^{3+}[PO_4]_{12}(OH)_2$

В 1981 г. в США состоялся симпозиум Американского минералогического общества по проблемам минералогии пегматитов. Пятая часть докладов, заслушанных в ходе работы симпозиума, была посвя-

цена  
около  
щихс  
том,  
то, ч  
слож  
ра, с  
ет со  
стве  
касае  
осно  
образ  
богат  
снге

$XU_5M$   
= $Na$   
струк  
резул  
лично  
струк  
нята  
кпе  
части  
стру

стор  
чивое  
стал  
ных  
мето  
(NH  
водн  
кори  
двиг  
мер  
ма  
ядит  
(К.  
К, N  
стот  
крис

пре  
круж  
 $b = E$   
псев  
3057  
ван  
нир  
мер  
зар

зани

шена фосфатам [4], которых в гранитных пегматитах насчитывается около 180 минеральных видов. Одним из наиболее часто встречающихся, наряду с трифилином, апатитом, графтонитом и амблигонитом, является арроядит. В докладе П. Б. Мура [4, с. 188] подчеркнута, что кристаллическая структура арроядита — одна из наиболее сложных во всем царстве минералов. По образному выражению автора, структура изоморфной серии арроядит—диккинсонит представляет собой «мусорную корзину» («garbage basket»), допуская присутствие в составе этих минералов около 20 химических элементов. Что касается генезиса арроядита, если П. Б. Мур считает его одним из основных первичных фосфатов, то А. Р. Камф [4, с. 187] связывает образование арроядита с процессами, возникающими при воздействии богатых Na и Ca растворов на первичные фосфаты, образовавшиеся сингенетично с кристаллизацией пегматита.

В [6] предложена общая структурная формула арроядитов:  $XY_5M_{14}^{2+}Al(OH, F)(PO_4)_{12}$ ,  $Z=4$ , где  $X=K^+$ ,  $Ba^{2+}$ ,  $Pb^{2+}$  и другие,  $Y=Na^+$ ,  $Ca^{2+}$  и другие,  $M=Fe^{2+}$ ,  $Mn^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$  и другие. Кристаллическая структура арроядита описана в [2, 5, 7]\*, причем в [7] приведены результаты исследования трех образцов минерала из пегматитов различных регионов. Полученные данные свидетельствуют о дефектности структуры арроядита: часть позиций в кристаллической решетке занята катионами  $K^+$ ,  $Na^+$ ,  $Ca^{2+}$  и  $P^{5+}$  неполностью; недопустимо короткие расстояния катион — катион обуславливают распределение части атомов по статистическому закону, т. е. наличие вакансий в структуре.

Чрезвычайная сложность кристаллохимии арроядитов, с одной стороны, и полное отсутствие сведений относительно их полей устойчивости, с другой — обусловили постановку работ по синтезу и кристаллохимическому изучению этого типоморфного минерала гранитных пегматитов. Монокристаллы синтетического арроядита получены методом гидротермального синтеза в системах:  $AX - Fe_2O_3 - (NH_4)_2HPO_4 - H_2O$ , где  $AX=KCl$  и  $CsCl$  ( $T=450^\circ C$ , концентрация водных растворов  $KCl$  и  $CsCl - 50$  мас %). Они представляют собой коричневаточерные непрозрачные изометричные призматические индивиды, просвечивающие в тонких пластинках. Средний линейный размер монокристаллов 0,2 мм при максимальном 1 мм. Дифрактограмма синтезированных кристаллов близка к таковой природного арроядита [1]. Качественный рентгеноспектральный анализ образцов (К. В. Юркина, ВИМС) обнаружил присутствие в их составе Fe, P, K, Na. Наличие последних двух связано, видимо, с недостаточной чистотой используемых при синтезе реактивов  $KCl$  и  $CsCl$  (полученные кристаллы составляют 10% от массы опыта).

Параметры элементарной ячейки синтетического  $Fe^{3+}$  арроядита определены методом качания в камере РК ОП и уточнены на четырехкружном автоматическом дифрактометре Р1 «Синтекс»:  $a=16,53(2)$  А,  $b=10,084(9)$ ,  $c=24,64(3)$  А,  $\beta=105,75(7)^\circ$ . Вдоль оси  $c$  ярко выражен псевдопериод  $c'=c/2$ . Экспериментальный материал — интенсивности 3057 независимых ненулевых ( $I \geq 1,96\sigma I$ ) отражений — зарегистрирован на том же дифрактометре  $\omega$ -методом с переменной скоростью сканирования 3—24°/мин ( $\lambda MoK_\alpha$ ,  $\sin \theta/\lambda \leq 1 \text{ \AA}^{-1}$ ) от монокристалла размером 0,25×0,1×0,1 мм<sup>3</sup>. Наличие закономерных погасаний в массиве зарегистрированных отражений предполагало одну из двух федоров-

\* В работе [2] были впервые определены положения практически всех атомов, занимающих соответствующие позиции в структуре целиком.

ских групп симметрии:  $C_s$  и  $C_{2/c}$ . В рамках последней (характерной для природного арроядита) была начата расшифровка структуры.

Анализ трехмерной функции Патерсона подтвердил наличие векторов первого и второго рода, отвечающих атомным позициям  $X_{1,2,4,6,8}$  из [2]. Основываясь на их координатах ( $Fe_{1-5}$  в нашем случае), было рассчитано трехмерное распределение электронной плотности, с которого были сняты координаты еще одного атома железа ( $Fe_6$ ) и четырех атомов фосфора. Циклами последовательных приближений были установлены координаты атомов  $Fe_7, Fe_8, Fe_9, P_5, P_6$ , 25 атомов кислорода, а также  $Na_1, Na_2, K_1, K_2, K_3$ . После уточнения МНК координатных и тепловых параметров полученной модели ( $R_{hkl}=9,6\%$ ) обращали на себя внимание завышенные величины индивидуальных изотропных температурных факторов у атомов  $Fe_{7,8,9}, P_6, O_{17}, Na_2, K_2, K_3$ , а также аномально короткие расстояния  $Fe_9-Fe_9=1,46 \text{ \AA}$  и  $K_2-K_3=2,40 \text{ \AA}$ . Предположение о статистическом распределении атомов по указанным позициям подтвердилось после уточнения факторов заполнения последних ( $R_{hkl}=7,9\%$ ): На построенном разностном синтезе электронной плотности выявлены дополнительные атомы  $P_7, O_{26}, Na_{3-6}, Fe_{10-11}$ , уточнение факторов заполнения соответствующих позиций которыми свидетельствовало о статистическом распределении и этих атомов в структуре. Уточнение полученной модели МНК в изотропном и анизотропном приближениях проведено до  $R_{hkl}=6,0$  и  $4,1\%$  соответственно. Координаты базисных атомов, изотропные температурные факторы и межатомные расстояния приведены в таблицах 1 и 2\*. Попытка избавиться от статистики в распределении атомов путем перехода к ацентричной пространственной группе к положительному результату не привела.

В кристаллической структуре синтетического  $Fe^{3+}$ -арроядита катионы железа находятся в октаэдрах и пятивершинниках. Межатомные расстояния в центросимметричном октаэдре, заполненном  $Fe^{3+}$  (в минерале Al), закономерно меньше таковых для полиэдров с  $Fe^{2+}$  (табл. 2). В полиэдрах  $Fe_{2-6}$  расстояния  $Fe^{2+}-O$  изменяются от 2,003 до 2,302  $\text{\AA}$  при вариациях длин связей  $O-O$  от 2,402 (общее ребро  $Fe_3$ -октаэдра и  $P$ -тетраэдра) до 4,129  $\text{\AA}$ . В октаэдре  $Fe_7$  одно расстояние  $Fe-O=2,477 \text{ \AA}$  несколько увеличено. В пятивершиннике  $Fe_8$  разброс расстояний  $Fe_8-O$  от 1,965 до 2,386  $\text{\AA}$ , в пятивершиннике  $F_{13}$  — от 1,881 до 2,410  $\text{\AA}$ . По одному увеличенному расстоянию  $Fe-O$  присутствует в  $Fe_9$ -пятивершиннике (2,445  $\text{\AA}$ ) и  $Fe_{10}$ -октаэдре (2,581  $\text{\AA}$ ). В ортотетраэдрах фосфора расстояния  $P-O$  лежат в пределах 1,513—1,574  $\text{\AA}$ . Одновалентные катионы  $Na^+$  размещены в кубе ( $Na_1:Na_1-O_{cp}=2,551 \text{ \AA}$ ), октаэдрах ( $Na_2$  и  $Na_5:Na_2-O_{pc}=2,429 \text{ \AA}$  и  $Na_5-O_{cp}=2,452 \text{ \AA}$ ), семивершиннике ( $Na_3:Na_3-O_{cp}=2,662 \text{ \AA}$ ), пятивершиннике ( $Na_4:Na_4-O_{cp}=2,598 \text{ \AA}$ ) и восьмивершиннике ( $Na_6:Na_6-O=2,467 \text{ \AA}$ ). Более крупные катионы  $K^+$  окружены атомами кислорода по вершинам куба ( $K_1:K_1-O_{cp}=2,921 \text{ \AA}$ ), десятивершинника ( $K_2:K_2-O_{cp}=2,991 \text{ \AA}$ ) и восьмивершинника ( $K_3:K_3-O_{cp}=2,957 \text{ \AA}$ ).

Сравнение найденных координат катионов с координатами, приведенными в предыдущих работах по структуре минерала, показывает, что имеется хорошее соответствие для позиций, отвечающих положению  $Fe_1^{3+}$  ( $X_8$  [2] и  $X_3$  [7]),  $Fe_{2-7}^{2+}$  ( $X_{1-6}$  [3] и  $M_{2-7}$  [7]), а также  $Na_1, Na_2, K_1$  ( $A_{1-3}$  [2] и  $X_{2-4}$  [7]). Набор «крупных» катионов в [2] на этом исчерпан. Для оставшихся крупнокатионных позиций из [7] найдены

\* Со значениями анизотропных температурных поправок можно ознакомиться у авторов.

## Координаты базисных атомов и изотропные температурные факторы

Атом	Заполнение позиции	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$B_j$
Fe <sub>1</sub>	4	0	0	0	0,51(3)
Fe <sub>2</sub>	8	0,39086(8)	0,9858(1)	0,07696(6)	0,88(2)
Fe <sub>3</sub>	8	0,53328(8)	0,2566(1)	0,40017(5)	0,74(2)
Fe <sub>4</sub>	8	0,02187(8)	0,2523(1)	0,40101(6)	1,03(2)
Fe <sub>5</sub>	8	0,29910(8)	0,3005(1)	0,14731(6)	0,97(2)
Fe <sub>6</sub>	8	0,21735(8)	0,4969(1)	0,26753(6)	1,10(2)
Fe <sub>7</sub>	6,72	0,2191(1)	0,2077(2)	0,34131(7)	0,96(3)
Fe <sub>8</sub>	4,80	0,2732(1)	0,1081(2)	0,0192(1)	1,17(4)
Fe <sub>9</sub>	3,20	0,2251(2)	0,2921(3)	0,4773(1)	0,95(6)
Fe <sub>10</sub>	1,28	0,2108(5)	0,2395(8)	0,3428(3)	1,0(1)
Fe <sub>11</sub>	0,72	0,2566(8)	0,139(1)	0,0112(5)	1,4(5)
P <sub>1</sub>	8	0,1279(1)	0,2544(2)	0,0389(1)	0,73(4)
P <sub>2</sub>	8	0,3696(1)	0,2770(2)	0,2875(1)	0,70(4)
P <sub>3</sub>	8	0,1467(1)	0,2064(2)	0,2035(1)	0,92(4)
P <sub>4</sub>	8	0,3932(1)	0,2287(2)	0,4514(1)	0,89(4)
P <sub>5</sub>	8	0,1309(1)	0,0388(2)	0,4213(1)	0,76(4)
P <sub>6</sub>	6	0,3809(2)	0,9933(4)	0,1316(1)	1,05(6)
P <sub>7</sub>	2	0,4214(6)	0,0095(9)	0,3238(3)	0,7(1)
Na <sub>1</sub>	4	0	0,5	0	2,4(1)
Na <sub>2</sub>	5,6	0,1229(3)	0,9876(5)	0,1218(2)	2,7(1)
Na <sub>3</sub>	2,56	0,4733(7)	0,186(1)	0,2240(5)	2,9(2)
Na <sub>4</sub>	2	0,2902(6)	0,032(1)	0,0449(5)	1,2(3)
Na <sub>5</sub>	2,4	0,3304(6)	0,481(1)	0,3891(4)	1,3(2)
Na <sub>6</sub>	1,12	0,25	0,25	0,5	2,3(4)
K <sub>1</sub>	4	0	0,0087(3)	0,25	2,82(8)
K <sub>2</sub>	1,44	0	0,318(1)	0,25	4,1(3)
K <sub>3</sub>	1,44	0,5	0,059(1)	0,25	3,1(2)
O <sub>1</sub>	8	0,2364(3)	0,4979(6)	0,1419(2)	1,1(1)
O <sub>2</sub>	8	0,3598(4)	0,1241(6)	0,2896(3)	1,7(1)
O <sub>3</sub>	8	0,0607(4)	0,1621(6)	0,1670(3)	1,6(1)
O <sub>4</sub>	8	0,3940(4)	0,1833(6)	0,0207(2)	1,2(1)
O <sub>5</sub>	8	0,1500(4)	0,3586(6)	0,2066(3)	1,3(1)
O <sub>6</sub>	8	0,0989(4)	0,3168(6)	0,4883(3)	1,5(1)
O <sub>7</sub>	8	0,4529(4)	0,3181(6)	0,3285(3)	1,3(1)
O <sub>8</sub>	8	0,1277(4)	0,1554(6)	0,3798(3)	1,0(1)
O <sub>9</sub>	8	0,0297(4)	0,4399(6)	0,3686(3)	1,4(1)
O <sub>10</sub>	8	0,4498(3)	0,3519(5)	0,4491(2)	0,7(1)
O <sub>11</sub>	8	0,2251(3)	0,2603(6)	0,0610(2)	1,1(1)
O <sub>12</sub>	8	0,0491(3)	0,0615(6)	0,4402(2)	1,0(1)
O <sub>13</sub>	8	0,1602(5)	0,1470(7)	0,2620(3)	2,0(2)
O <sub>14</sub>	8	0,1024(4)	0,1082(6)	0,0363(2)	0,9(1)
O <sub>15</sub>	8	0,0848(4)	0,3337(6)	0,0758(2)	1,0(1)
O <sub>16</sub>	8	0,3888(4)	0,1434(6)	0,1386(3)	1,2(1)
O <sub>17</sub>	6	0,1894(6)	0,4668(9)	0,4247(4)	2,4(2)
O <sub>18</sub>	8	0,1496(4)	0,4269(7)	0,3223(3)	1,9(1)
O <sub>19</sub>	8	0,2170(4)	0,1541(6)	0,1783(3)	1,6(1)
O <sub>20</sub>	8	0,3761(4)	0,4027(6)	0,1059(2)	1,0(1)
O <sub>21</sub>	8	0,3017(4)	0,2616(7)	0,4223(3)	1,5(1)
O <sub>22</sub>	8	0,2093(4)	0,0511(7)	0,4711(3)	1,9(1)
O <sub>23</sub>	8	0,3670(4)	0,3238(6)	0,2284(2)	1,4(1)
O <sub>24</sub>	8	0,4308(4)	0,1245(6)	0,4195(2)	1,2(1)
O <sub>25</sub>	8	0,2968(4)	0,3430(6)	0,3069(3)	1,4(1)
O <sub>26</sub> (OH)	2	0,473(1)	0,024(3)	0,2292(7)	3,5(5)

Таблица 2.

## Межатомные расстояния (Å)

Fe <sub>1</sub> -октаэдр	Fe <sub>2</sub> -октаэдр	Fe <sub>3</sub> -октаэдр
Fe <sub>1</sub> —O <sub>10</sub> (2) 1,981(6) O <sub>12</sub> (2) 1,968(6) O <sub>14</sub> (2) 2,009(6)	Fe <sub>2</sub> —O <sub>1</sub> 2,094(6) O <sub>2</sub> 2,177(6) O <sub>5</sub> 2,047(6) O <sub>9</sub> 2,295(7) O <sub>15</sub> 2,161(6) O <sub>21</sub> 2,003(6)	Fe <sub>3</sub> —O <sub>4</sub> 2,120(6) O <sub>7</sub> 2,005(6) O <sub>10</sub> 2,272(6) O <sub>18</sub> 2,136(6) O <sub>20</sub> 2,137(6) O <sub>21</sub> 2,302(7)
Fe <sub>1</sub> —O <sub>ср</sub> 1,986 O—O <sub>ср</sub> 2,808	Fe <sub>2</sub> —O <sub>ср</sub> 2,130 O—O <sub>ср</sub> 3,009	Fe <sub>3</sub> —O <sub>ср</sub> 2,162 O—O <sub>ср</sub> 3,066
Fe <sub>4</sub> -октаэдр	Fe <sub>5</sub> -октаэдр	Fe <sub>6</sub> -пятивершинник
Fe <sub>4</sub> —O <sub>3</sub> 2,063(7) O <sub>6</sub> 2,277(6) O <sub>8</sub> 2,186(6) O <sub>9</sub> 2,071(6) O <sub>12</sub> 2,146(6) O <sub>15</sub> 2,158(6)	Fe <sub>5</sub> —O <sub>1</sub> 2,232(6) O <sub>11</sub> 2,184(6) O <sub>16</sub> 2,220(6) O <sub>19</sub> 2,273(7) O <sub>20</sub> 2,104(6) O <sub>23</sub> 2,021(6)	Fe <sub>6</sub> —O <sub>2</sub> 2,068(7) O <sub>5</sub> 2,129(6) O <sub>18</sub> 2,097(7) O <sub>19</sub> 2,164(7) O <sub>23</sub> 2,094(7)
Fe <sub>4</sub> —O <sub>ср</sub> 2,150 O—O <sub>ср</sub> 3,031	Fe <sub>5</sub> —O <sub>ср</sub> 2,172 O—O <sub>ср</sub> 3,068	Fe <sub>6</sub> —O <sub>ср</sub> 2,110 O—O <sub>ср</sub> 3,138
Fe <sub>7</sub> -октаэдр	Fe <sub>8</sub> -пятивершинник	Fe <sub>9</sub> -пятивершинник
Fe <sub>7</sub> —O <sub>1</sub> 2,241(6) O <sub>8</sub> 2,060(6) O <sub>13</sub> 2,027(7) O <sub>21</sub> 2,160(7) O <sub>25</sub> 2,196(7) O <sub>18</sub> 2,477(7)	Fe <sub>8</sub> —O <sub>4</sub> 2,128(6) O <sub>11</sub> 2,121(6) O <sub>11</sub> 2,386(6) O <sub>17</sub> 1,965(10) O <sub>22</sub> 2,102(7)	Fe <sub>9</sub> —O <sub>6</sub> 2,194(7) O <sub>17</sub> 2,172(9) O <sub>21</sub> 2,110(7) O <sub>22</sub> 2,130(7) O <sub>23</sub> 2,445(8)
Fe <sub>7</sub> —O <sub>ср</sub> 2,194 O—O <sub>ср</sub> 3,101	Fe <sub>8</sub> —O <sub>ср</sub> 2,140 O—O <sub>ср</sub> 3,223	Fe <sub>9</sub> —O <sub>ср</sub> 2,210 O—O <sub>ср</sub> 3,334
Fe <sub>10</sub> -октаэдр	Fe <sub>11</sub> -пятивершинник	P <sub>1</sub> -тетраэдр
Fe <sub>10</sub> —O <sub>8</sub> 2,031(6) O <sub>13</sub> 2,151(7) O <sub>18</sub> 2,138(7) O <sub>21</sub> 2,133(7) O <sub>23</sub> 2,138(7) O <sub>1</sub> 2,581(6)	Fe <sub>11</sub> —O <sub>4</sub> 2,274(6) O <sub>11</sub> 1,881(6) O <sub>11</sub> 2,103(6) O <sub>22</sub> 2,230(7) O <sub>17</sub> 2,410(10)	P <sub>1</sub> —O <sub>i</sub> 1,547(6) O <sub>11</sub> 1,551(6) O <sub>14</sub> 1,530(6) O <sub>15</sub> 1,524(6)
Fe <sub>10</sub> —O <sub>ср</sub> 2,195 O—O <sub>ср</sub> 3,101	Fe <sub>11</sub> —O <sub>ср</sub> 2,180 O—O <sub>ср</sub> 3,223	P <sub>1</sub> —O <sub>ср</sub> 1,538 O—O <sub>ср</sub> 2,511

P <sub>2</sub> -тетраэдр		P <sub>3</sub> -тетраэдр		P <sub>4</sub> -тетраэдр	
P <sub>2</sub> —O <sub>2</sub>	1,553(6)	P <sub>3</sub> —O <sub>3</sub>	1,528(7)	P <sub>4</sub> —O <sub>8</sub>	1,525(6)
O <sub>7</sub>	1,527(6)	O <sub>5</sub>	1,537(6)	O <sub>10</sub>	1,566(6)
O <sub>23</sub>	1,522(6)	O <sub>13</sub>	1,520(7)	O <sub>21</sub>	1,523(7)
O <sub>25</sub>	1,558(7)	O <sub>19</sub>	1,552(7)	O <sub>24</sub>	1,541(6)
P <sub>2</sub> —O <sub>ср</sub>	1,540	P <sub>3</sub> —O <sub>ср</sub>	1,534	P <sub>4</sub> —O <sub>ср</sub>	1,539
O—O <sub>ср</sub>	2,515	O—O <sub>ср</sub>	2,506	O—O <sub>ср</sub>	2,511
P <sub>5</sub> -тетраэдр		P <sub>6</sub> -тетраэдр		P <sub>7</sub> -тетраэдр	
P <sub>5</sub> —O <sub>6</sub>	1,549(6)	P <sub>6</sub> —O <sub>9</sub>	1,574(7)	P <sub>7</sub> —O <sub>9</sub>	1,513(7)
O <sub>12</sub>	1,558(6)	O <sub>16</sub>	1,525(6)	O <sub>16</sub>	1,546(6)
O <sub>20</sub>	1,518(6)	O <sub>17</sub>	1,572(10)	O <sub>18</sub>	1,521(7)
O <sub>22</sub>	1,528(6)	O <sub>18</sub>	1,517(7)	O <sub>20</sub>	1,548(18)
P <sub>5</sub> —O <sub>ср</sub>	1,538	P <sub>6</sub> —O <sub>ср</sub>	1,547	P <sub>7</sub> —O <sub>ср</sub>	1,532
O—O <sub>ср</sub>	2,509	O—O <sub>ср</sub>	2,524	O—O <sub>ср</sub>	2,497
Na <sub>1</sub> -куб		Na <sub>2</sub> -октаэдр		Na <sub>3</sub> -семивершинник	
Na <sub>1</sub> —O <sub>4</sub> (2)	2,689(6)	Na <sub>2</sub> —O <sub>3</sub>	2,460(7)	Na <sub>3</sub> —O <sub>2</sub>	2,860(7)
O <sub>6</sub> (2)	2,535(7)	O <sub>7</sub>	2,621(6)	O <sub>2</sub>	2,921(8)
O <sub>15</sub> (2)	2,616(6)	O <sub>10</sub>	2,288(6)	O <sub>7</sub>	2,993(6)
O <sub>24</sub> (2)	2,364(6)	O <sub>14</sub>	2,372(6)	O <sub>7</sub>	2,411(6)
		O <sub>19</sub>	2,446(7)	O <sub>16</sub>	2,248(6)
		O <sub>25</sub>	2,386(6)	O <sub>23</sub>	2,283(7)
				O <sub>23</sub>	2,919(7)
Na <sub>1</sub> —O <sub>ср</sub>	2,551	Na <sub>2</sub> —O <sub>ср</sub>	2,429	Na <sub>3</sub> —O <sub>ср</sub>	2,662
O—O <sub>ср</sub>	2,935	O—O <sub>ср</sub>	3,416	O—O <sub>ср</sub>	3,265
Na <sub>4</sub> -пятивершинник		Na <sub>5</sub> -октаэдр		Na <sub>6</sub> -восьмивершинник	
Na <sub>4</sub> —O <sub>4</sub>	2,480(6)	Na <sub>5</sub> —O <sub>10</sub>	2,478(6)	Na <sub>6</sub> —O <sub>6</sub>	(2)2,527(7)
O <sub>11</sub>	2,615(6)	O <sub>14</sub>	2,279(6)	O <sub>17</sub>	(2)2,866(9)
O <sub>16</sub>	2,680(6)	O <sub>17</sub>	2,736(10)	O <sub>21</sub>	(2)2,302(7)
O <sub>22</sub>	2,122(7)	O <sub>19</sub>	2,388(7)	O <sub>22</sub>	(2)2,173(7)
O <sub>6</sub>	3,091(7)	O <sub>21</sub>	2,454(7)		
		O <sub>25</sub>	2,377(6)		
Na <sub>4</sub> —O <sub>ср</sub>	2,598	Na <sub>5</sub> —O <sub>ср</sub>	2,452	Na <sub>6</sub> —O <sub>ср</sub>	2,467
O—O <sub>ср</sub>	3,709	O—O <sub>ср</sub>	3,483	O—O <sub>ср</sub>	3,106
K <sub>1</sub> -куб		K <sub>2</sub> -десятивершинник		K <sub>3</sub> -восьмивершинник	
K <sub>1</sub> —O <sub>3</sub> (2)	2,949(7)	K <sub>2</sub> —O <sub>3</sub> (2)	2,966(7)	K <sub>3</sub> —O <sub>2</sub> (2)	2,831(7)
O <sub>7</sub> (2)	2,977(6)	O <sub>13</sub> (2)	3,110(8)	O <sub>9</sub> (2)	3,066(6)
O <sub>13</sub> (2)	2,936(8)	O <sub>5</sub> (2)	2,984(7)	O <sub>16</sub> (2)	2,989(6)
O <sub>23</sub> (2)	2,822(7)	O <sub>18</sub> (2)	2,812(7)	O <sub>18</sub> (2)	2,943(7)
		O <sub>9</sub> (2)	3,083(6)		
K <sub>1</sub> —O <sub>ср</sub>	2,921	K <sub>2</sub> —O <sub>ср</sub>	2,991	K <sub>3</sub> —O <sub>ср</sub>	2,957
O—O <sub>ср</sub>	3,305	O—O <sub>ср</sub>	3,449	O—O <sub>ср</sub>	2,978

эквиваленты в нашей структуре, однако значение координаты  $y$  отличается приблизительно на 0,1 Å: Fe<sub>9</sub> — M(1); Fe<sub>8</sub> — X(1); K<sub>3</sub> — X(5); K<sub>2</sub> — X(7); Na<sub>4</sub> — X(6). Кроме того, в структуре синтетического арроядита имеются еще дополнительные позиции, отвечающие атомам: Fe<sub>10</sub>, Fe<sub>13</sub>, Na<sub>3</sub>, Na<sub>5</sub>, Na<sub>6</sub>. Как отмечено в [7], в структуре арроядита необычайно велика роль статистики в распределении атомов. Это подтверждает структура синтетического арроядита, в которой не упорядочены четырнадцать независимых катионов и два аниона: укороченные расстояния между атомами не позволяют им одновременно располагаться в близлежащих позициях. Это относится к следующим атомам структуры.

1. Na<sub>2</sub> и Na<sub>5</sub> (расстояние Na<sub>2</sub>—Na<sub>5</sub>=0,846 Å). Кислородные полиэдры, включающие в себя два эти атома, перекрываются: четыре из

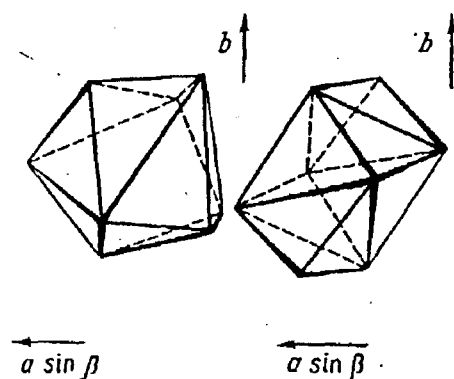


Рис. 1. Сводный анионный полиэдр Na<sub>2</sub>—Na<sub>5</sub> в кристаллической структуре синтетического Fe<sup>3+</sup>-арроядита

Рис. 2. Восьмигранник Na<sub>6</sub> в проекции  $xy$

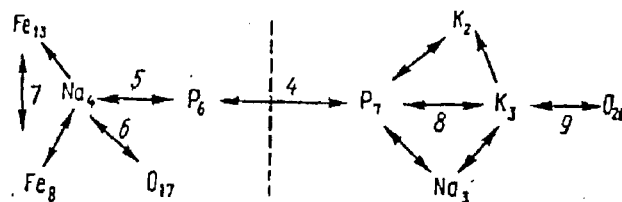


Рис. 3. Схема статистического заполнения части атомных позиций в структуре синтетического арроядита. Стрелками объединены позиции, которые в структуре не могут быть заняты одновременно.

шести анионов O<sup>2-</sup> в октаэдрах Na<sub>2</sub> и Na<sub>5</sub> общие. При этом в трех случаях из десяти заполнен октаэдр Na<sub>5</sub> и в семи — октаэдр Na<sub>2</sub> (табл. 1). Если принять усредненное положение атома Na, то он будет целиком занимать позицию в восьмиграннике (рис. 1).

2. Fe<sub>9</sub> и Na<sub>6</sub> (расстояние Fe<sub>9</sub>—Na<sub>6</sub>=0,732 Å). Расстояние между атомами Fe<sub>9</sub>, связанными операциями симметрии, равно 1,463 Å, что аргоги позволяет заполнение соответствующей позиции лишь наполовину. Центросимметричный восьмигранник, образованный атомами кислорода вокруг Na<sub>6</sub>, включает в себя пятигранник Fe<sub>9</sub> (рис. 2). Уточнение факторов заполнения позиций, отвечающих атомам Na<sub>6</sub> и Fe<sub>9</sub> в структуре показало, что первая занята на 34%, а вторая — на 40%.

3. Fe<sub>7</sub> и Fe<sub>10</sub> (расстояние Fe<sub>7</sub>—Fe<sub>10</sub>=0,355 Å). Оба атома железа находятся в одном и том же кислородном октаэдре (табл. 2). При этом для каждого из них одно из расстояний Fe—O увеличено: Fe<sub>7</sub>—O<sub>18</sub>=2,477(7) Å и Fe<sub>10</sub>—O<sub>1</sub>=2,581(6) Å. Если представить октаэдр как результат объединения по общей четырехугольной грани двух полуоктаэдров, то в одном из них окажется Fe<sub>7</sub>, а в другом — Fe<sub>10</sub>. Количество атомов железа, которого не хватает до полной занятости позиции Fe<sub>7</sub>, находится в позиции Fe<sub>10</sub>. Последняя занята на 16%.

4. P<sub>6</sub> и P<sub>7</sub> (расстояние P<sub>6</sub>—P<sub>7</sub>=0,955 Å). Из двух связанных общей гранью фосфорных тетраэдров один заполнен на 3/4 (P<sub>6</sub>), а вто-

рой  
не я  
да н  
ски  
рала  
оста  
нале  
  
одне  
т. е  
быт  
  
щий  
эдр  
стоя  
  
25%  
Na<sub>4</sub>  
= 2  
но  
пят  
нен  
Мо  
вер  
на

зап  
K<sub>3</sub>  
P<sub>7</sub>  
это  
вто  
K  
ме  
—  
K<sub>3</sub>

ло  
ро  
K<sub>3</sub>  
=  
об  
ни  
ве  
те  
эд  
ли  
ш

P  
с  
Fe

ж  
ж  
пу

рой на  $1/4$  ( $P_7$ ). Соответственно и позиции в вершинах тетраэдров, не являющихся общими для двух полиэдров, заняты атомами кислорода на  $3/4$  ( $O_{17}$ ) и на  $1/4$  ( $O_{26}$ ). Два расположенных рядом и статистически заполненных фосфорных тетраэдра встречаются в структуре минерала [7], однако там они связаны по общему ребру. Заполнение остальных дефектных позиций в структуре связано непосредственно с наличием или отсутствием фосфора в положениях  $P_6$  и  $P_7$  (рис. 3).

5. Позиция, отвечающая  $P_6$ , в структуре не может быть занята одновременно с позицией  $P_7$  и  $Na_4$  (расстояние  $P_6-Na_4=2,283 \text{ \AA}$ ), т. е. в том случае, когда пустует тетраэдр  $P_6$ , заполненными могут быть  $P_7$ -тетраэдр и  $Na_4$ -пятивершинник.

6. Анион  $O_{17}^{2-}$ , координирующий фосфор в позиции  $P_6$  и заполняющий соответствующую позицию в том случае, когда занят  $P_6$ -тетраэдр, также не может находиться одновременно с катионом  $Na_4$  (расстояние  $Na_4-O_{17}=0,986 \text{ \AA}$ ).

7. Одновременно с  $Na_4$ -пятивершинником (величина заполнения 25%) не могут быть заполнены пятивершинники  $Fe_8$  (расстояние  $Na_4-Fe_8=0,984 \text{ \AA}$ ) и  $Fe_{11}$  (расстояния  $Na_4-Fe_{11}=1,438 \text{ \AA}$ ,  $Fe_{11}-Fe_{11}=2,194 \text{ \AA}$ ). Последенние два также не могут быть заняты одновременно (расстояние  $Fe_8-Fe_{11}=0,482 \text{ \AA}$ ). Общий для обоих атомов железа пятивершинник может быть представлен как два тетраэдра, объединенных общей гранью, один из которых центрирует  $Fe_8$ , а второй —  $Fe_{11}$ . Можно представить сводный анионный полиэдр  $Na_4-Fe_8(Fe_{11})$ -семивершинник (рис. 4), заполненный  $Fe_8$  на 60%,  $Na_4$  на 25% и  $Fe_{11}$  на 9%.

8. Недопустимо также одновременное заполнение тетраэдра  $P_7$  и полиэдров  $K_2$ ,  $K_3$  и  $Na_3$  (расстояния:  $P_7-K_2=2,856 \text{ \AA}$ ,  $P_7-K_3=2,162 \text{ \AA}$ ,  $P_7-Na_3=2,293 \text{ \AA}$ ). При этом расстояние между связанными осью второго порядка атомами  $Na_3$  равно  $1,301 \text{ \AA}$ . К тому же не могут быть заняты одновременно позиции  $K_2$  и  $K_3$  (расстояние  $K_2-K_3=2,404 \text{ \AA}$ ),  $K_3$  и  $Na_3$  (расстояние  $K_3-Na_3=1,446 \text{ \AA}$ ) (правая сторона рис. 3).

9. Входящий в  $P_7$ -тетраэдр атом кислорода  $O_{26}$  расположен на недопустимо коротких расстояниях от атомов  $K_2$ ,  $K_3$  и  $Na_3$  ( $K_2-O_{26}=2,015 \text{ \AA}$ ,  $K_3-O_{26}=0,622 \text{ \AA}$ ,  $Na_3-O_{26}=1,742 \text{ \AA}$ ). Таким образом, в случае заполнения тетраэдра  $P_7$  присутствует координирующий его анион  $O_{26}$  (расстояние  $O_{26}-O_{26}=1,170 \text{ \AA}$ ) и пусты семивершинник  $Na_3$ , десятивершинник  $K_2$  и восьмивершинник  $K_3$ . Когда же тетраэдр  $P_7$  пустует (заполнен связанный с ним общей гранью тетраэдр  $P_6$ ), то может быть заполнен либо  $K_3$ -восьмивершинник, либо полиэдры  $Na_3$  и  $K_2$ . Частота статистического заполнения соответствующих позиций:  $K_2$  — 36,  $K_3$  — 36,  $Na_3$  — 32%.

В случае заполнения одного из двух объединенных общей гранью  $P$ -тетраэдров возможны следующие варианты заполнения связанных с ними позиций: а)  $P_6$ ,  $O_{17}$ ,  $Fe_8$  (или  $Fe_{11}$ ),  $K_3$ ; б)  $P_6$ ,  $O_{17}$ ,  $Fe_8$  (или  $Fe_{11}$ ),  $K_2$ ,  $Na_3$ ; в)  $P_7$ ,  $O_{26}$ ,  $Na_4$ ; г)  $P_7$ ,  $O_{26}$ ,  $Fe_8$  (или  $Fe_{11}$ ).

Для получения идеализированной структуры арроядита, не содержащей дефектных — статистически заполненных позиций, предположим, что в ней тетраэдр  $P_6$  занят не на 75%, а полностью, а  $P_7$  — пустой. Отсюда будет следовать, что в идеализированной структуре

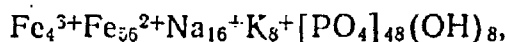


Рис. 4. Анионный семивершинник, занятый на 60%  $Fe_8$ , на 25%  $Na_4$  и на 9%  $Fe_{11}$

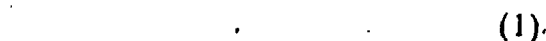


целиком заняты позиции: Fe<sub>8</sub> (Fe<sub>11</sub>) и K<sub>2</sub> (или K<sub>3</sub>). Полиэдр Na<sub>3</sub> пустой из-за невозможности его полной занятости: расстояние Na<sub>3</sub>—Na<sub>3</sub>=1,301 Å. Бездефектные позиции Fe<sub>1-6</sub>, Na<sub>1</sub> и K<sub>1</sub> заполнены соответствующими катионами (табл. 3, вариант 1). Так как из двух расположенных на укороченном расстоянии позиций Fe<sub>9</sub> и Na<sub>6</sub> первая не может быть занята полностью (поскольку расстояние Fe<sub>9</sub>—Fe<sub>9</sub>=1,463 Å), в идеализированной структуре предполагаем заполненным целиком восьмивершинник Na<sub>6</sub>, т. е. в формуле добавятся четыре катиона Na<sub>5</sub><sup>+</sup>. Кроме того, из пары Na<sub>2</sub>—Na<sub>5</sub> предполагаем занятым в структуре октаэдр Na<sub>2</sub>, так как отвечающая ему электронная плотность выше. Тогда имеем:

Fe<sub>4</sub><sup>3+</sup>Fe<sub>36</sub><sup>2+</sup>Na<sub>16</sub><sup>+</sup>K<sub>8</sub><sup>+</sup>[PO<sub>4</sub>]<sub>48</sub>(OH)<sub>8</sub>,  
Z=1,  
Fe<sub>3</sub><sup>3+</sup>Fe<sub>14</sub><sup>2+</sup>Na<sub>4</sub><sup>+</sup>K<sub>2</sub><sup>+</sup>[PO<sub>4</sub>]<sub>12</sub>(OH)<sub>2</sub>,  
Z=4.



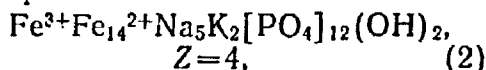
$$Z=1,$$



$$Z=4.$$

Легко увидеть, что в полученной идеализированной формуле 38 отрицательных зарядов не скомпенсированы 37 положительными. Структура дефектна не случайно: требование электронейтральности вещества обуславливает наличие частично занятых (из-за недопустимо короткого расстояния катион—катион) катионных позиций (Na<sub>3</sub> и Fe<sub>9</sub>).

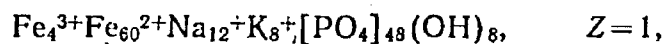
Добавив четыре возможных в ячейке катиона Na<sub>3</sub><sup>+</sup>, получим идеализированный конечный член



$$Z=4, \quad (2)$$

в структуре которого дефектна лишь одна позиция: катионы Na<sub>3</sub><sup>+</sup> статистически наполовину занимают восьмикратную позицию просторанственной группы C<sub>2</sub>/c.

Если предположить статистическое заполнение второй возможной дефектной позиции в структуре катионом Fe<sub>9</sub><sup>+</sup> (восьмивершинник Na<sub>6</sub> пустой), получим формулу второго возможного крайнего члена с максимальным количеством атомов железа (табл. 3, вариант 3):



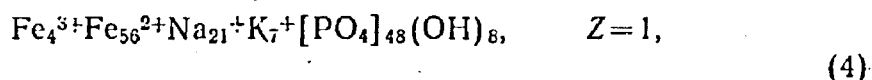
(3)



На 48 атомов P в (1) приходится 88 «крупных» катионов (Fe<sup>3+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>), а в (2) — 84, в то время как для минерала на элементарную ячейку предполагается максимальное число крупных катионов — 84 [7]. Важно отметить, что при понижении симметрии до C<sub>2</sub> возможна полностью бездефектная структура арройдита.

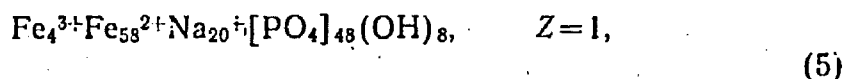
Теперь рассмотрим структуру арроядита с реально заполненными фосфором полиэдрами:  $P_6$  на 75 и  $P_7$  на 25%. В такой структуре возможно присутствие двух атомов  $Na_4$  (25%), так как одновременное заполнение позиций  $Na_4$  и  $P_6$  исключается (рис. 3) и, следовательно, шести  $Fe_8$  ( $Fe_8 + Na_4 \leq 8$ ). С другой стороны, из атомов, связанных с  $P_7$ , возможно наличие трех  $K_2$  (75%) и четырех  $Na_3$  ( $Na_3 - Na_3 = 1,301A$ ), либо трех  $K_3$ . Кроме занятых полностью позиций  $Fe_1^{3+}$ ,  $Fe_2^{2-6}$ ,  $Na_1^+$  и  $K_1^+$  будем считать занятыми целиком позиции  $Fe_7^{2+}$  ( $\square Fe_{10}^{2+}$ ) и  $Na_2^+$  ( $\square Na_5^+$ ). Тогда возможен следующий вариант заполнения позиций: максимальные количества  $Na_4$  — 2,  $Fe_8$  — 6 ( $\square Fe_{11}$ ),  $K_2$  — 3,  $Na_3$  — 4, при этом сумма положительных зарядов равна  $145^+$  вместо  $152^+$ , обеспечивающих электронейтральность формулы. Из возможных в структуре остались вакантными позиции  $Fe_9$  и  $Na_6$ , которые не могут быть заняты одновременно. Разделив катионы между этими позициями следующим образом:  $2Fe_9^{2+}$  (25%) +

+  $3Na_6^+$  (75%), получим сбалансированную формулу арроядита:

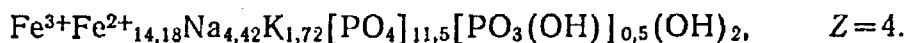


отношение  $Na:K=3:1 \rightarrow Na_{5,25}K_{1,75}$ .

Если предположить присутствие в структуре трех  $K_3^+$  вместо трех  $K_2^+$  и четырех  $Na_3^+$  (рис. 3), а заполнение остальных позиций оставить максимальным, в катионной части получим:  $Fe_4^{3+}Fe_{54}^{2+}Na_{14}^+K_7^+$  — сумма положительных зарядов равна  $141^+$ . Разместив в связанных  $Fe_9$  и  $Na_6$  позициях катионы таким образом, чтобы суммарный заряд был наибольшим:  $4Fe_9^{2+}$  (50%) +  $2Na_6^+$  (50%), получим дополнительно десять положительных зарядов, тогда как для электронейтральности формулы не хватает  $11^+$ . Такой вариант структуры реализовываться не может. Вариант заполнения позиции  $Fe_9^{2+}$  на 50% и  $Na_6^+$  на 50% возможен в случае частичного заполнения пары  $Na_3-K_2$  (при прочих равных условиях, т. е.  $2Na_4^+$  и  $6Fe_8^{2+}$  в структуре). Тогда для достижения электронейтральности формулы необходимо, чтобы при максимальном заполнении семирешетчатника  $Na_3$  полиэдр  $K_2$  оставался пустым (табл. 3, вариант 5):



В данном случае возможны вариации в заполнении полиэдров  $Na_3$  и  $K_2$ . Важно лишь, что суммарное количество одновалентных катионов в этих позициях было равно четырем. В расшифрованной кристаллической структуре синтетического арроядита распределение атомов по позициям (табл. 1) отвечает формуле:



Группы  $OH^-$  выделены на основании анализа баланса валентностей. Основой кристаллической структуры синтетического  $Fe^{3+}$ -арроядита является трехмерная вязь из полиэдров железа (рис. 5). В большинстве случаев октаэдры и пятивершинники железа объединены в

каркас через общие вершины, однако имеет место и их реберная связь. Так, в структуре присутствуют линейные группы из четырех объединенных ребрами Fe-полиэдров: Fe<sub>7</sub>—Fe<sub>6</sub>—Fe<sub>2</sub>—Fe<sub>4</sub> (табл. 2). При этом октаэдр Fe<sub>2</sub> и пятивершинник Fe<sub>6</sub> имеют каждый по два общих ребра с соседними Fe-полиэдрами. По общему ребру O<sub>17</sub>—O<sub>22</sub>=2,664 Å объ-

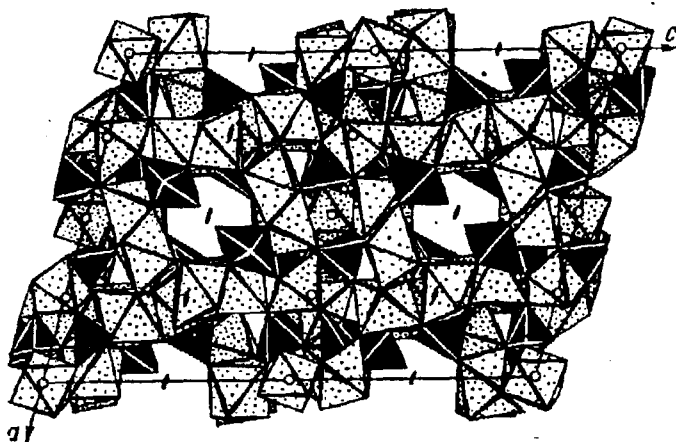


Рис. 5. Смешанный Fe-P-каркас в кристаллической структуре синтетического Fe<sup>3+</sup>-арроядита в проекции xz

единены также пятивершинники Fe<sub>8</sub> и Fe<sub>9</sub>. В смешанном Fe-P-каркасе арроядита все кислородные вершины P-тетраэдров поделены с вершинами Fe-полиэдров. Исключением составляет занятая OH-группой (O<sub>26</sub>) «висячая» вершина тетраэдра P<sub>7</sub>. Кроме того, как это не раз отмечалось для ортофосфатов [3], в структуре присутствуют связанные по ребру Fe и P-полиэдры. Общее ребро O<sub>8</sub>—O<sub>12</sub>=2,415 Å имеют Fe<sub>4</sub>-октаэдр и P<sub>5</sub>-тетраэдр; O<sub>10</sub>—O<sub>2</sub>=2,402 Å — Fe<sub>3</sub>-октаэдр и P<sub>4</sub>-тетраэдр; O<sub>4</sub>—O<sub>11</sub>=2,471 Å — Fe<sub>8</sub>-пятивершинник и P<sub>1</sub>-тетраэдр. Общие ребра с тетраэдрами фосфора имеют и более крупные Na- и K-полиэдры (табл. 2). Достаточно жесткий Fe-P-каркас арроядита с большим количеством пустот допускает многообразное их заполнение крупными катионами.

Проведенный анализ кристаллической структуры синтетического арроядита с небольшим набором катионов в его составе позволяет сделать вывод, что необычайная сложность кристаллохимии минералов арроядит-диккинсонитового ряда объясняется большим количеством возможных позиций для крупных катионов в структуре, таких как K<sup>+</sup>, Pb<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup>, Na<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup> и др. Расположение большинства из этих позиций на близком друг к другу расстоянии предопределяет дефектный характер образующихся кристаллических построек на основе достаточно стабильного Fe(Mn, Mg)-P-каркаса.

Исследование гидротермальной кристаллохимии в системах ACl — Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> — (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> — H<sub>2</sub>O, где A=Li, Na, K, Cs при различных концентрациях водных растворов ACl: 1%, 10, 30 и 50% показало образование арроядита лишь в случае 50% концентрации соли ACl. Следовательно, для образования минералов этой группы в природе необходима насыщенность среды минералообразования как минимум Na<sup>+</sup> и K<sup>+</sup>. В то же время различие химического состава синтетического и природного арроядитов, которое сводится в основном к отсутствию в структуре первого катионов Al<sup>3+</sup> и Ca<sup>2+</sup>, допускает образование этого минерала в природе в условиях дефицита Al<sup>3+</sup> и Ca<sup>2+</sup> с замещением этих катионов на Fe<sup>3+</sup> и Na<sup>+</sup> по схеме: Al<sup>3+</sup> ↔ Fe<sup>3+</sup>, Ca<sup>2+</sup> ↔ 2Na<sup>+</sup>.

Важно отметить, что синтез кристаллов арроядита при 450° C позволяет считать допустимой возможность его вторичного происхождения в результате воздействия на первичные минералы пегматита растворов, богатых Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup> [4].

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васильев Е. К., Кашаева Г. М., Ушаповская З. В. Рентгенометрический определитель минералов (класс фосфатов). М., 1974.
2. Крутик В. М., Пущаровский Д. Ю., Победимская Е. А., Белов Н. В. Кристаллическая структура аррожадита. — Кристаллогр., 1979, т. 24, № 4, с. 743—750.
3. Якубович О. В., Матвиенко Е. Н., Кабалов Ю. К. и др. Кристаллохимический анализ группы синтетических фосфатов Fe. — В кн.: Проблемы кристаллологии, вып. 3. Изд-во Моск. ун-та, 1982, с. 55—70.
4. Gordon E., Brown, Jr. The mineralogy of pegmatite. — Am. Mineral., 1982, vol. 67, N 1—2, p. 180—189.
5. Merlino S., Mellini M., Zanazzi P. F. Structure of arrojadite,  $\text{KNa}_4\text{CaMn}_2\text{Fe}_{10}\text{Al}(\text{PO}_4)_{12}(\text{OH}, \text{F})_2$ . — Acta Crist., 1981, vol. B37, part 9, p. 1733—1736.
6. Moor P. B., Ito J. Alluaudites, willieites, arrojadites. Crystal chemistry and nomenclature. — Mineral. mag., 1979, vol. 43, N 6, p. 227—235.
7. Moor P. B., Araki T., Merlino S., Mellini M., Zanazzi P. F. The arrojadite-dickinsonite series,  $\text{KNa}_4\text{Ca}(\text{Fe}, \text{Mn})_{10}^{2+}\text{Al}(\text{OH})_2(\text{PO}_4)_{12}$ . Crystal structure and crystal chemistry. — Am. Mineral., 1981, vol. 66, N 9—10, p. 1034—1049.

Поступила в редакцию  
08.06.84

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 4. ГЕОЛОГИЯ, 1986, № 1

УДК 556:51—7

С. М. Чесалов, А. П. Хаустов

### КЛАССИФИЦИРОВАНИЕ МНОГОМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ В ГИДРОГЕОЛОГИИ НА ОСНОВЕ ФАКТОРНОГО АНАЛИЗА

Проблема построения различных классификаций, способствующих исследованию закономерностей, свойственных природным явлениям и процессам различного масштаба, занимала одно из центральных мест в гидрогеологии на всех стадиях становления этой науки.

Исходя из принципов построения объективной классификации необходимо, чтобы классификация удовлетворяла следующим требованиям: 1) число классов не должно быть определено заранее, оно выявляется в процессе решения задачи и должно быть значительно меньше совокупности классифицируемых объектов; 2) при классификации объектов необходимо использовать одни и те же признаки (основания); 3) ни один из объектов не должен одновременно входить в разные классы; 4) параметры совокупности объектов, входящих в класс, должны существенно отличаться от таковых другого класса.

Применение факторного анализа (*R*-метода) для обработки многомерных наблюдений позволяет получить результаты, которые можно использовать в гидрогеологии в соответствии с приведенными требованиями. Основой факторного анализа является линейное преобразование многомерной информации в признаковом пространстве и выделение совокупностей некоррелированных признаков, что в значительной мере упрощает процедуры классифицирования и позволяет обосновать выбор информативных признаков.

При интерпретации результатов факторного анализа необходимо обращать внимание на то, что понятие «фактор» имеет смысл прежде всего в терминах математической модели и не является полностью адекватным широко распространенному понятию «фактора» в гидрогеологических исследованиях. Тем не менее в основе факторного анализа лежит предположение о том, что различные природные факторы