Баженов А. Г. К систематике пироксенов Ильменогорского комплекса метаморфических гранитоидных и щелочных пород // Уральский минералогический сборник. Миасс: Изд-во ИМин УрО РАН. 2001. № 11. С. 38—64.

Котельников А. П. Термодинамика в геологии / Тез. докл. I Всесоюз. симпоз. Суздаль, 1985. Т. 1. С. 90—91.

Котельников А. П. Изменение устойчивости серосодержащего скаполита в гидротермальных условиях # Геохимия. 1986. № 7. С. 987—996.

Краснобаев А. А., Ленных В. И., Жданова С. Н., Холоднов В. В. Реликты гранулитового метаморфизма в породах Ильменогорского комплекса (Южный Урал) // Докл. АН СССР. **1980.** С. 1193—1196.

Левин В. Я. Щелочная провинция Ильменских-Вишневых гор (формация нефелиновых сиенитов Урала). М.: Наука, 1974. 222 с.

Ленных В. И., Панков Ю. Д., Петров В. И. Петрология и метаморфизм мигматитового комплекса / Петрология и железорудные месторождения тараташского комплекса. Свердловск: Изд-во УНЦ АН СССР, 1978. С. 3—45.

Минералы. Справочник. М.: Наука, Т. 5: Каркасные силикаты. Вып. 2: Фельдшпатоиды / Под ред. Г. Б. Бокия, Б. Е. Боруцкого; отв. ред. Н. Н. Мозгова, М. Н. Соколова, **2003.** С. 283—374.

Моримото М., Гинзбург И. В., Зайферт Ф. А. и др. Номенклатура пироксенов // Минер. журн. 1989. Ч. 11. № 5. С. 67—83.

Никандров С. Н. Материалы к изучению пироксен-скаполитовых пород Ильменского заповедника. Миасс, 1980. С. 88.

Перчук Л. Л. Равновесия породообразующих минералов. М.: Наука, 1970. 391 с.

Рассказова А. Д. Петрология гранулитов селянкинского блока Ильменогорско-Вишневогорского комплекса (Южный Урал) / Автореф. дис. ... канд. геол.-мин. наук УрО Ин-та геологии и геохимии. Свердловск, 1988. 17 с.

Роненсон Б. М., Левин В. Я. и др. Отчет о научно-исследовательской работе по теме: Геология щелочного комплекса в северной части Ильменских гор, **1971.** С. 21.

Юрецкий В. Н., Петров В. И., Кузнецов Г. П. и др. Отчет Ильменогорского геологосъемочного отряда о результатах геологи СССР, 1982.

Ellis D. J., Green D. H. 4 change equibraiar Contrib. N Copied by Unit of Old. Milliony

in garnetclinopyroxene Fe-Mg ex-

under S.50 of Copyright Act 1968

Поступила в редакцию 21 марта 2006 г.

УДК 548.736

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

© А. А. ЗОЛОТАРЕВ, мл., * д. чл. С. В. КРИВОВИЧЕВ, * В. Н. ЯКОВЕНЧУК**

УТОЧНЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ МАНГАННЕПТУНИТА

A. A. ZOLOTAREV, jr., S. V. KRIVOVICHEV, V. N. YAKOVENCHUK. REFINEMENT OF THE MANGAN-NEPTUNITE STRUCTURE

 Санкт-Петербургский государственный университет, геологический факультет, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7/9
** Геологический институт КНЦ РАН, 184209, Апатиты, ул. Ферсмана, 14

Refinement of crystal structure of mangan-neptunite, the manganese analogue of neptunite, was carried out in the two space groups (*Cc* and *C2/c*). The mineral is monoclinic, the correct space group *Cc*; its unit cell parameters: a = 16.4821(6), b = 12.5195(4), c = 10.0292 (3) Å, $\beta = 115.474(1)^\circ$, V = 1868.31 Å³. The crystal structure was refined to $R_1 = 0.0307$ ($wR_2 = 0.0901$) on the base of 4892 observed reflections with $|F_{hkl}| \ge 4\sigma|F_{hkl}|$. The most suitable model is acentric one, that is connected with the Ti- and (Fe, Mn, Mg)-ordering in the structure. Ti-octahedra are strongly distorted and consist of one short bond Ti--O (1.7 Å), one long bond (2.2 Å) and four equal bonds (2.0 Å). Fc-octahedrons have regular shape, with all Fe--O bonds approximately equal.

Впервые публикации, посвященные структуре нептунита, появились в середине 60-х годов прошлого века (Борисов и др., 1965; Cannillo e. a., 1966). Эти первые струк-

Координаты и эквивалентные тепловые параметры атомов в структуре манганнентунита Atomic coordinates and equivalent atomic displacement in the structure of mangan-neptunite

Aromxyz $U_{eq} \cdot 100, A^2$ Sii0.14640(6)0.40807(7)0.0626(1)0.61(2)Si20.85522(6)0.59502(7)-0.0555(1)0.65(2)Si30.52338(6)0.22472(7)0.0836(1)0.70(2)Si40.47738(6)0.77184(7)-0.0855(1)0.65(2)Si50.76903(6)0.47365(7)0.1105(1)0.65(2)Si60.22894(6)0.52406(7)0.8915(1)0.65(2)Si70.89388(6)0.15208(7)0.0790(1)0.69(2)Si80.10519(6)0.85221(7)-0.0834(1)0.64(2)Ti10.34233(3)0.3264(5)0.10313(6)0.62(2)Ti20.08716(4)0.05326(4)0.11442(6)0.64(1)Fe1*0.66082(3)0.68390(5)-0.09788(5)1.18(1)Fe2*-0.08942(3)-0.0606(4)0.88359(6)1.22(1)Na10.2654(1)0.1974(1)0.3127(2)2.10(4)Na20.7368(1)0.620(2)0.0768(3)0.74(4)O20.0502(2)-0.0437(2)-0.0702(3)0.78(4)O30.4558(2)0.05302(2)0.07268(3)0.90(4)O30.4558(2)0.05302(2)0.0726(3)0.92(4)O40.5418(2)0.6704(2)-0.0658(3)0.90(4)O50.1086(2)0.1672(2)0.266(3)0.95(4)O60.8878(2)0.837(4)0.1162(4)0.54(4)O40.5418(2)0.6704(2)-0.256(3)0.87(4)O1<					
Sil $0.14640(6)$ $0.40807(7)$ $0.0626(1)$ $0.61(2)$ Si2 $0.85522(6)$ $0.59502(7)$ $-0.0595(1)$ $0.65(2)$ Si3 $0.52338(6)$ $0.22472(7)$ $0.0836(1)$ $0.70(2)$ Si4 $0.47738(6)$ $0.77184(7)$ $-0.0856(1)$ $0.65(2)$ Si5 $0.76903(6)$ $0.47365(7)$ $0.1105(1)$ $0.65(2)$ Si6 $0.22894(6)$ $0.52406(7)$ $0.0790(1)$ $0.69(2)$ Si8 $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10313(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fe1* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.9788(5)$ $1.18(1)$ Fe2* $-0.06942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.8102(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.507(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.509)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0788(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1068(2)$ $0.1672(2)$ $0.0256(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.2257(3)$ $0.025(4)$ $0.227(3)$ $0.97(4)$ O10	Атом	x	у	z	$U_{\rm eq} \cdot 100, {\rm \AA}^2$
Siz $0.14840(0)$ $0.4080(1)$ $0.0658(1)$ $0.0652(1)$ Si3 $0.52338(6)$ $0.22472(7)$ $0.0836(1)$ $0.70(2)$ Si4 $0.47738(6)$ $0.77184(7)$ $-0.0855(1)$ $0.65(2)$ Si5 $0.76903(6)$ $0.47365(7)$ $0.1105(1)$ $0.65(2)$ Si6 $0.22894(6)$ $0.52406(7)$ $0.9815(1)$ $0.65(2)$ Si7 $0.89388(6)$ $0.15208(7)$ $0.0790(1)$ $0.69(2)$ Si8 $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.11316(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.0532(64)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fe1* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fe2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88359(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.76(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.518(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.97(4)$ O6 0.8878	Sil	0.14640(6)	0 40807(7)	0.0626(1)	0.61(2)
3.2 $0.3522(0)$ $0.3552(1)$ $0.035(1)$ $0.00(2)$ $Si3$ $0.52338(6)$ $0.22127(7)$ $0.0836(1)$ $0.62(2)$ $Si5$ $0.76936(6)$ $0.47365(7)$ $0.1105(1)$ $0.65(2)$ $Si6$ $0.22894(6)$ $0.52406(7)$ $0.8915(1)$ $0.65(2)$ $Si7$ $0.89388(6)$ $0.15208(7)$ $0.0790(1)$ $0.69(2)$ $Si8$ $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ $Ti1$ $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10146(6)$ $0.62(2)$ $Ti2$ $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ $Fel*$ $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ $Fe2*$ $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2066(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.5216(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.04295(2)$ $0.2227(3)$ $0.05(4)$ O7 </td <td>\$12</td> <td>0.14640(6)</td> <td>0.40807(7)</td> <td>-0.0525(1)</td> <td>0.65(2)</td>	\$12	0.14640(6)	0.40807(7)	-0.0525(1)	0.65(2)
313 $0.2234(0)$ $0.2247(2(1)$ $0.0380(1)$ $0.70(2)$ Si4 $0.47738(6)$ $0.7718(47)$ $-0.0855(1)$ $0.62(2)$ Si5 $0.76903(6)$ $0.52406(7)$ $0.8915(1)$ $0.65(2)$ Si6 $0.22894(6)$ $0.52406(7)$ $0.8915(1)$ $0.65(2)$ Si8 $0.10519(6)$ $0.8522(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10313(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fe1* $0.66082(3)$ $-0.68390(5)$ $-0.9788(5)$ $1.18(1)$ Fe2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.8912(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.0131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.507(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0668(3)$ $0.99(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.872(4)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.790(2)$ <	Si2	0.52338(6)	0.39302(7)	-0.0335(1)	0.05(2)
Sit $0.77503(6)$ $0.77647(7)$ $-0.6357(7)$ $0.502(2)$ Si6 $0.22894(6)$ $0.52406(7)$ $0.8915(1)$ $0.65(2)$ Si7 $0.89388(6)$ $0.15208(7)$ $0.0790(1)$ $0.69(2)$ Si8 $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10313(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fe1* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fe2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88339(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.917(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.507(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.90(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.666(3)$ $0.99(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2666(3)$ $0.99(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8251(2)$ $0.729(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$	Si4	0.52558(6)	0.22472(7) 0.77184(7)	0.0855(1)	0.70(2)
S15 $0.74950(7)$ $0.74950(7)$ $0.7110(1)$ $0.50(2)$ Si6 $0.22894(6)$ $0.52406(7)$ $0.0790(1)$ $0.66(2)$ Si7 $0.89388(6)$ $0.15208(7)$ $0.0790(1)$ $0.66(2)$ Si8 $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.11313(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fel* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fc2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.768(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.220(3)$ $0.87(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8726(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ <td< td=""><td>514</td><td>0.76003(6)</td><td>0.77164(7) 0.47365(7)</td><td>-0.0355(1)</td><td>0.65(2)</td></td<>	514	0.76003(6)	0.77164(7) 0.47365(7)	-0.0355(1)	0.65(2)
3.6 0.223940 0.32400 0.37400 0.37101 $0.63(2)$ $Si7$ $0.89388(6)$ $0.15208(7)$ $0.0790(1)$ $0.69(2)$ $Si8$ $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ $Ti1$ $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10313(6)$ $0.62(2)$ $Ti2$ $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ $Fe1*$ $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ $Fc2*$ $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.22654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ O2 $0.0550(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0763(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0550(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0720(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.22606(3)$ $0.954(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.7233(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 0.7	315 Si6	0.70903(0)	0.47305(7)	0.1105(1)	0.05(2)
S17 $0.3938(0)$ $0.15208(7)$ $0.0790(1)$ $0.68(2)$ S18 $0.10519(6)$ $0.85221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10313(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fe1* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fe2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8912(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0477(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7233(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.6507(2)$ $0.0586(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2090(2)$ $0.6377(2)$ $0.0590(3)$ $0.77(4)$ O13 $0.2141(2)$ <t< td=""><td>510</td><td>0.22894(0)</td><td>0.32406(7)</td><td>0.8913(1)</td><td>0.63(2)</td></t<>	510	0.22894(0)	0.32406(7)	0.8913(1)	0.63(2)
318 $0.10319(6)$ $0.83221(7)$ $-0.0834(1)$ $0.64(2)$ Ti1 $0.34233(3)$ $0.3264(5)$ $0.10313(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.114462(6)$ $0.64(1)$ Fc1* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fc2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.76(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.99(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.5261(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.637(2)$ $0.0550(3)$ $0.39(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ O14 $0.7961(2)$ <t< td=""><td>517</td><td>0.89388(0)</td><td>0.15208(7)</td><td>0.0790(1)</td><td>0.09(2)</td></t<>	517	0.89388(0)	0.15208(7)	0.0790(1)	0.09(2)
111 $0.3264(3)$ $0.10515(6)$ $0.62(2)$ Ti2 $0.08716(4)$ $0.05326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fe1* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fc2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.507(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0688(3)$ $0.99(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2206(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8251(2)$ $0.227(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.227(3)$ $1.85(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.992(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.650(2)$ $0.0236(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0886(3)$ $0.97(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ <	518	0.10519(6)	0.85221(7)	-0.0834(1)	0.64(2)
112 $0.08716(4)$ $0.03326(4)$ $0.11462(6)$ $0.64(1)$ Fel* $0.66082(3)$ $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fe2* $-0.08942(3)$ $-0.06065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7237(3)$ $1.54(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0694(3)$ $0.86(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.99(4)$ O14 $0.7961(2)$ 0.51	[]] Tio	0.34233(3)	0.3264(5)	0.10313(6)	0.62(2)
Fe1* $0.68390(5)$ $-0.09788(5)$ $1.18(1)$ Fc2* $-0.08942(3)$ $-0.6065(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2666(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.51513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ O15 $0.8319(2)$ $0.513(2)$ $0.7784(3)$	112	0.08/16(4)	0.05326(4)	0.11462(6)	0.64(1)
$Fe2^*$ $-0.08942(3)$ $-0.0605(4)$ $0.88539(6)$ $1.22(1)$ Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.2497(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6377(2)$ $0.0690(3)$ $0.77(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0223(3)$ $0.94(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.6572(2)$ $0.0649(3)$ $0.93(4)$ O15 $0.8315(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ O17 $0.1586(2)$ $0.5513(2)$	Fel*	0.66082(3)	0.68390(5)	-0.09788(5)	1.18(1)
Na1 $0.2654(1)$ $0.1974(1)$ $0.3127(2)$ $2.10(4)$ Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.2497(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ O15 $0.8319(2)$ $0.4554(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O16 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.187(3)$ $0.93(4)$ O17 $0.1586(2)$ $0.513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ O18 $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ 0	Fc2*	-0.08942(3)	-0.06065(4)	0.88539(6)	1.22(1)
Na2 $0.7368(1)$ $0.8012(1)$ $0.6971(2)$ $1.70(3)$ K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.729(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ O15 $0.8319(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O16 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ O17 $0.1586(2)$ $0.513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ O18 $0.8385(2)$ $0.5113(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O19 $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ 0	Nal	0.2654(1)	0.1974(1)	0.3127(2)	2.10(4)
K1 $-0.00131(8)$ $0.42070(6)$ $0.2497(1)$ $2.34(1)$ Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ O15 $0.8319(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O16 $0.1672(2)$ $0.513(2)$ $0.724(3)$ $1.02(4)$ O17 $0.1586(2)$ $0.2114(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O18 $0.8385(2)$ $0.5113(2)$ $0.723(3)$ $0.92(4)$ O20 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.$	Na2	0.7368(1)	0.8012(1)	0.6971(2)	1.70(3)
Li1 $0.5007(6)$ $0.4349(4)$ $0.249(1)$ $1.50(9)$ OI $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ O2 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ O4 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ O5 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ O6 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ O7 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ O8 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ O9 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ O10 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ O12 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0600(3)$ $0.77(4)$ O14 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ O15 $0.8319(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O16 $0.1672(2)$ $0.515(2)$ $-0.0187(3)$ $0.99(4)$ O17 $0.1586(2)$ $0.2114(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ O18 $0.8385(2)$ $0.2114(2)$ $0.728(3)$ $1.18(5)$ O21 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ O22 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ -0	K1	-0.00131(8)	0.42070(6)	0.2497(1)	2.34(1)
O1 $0.9580(2)$ $0.0530(2)$ $0.0768(3)$ $0.74(4)$ $O2$ $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ $O3$ $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ $O4$ $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ $O5$ $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ $O6$ $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ $O7$ $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ $O8$ $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ $O9$ $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ $O10$ $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ $O11$ $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ $O12$ $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0699(3)$ $0.87(4)$ $O13$ $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ $O14$ $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ $O15$ $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0226(3)$ $0.99(4)$ $O16$ $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ $O17$ $0.1586(2)$ $0.5513(2)$ $0.7744(3)$ $1.02(4)$ $O18$ $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7744(3)$ $1.02(4)$ $O19$ $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ $O16$ $0.1672(2)$ $0.7944(2)$ $0.748(3)$ $1.18(5)$ $O21$ <td< td=""><td>Lil</td><td>0.5007(6)</td><td>0.4349(4)</td><td>0.249(1)</td><td>1.50(9)</td></td<>	Lil	0.5007(6)	0.4349(4)	0.249(1)	1.50(9)
02 $0.0502(2)$ $-0.0437(2)$ $-0.0702(3)$ $0.78(4)$ 03 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ 04 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ 05 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ 06 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ 07 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ 08 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ 09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.99(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 019 $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.513(2)$ $0.7744(3)$ $1.02(4)$ 020 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 <td< td=""><td>01</td><td>0.9580(2)</td><td>0.0530(2)</td><td>0.0768(3)</td><td>0.74(4)</td></td<>	01	0.9580(2)	0.0530(2)	0.0768(3)	0.74(4)
O3 $0.4558(2)$ $0.3229(2)$ $0.0729(3)$ $0.76(4)$ $O4$ $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ $O5$ $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ $O6$ $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ $O7$ $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ $O8$ $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ $O9$ $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ $O10$ $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ $O11$ $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ $O12$ $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ $O13$ $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ $O14$ $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ $O15$ $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ $O16$ $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ $O17$ $0.1586(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ $O18$ $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ $O19$ $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.22511(3)$ $1.02(4)$ $O20$ $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ $O21$ $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ $O22$ $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ $O22$	02	0.0502(2)	-0.0437(2)	-0.0702(3)	0.78(4)
04 $0.5418(2)$ $0.6704(2)$ $-0.0658(3)$ $0.90(4)$ 05 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ 06 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ 07 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ 08 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ 09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.99(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.1187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 020 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ 023 $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ 024 $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	O3	0.4558(2)	0.3229(2)	0.0729(3)	0.76(4)
05 $0.1086(2)$ $0.1672(2)$ $0.2606(3)$ $0.95(4)$ 06 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ 07 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ 08 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ 09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 020 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ 023 $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ 024 $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	O4	0.5418(2)	0.6704(2)	-0.0658(3)	0.90(4)
06 $0.8878(2)$ $0.8261(2)$ $0.7290(3)$ $1.24(5)$ 07 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ 08 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ 09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.5113(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.2114(2)$ $0.2511(3)$ $1.02(4)$ 019 $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2511(3)$ $1.02(4)$ 020 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ 023 $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ 024 $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	O5	0.1086(2)	0.1672(2)	0.2606(3)	0.95(4)
07 $0.3705(2)$ $0.4295(2)$ $0.2227(3)$ $1.05(4)$ 08 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ 09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.5113(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ 019 $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.7784(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ 023 $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ 024 $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	O6	0.8878(2)	0.8261(2)	0.7290(3)	1.24(5)
08 $0.6216(2)$ $0.5498(2)$ $0.7383(3)$ $1.15(4)$ 09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 019 $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2231(3)$ $0.92(4)$ 020 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ 023 $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ 024 $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	07	0.3705(2)	0.4295(2)	0.2227(3)	1.05(4)
09 $0.2052(2)$ $0.0727(2)$ $0.0992(3)$ $0.87(4)$ 010 $0.7901(2)$ $-0.0801(2)$ $-0.0894(3)$ $0.87(4)$ 011 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ 012 $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ 013 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ 014 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ 015 $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ 016 $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ 017 $0.1586(2)$ $0.5513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ 018 $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ 020 $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ 021 $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ 022 $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ 023 $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ 024 $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	08	0.6216(2)	0.5498(2)	0.7383(3)	1.15(4)
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	O9	0.2052(2)	0.0727(2)	0.0992(3)	0.87(4)
O11 $0.7116(2)$ $0.3650(2)$ $0.0386(3)$ $0.97(4)$ $O12$ $0.2900(2)$ $0.6307(2)$ $0.0500(3)$ $1.03(4)$ $O13$ $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ $O14$ $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ $O15$ $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ $O16$ $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ $O17$ $0.1586(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ $O18$ $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ $O19$ $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2511(3)$ $1.02(4)$ $O20$ $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ $O21$ $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ $O22$ $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ $O23$ $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ $O24$ $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	O10	0.7901(2)	-0.0801(2)	-0.0894(3)	0.87(4)
$\begin{array}{ c c c c c c c c c c c c c c c c c c c$	011	0.7116(2)	0.3650(2)	0.0386(3)	0.97(4)
O13 $0.2141(2)$ $0.3104(2)$ $0.0800(3)$ $0.77(4)$ $O14$ $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ $O15$ $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ $O16$ $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ $O17$ $0.1586(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ $O18$ $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ $O19$ $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2511(3)$ $1.02(4)$ $O20$ $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ $O21$ $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ $O22$ $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ $O23$ $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ $O24$ $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	012	0.2900(2)	0.6307(2)	0.0500(3)	1.03(4)
O14 $0.7961(2)$ $0.6972(2)$ $0.0649(3)$ $0.86(4)$ $O15$ $0.8319(2)$ $0.4954(2)$ $0.0236(3)$ $0.94(4)$ $O16$ $0.1672(2)$ $0.5105(2)$ $-0.0187(3)$ $0.93(4)$ $O17$ $0.1586(2)$ $0.4513(2)$ $0.2237(3)$ $0.99(4)$ $O18$ $0.8385(2)$ $0.5513(2)$ $0.7784(3)$ $1.02(4)$ $O19$ $0.3968(2)$ $0.2114(2)$ $0.2511(3)$ $1.02(4)$ $O20$ $0.6042(2)$ $0.7944(2)$ $0.7408(3)$ $1.18(5)$ $O21$ $0.4628(2)$ $0.1158(2)$ $0.0223(3)$ $0.92(4)$ $O22$ $0.5403(2)$ $0.8791(2)$ $-0.0266(3)$ $0.87(4)$ $O23$ $0.9252(2)$ $0.2609(2)$ $0.0225(3)$ $0.92(4)$ $O24$ $0.0684(2)$ $0.7458(2)$ $-0.0341(3)$ $1.04(4)$	013	0.2141(2)	0.3104(2)	0.0800(3)	0.77(4)
O150.8319(2)0.4954(2)0.0236(3)0.94(4)O160.1672(2)0.5105(2)-0.0187(3)0.93(4)O170.1586(2)0.4513(2)0.2237(3)0.99(4)O180.8385(2)0.5513(2)0.7784(3)1.02(4)O190.3968(2)0.2114(2)0.2511(3)1.02(4)O200.6042(2)0.7944(2)0.7408(3)1.18(5)O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O14	0.7961(2)	0.6972(2)	0.0649(3)	0.86(4)
O160.1672(2)0.5105(2)-0.0187(3)0.93(4)O170.1586(2)0.4513(2)0.2237(3)0.99(4)O180.8385(2)0.5513(2)0.7784(3)1.02(4)O190.3968(2)0.2114(2)0.2511(3)1.02(4)O200.6042(2)0.7944(2)0.7408(3)1.18(5)O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O15	0.8319(2)	0.4954(2)	0.0236(3)	0.94(4)
O170.1586(2)0.4513(2)0.2237(3)0.99(4)O180.8385(2)0.5513(2)0.7784(3)1.02(4)O190.3968(2)0.2114(2)0.2511(3)1.02(4)O200.6042(2)0.7944(2)0.7408(3)1.18(5)O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O16	0.1672(2)	0.5105(2)	-0.0187(3)	0.93(4)
O180.8385(2)0.5513(2)0.7784(3)1.02(4)O190.3968(2)0.2114(2)0.2511(3)1.02(4)O200.6042(2)0.7944(2)0.7408(3)1.18(5)O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	017	0.1586(2)	0.4513(2)	0.2237(3)	0.99(4)
O190.3968(2)0.2114(2)0.2511(3)1.02(4)O200.6042(2)0.7944(2)0.7408(3)1.18(5)O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O18	0.8385(2)	0.5513(2)	0.7784(3)	1.02(4)
O200.6042(2)0.7944(2)0.7408(3)1.18(5)O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O19	0.3968(2)	0.2114(2)	0.2511(3)	1.02(4)
O210.4628(2)0.1158(2)0.0223(3)0.92(4)O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O20	0.6042(2)	0.7944(2)	0.7408(3)	1.18(5)
O220.5403(2)0.8791(2)-0.0266(3)0.87(4)O230.9252(2)0.2609(2)0.0225(3)0.92(4)O240.0684(2)0.7458(2)-0.0341(3)1.04(4)	O21	0.4628(2)	0.1158(2)	0.0223(3)	0.92(4)
O23 0.9252(2) 0.2609(2) 0.0225(3) 0.92(4) O24 0.0684(2) 0.7458(2) -0.0341(3) 1.04(4)	O22	0.5403(2)	0.8791(2)	-0.0266(3)	0.87(4)
O24 0.0684(2) 0.7458(2) -0.0341(3) 1.04(4)	O23	0.9252(2)	0.2609(2)	0.0225(3)	0.92(4)
	O24	0.0684(2)	0.7458(2)	-0.0341(3)	1.04(4)

Примечание. * Позиции Fe заняты атомами Fe, Mn, Mg.

Межатомные расстояния (Å) в структуре минерала манганнентунит	a
Interatomic distances (Å) in structure of mangan-neptunite	

Si1-013	1 (12(2)	Si805	1 (00(2)	Li1-07	2.048(0)
Sil_022	1.015(3)	Si8_02	1.009(3)		2.048(9)
Sil 017	1.620(3)	Si8 024	1.627(2)		2.031())
SI1_016	1.032(3)	Si8 011	1.027(3)	Li102	2.120(9)
311-010	1.034(2)	510011	1.002(5)	1:1 02	2.135(9)
<5110>	1.020	<5180>	1.030		2.125(9)
S:2 014	1 505(2)	T:1 07	1 712(2)		2.151()
SI2014 Si2014	1.393(2)	Til 010	1.712(2)	<li10></li10>	2.100
S12021	1.622(3)	TI-019	1.958(3)	N 1 05	0.427(2)
512018	1.622(3)	11103	2.018(3)	Nal-05	2.437(3)
S12015	1.635(2)	111-013	2.032(3)	Na109	2.485(3)
<s120></s120>	1.618		2.120(2)	Nal—O12	2.493(3)
		Til—Ol4	2.195(2)	Nal-OI9	2.500(3)
Si3	1.585(3)	<ti10></ti10>	2.006	Nal-O13	2.542(3)
Si3—O3	1.631(2)			Nal—O23	2.621(3)
Si3O21	1.645(2)	Ti2—08	1.709(2)	Na1—011	2.874(3)
Si3—O24	1.663(3)	Ti2—O5	1.964(2)	<na1—0></na1—0>	2.565
<\$i3O>	1.631	Ti201	1.996(3)		
		Ti2—O9	2.032(3)	Na2—O6	2.389(3)
Si404	1.612(3)	Ti2O2	2.076(2)	Na2O20	2.409(3)
Si4019	1.620(3)	Ti204	2.195(3)	Na2—O10	2.439(3)
Si4—O22	1.643(2)	<ti2o></ti2o>	1.995	Na2014	2.518(3)
Si4	1.653(3)			Na2—O11	2.541(3)
<\$i40>	1.632	Fe1	2.026(3)	Na2	2.810(3)
		Fe1-014	2.115(3)	<na1o></na1o>	2.518
Si5—O9	1.599(3)	Fe104	2.127(3)		
Si5018	1.609(3)	Fel-O8	2.241(2)	K1—017	2.783(3)
Si5—O11	1.636(2)	Fe1—013	2.261(2)	K1018	2.798(3)
Si5-015	1.638(3)	Fe1—O9	2.266(2)	K1024	2.868(3)
<si5o></si5o>	1.620	<fc10></fc10>	2.173	K1—015	2.866(3)
				K1—O23	2.878(3)
Si6-010	1.608(3)	Fc206	2.027(3)	K1016	2.882(3)
Si6—017	1.611(3)	Fe2010	2.120(3)	K1	3.071(3)
Si6012	1.621(3)	Fe2—O2	2.158(3)	K1022	3.171(3)
Si6016	1.631(3)	Fe2—O7	2.206(2)	K1—O21	3.218(2)
<si6o></si6o>	1.618	Fe2—O3	2.239(2)	K1	3.235(2)
		Fe2—O1	2.243(2)	<k1o></k1o>	2.977
Si706	1.574(3)	<fe2o></fe2o>	2.166		
Si7—O1	1.636(3)				
Si7023	1.642(2)				
Si7012	1.663(3)				
<\$i7—0>	1.629				

турные исследования проводились с помощью фотометода с визуальной оценкой интенсивности дифракционных максимумов. Нептунит был определен как центросимметричный минерал с пространственной группой C2/c [R = 11 % (Cannillo e. a., 1966)]. В ходе исследований также стало известно, что кристаллы нептунита обладают пьезоэлектрическим эффектом, что возможно только в нецентросимметричных структурах. Поэтому было сделано заключение о необходимости дополнительных структурных исследований минерала нептунита и его возможной нецентросимметричности (пр. гр. Cc), возникающей в результате катионного упорядочения в цепочках октаэдров.



Рис. 1. Октаэдрические цепочки TiO₆—(Fe,Mn,Mg)O₆, вытянутые вдоль направлений [110] и [110]. Fig. 1. Octahedral TiO₆—(Fe,Mn,Mg)O₆ chains running along [110] and [110] directions.

Более детальное и всестороннее исследование и уточнение структуры нептунита было проведено методами монокристалльного нейтроно- и рентгеноструктурного анализов при различных температурах, а также методом мёссбауэровской спектроскопии (Kunz e. a., 1991). Данные структурного исследования показали, что минерал нецентросимметричный и описывается в рамках пространственной группы Сс. В структуре происходит упорядочение Ті и (Fe,Mn,Mg) по октаэдрическим позициям. В настоящей работе приводятся данные, полученные в результате структурных исследований марганцевого аналога нептунита — манганнептунита. Образцы минерала, взятые для исследований, были обнаружены в одной из гидротермальных жил горы Каскаснюнчарр Хибинского щелочного массива (Yakovenchuk e. a., 2005). Отобранный для структурного анализа монокристалл был установлен на дифрактометре SMART APEX, оснащенном плоским CCD детектором. Параметры элементарной ячейки определены и уточнены методом наименьших квадратов. Минерал моноклинный (пр. гр. Cc), a = 16.4821(6), b = 12.5195(4), c = 10.0292(3) Å, $\beta = 115.474(1)^\circ$, V == 1868.31 Å³. Поправка на поглощение была введена с учетом формы кристалла. Расшифровка структуры проводилась с помощью пакета программ Wingx32. Структура была решена прямыми методами и уточнена до $R_1 = 0.0307$ ($wR_2 = 0.0901$) для 4892 рефлексов с $|F_{hkl}| \ge 4\sigma |F_{hkl}|$. Окончательная модель включала в себя координаты и анизотропные тепловые параметры для всех атомов (табл. 1). Межатомные расстояния приведены в табл. 2. Кроме уточнения структуры манганнептунита в рамках пространственной группы Сс для сравнения нами была также уточнена эта структура в рамках пространственной группы C2/c до R₁ = 0.0710 (wR₂ = 0.3164) для 3647 рефлексов с $|F_{hkl}| \ge 4\sigma |F_{hkl}|$. Из этого сравнения отчетливо следует, что более адекватной моделью для описания структуры манганнептунита, как и нептунита (Kunz e. a., 1991), является нецентросимметричная модель, что связано с упорядочением Ti и (Fe,Mn,Mg) в структуре. Кристаллохимическая формула минерала имеет вид $KNa_2Li(Fe,Mn)_2Ti_2(Si_8O_{24}).$

Основу структуры манганнептунита составляет трехмерный кремнекислородный каркас, состоящий из цепочек вершинносвязанных тетраэдров SiO₄, вытянутых вдоль направлений [110] и [110] и связанных друг с другом вдоль [001]. Такой трехмерный кремнекислородный каркас переплетается в манганнептуните с подобным каркасом, состоящим из цепочек реберносвязанных октаэдров TiO₆ и (Fe,Mn,Mg)O₆, также вы-



Рис. 2. Изображение искаженного октаэдра Ti2: короткая связь Ti2—O8 (1.7 Å), длинная связь Ti2—O4 (2.2 Å) и четыре одинаковые связи Ti2—O1, Ti2—O2, Ti2—O5, Ti2—O9 (2.0 Å).

Fig. 2. Image of the distorted Ti2 octahedron: short bond Ti2—O8 (1.7 Å), long bond Ti2—O4 (2.2 Å), and four equal bonds Ti2—O1, Ti2—O2, Ti2—O5, Ti2—O9 (2.0 Å).

тянутых вдоль направлений [110] и [110] и связанных друг с другом вдоль [001] (рис. 1). Стоит отметить, что как в нептуните, так и в манганнептуните наблюдается упорядочение катионных позиций Ti и (Fe,Mn,Mg). В структуре выделяется две октаэдрические позиции Ti и две октаэдрические позиции (Fe,Mn,Mg), которые чередуются между собой в цепочке, как показано на рис. 1. При этом октаэдры Ti сильно искажены: длина одной связи Ti—O составляет около 1.7 Å, второй — около 2.2 Å; четыре оставшиеся связи имеют длину около 2.0 Å (рис. 2). Напротив, октаэдры Fe имеют правильную форму, с примерно одинаковыми связями Fe—O, что помогает четко различать позиции Ti и (Fe,Mn,Mg) и говорить о их упорядочении в структуре (табл. 2). Искаженные октаэдры титана также наблюдаются и в других титаносодержащих минералах (титаните — Speer, Gibbs, 1976; тетрагональном BaTiO₃ — Harada e. a., 1970; бруките — Meagher, Lager, 1979). Иногда подобное неравномерное распределение длин связи Ti—O приводит к пятерной координации титана, как например во фресноите (Moore, Louisnathan, 1969).

Помимо описанных выше атомов каркаса в структуре присутствуют также внекаркасные катионы (Li1), (Na1, Na2) и (K1).

Таким образом, уточнение структуры манганнептунита показало, что в ней наблюдается упорядочение октаэдрических катионных позиций Ti и (Fe,Mn,Mg), вследствие чего минерал не имеет центра симметрии и описывается в рамках пространственной группы *Cc*.

Работа выполнена при поддержке Швейцарского научного фонда и гранта INTAS (05-109-4549).

Список литературы

Борисов С. В., Клевцов Р. Ф., Бакакин В. В., Белов Н. В. Кристаллическая структура нептунита # Кристаллография. 1965. Т. 10. № 6. С. 815—821.

Cannillo E., Mazzi F., Rossi G. The crystal structure of neptunite // Acta Crystallogr. 1966. Vol. 22. P. 200-208.

Harada J., Pedersen T., Barnea Z. X-ray and neutron diffraction study of tetragonal barium titanate // Acta Crystallogr. 1970. Vol. A 26. P. 336-344.

Kunz M, Armbruster T., Lager G. A. e. a. Fe, Ti Ordering and Octahedral Distortions in Acentric Neptunite: Temperature Depend X-ray and Neutron Structure Refinements and Mossbauer Spectroscopy // Phys. Chem. Miner. **1991.** Vol. 18. P. 199-213.

Meagher E. P., Lager G. A. Polyhedral thermal expansion in the TiO₂ polymorphs: refinement of the crystal structures of rutile and brookite at hight temperature # Canad. Miner. **1979.** Vol. 17. P. 77–85.

Moore P. B., Louisnathan S. J. The crystal structure of fresnoite, Ba₂(TiO)Si₂O₇ # Z. Kristallogr. 1969. Vol. 130. P. 438-448.

Speer A. J., Gibbs G. V. The crystal structure of synthetic titanite, CaTiOSiO₄, and domain textures of nature titanites // Amer. Miner. **1976.** Vol. 61. P. 238--247.

Yakovenchuk V. N., Ivanyuk G. Yu., Pakhomovsky Ya. A., Men'shikov Yu. P. Khibiny. Laplandia Minerals, 2005. 467 p.

Поступила в редакцию 22 марта 2006 г.