

Минерал краликит $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ из отложений фумарол лавового поля Южного прорыва БТТИ

Вегасова Л.П.^{1,2}, Шаблинский А.П.², Филатов С.К.³, Авдонцева М.С.³, Москалева С.В.¹

Kralikite $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ from the fumarole deposits of the lava field of the GFTE Southern breakthrough

Vergasova L.P., Shablinskii A.P., Filatov S.K., Avdontceva M.S., Moskaleva S.V.

¹ *Институт вулканологии и сейсмологии ДВО РАН, г. Петропавловск-Камчатский; e-mail: vlp@kscnet.ru*

² *Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова, г. Санкт-Петербург*

³ *Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург*

В работе описана находка редкого минерала краликита $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ из отложений фумарол лавового поля Южного прорыва БТТИ. Находка подтверждена расшифровкой и уточнением кристаллической структуры, химический анализ проведен методом рентгеноспектрального анализа.

Краликит $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ был обнаружен в пределах лавового поля Южного прорыва Большого трещинного Толбачинского извержения (ЮП БТТИ) в ходе детальных наблюдений за расходом лавового материала в ноябре 1976 г. [1]. Впервые минерал был обнаружен совсем недавно в Чехии [3]. По данным авторов октябрь-ноябрь месяцы на ЮП БТТИ характеризуются одним из этапов вулканической активности, что проявилось в значительном увеличении расхода лавового материала, поступающего на поверхность Земли в виде эффузивных излияний.

Минерал был установлен в скрытокристаллических хрупких корочках незначительной мощности (до 1 мм) грязно-белого цвета, отобранных на поверхности обломков лавового материала изверженных пород.

Химический состав изучен с использованием рентгеноспектрального анализа на сканирующем электронном микроскопе TESCAN Vega3, оснащенный энергодисперсионным детектором X-MAX-80 mm^2 . Исследование выполнено при следующем режиме: $U=20$ кВ, $I=0.730$ нА, диаметр пучка 0.22 нм. (аналитик С.В. Москалёва, ИВиС ДВО РАН). Обработка полученных данных осуществлялась с использованием программного пакета AZtec. Также на базе сканирующей электронной микроскопии были получены изображения минералов класса фторидов из фумарол БТТИ. Эмпирическая формула $\text{Ba}_{0.987}\text{Cl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Препарат для микронзондового анализа был приготовлен из отдельных зерен исследуемого минерала, наклеенных на подложку. Напыление зерен не осуществлялось. На рисунке видно, что частицы исследуемого вещества неоднородны и представлены как водосодержащими фазами, так и фазой без воды. Предварительно безводная фаза (светлые участки) нами интерпретируется как BaCl_2 , и в таком случае соответствует другому редкому минералу веграндиситу, ранее также обнаруженному только в Чехии [2].

Рентгеноструктурный анализ был проведен на монокристалльном дифрактометре Rigaku XtaLAB Synerdgy. Кристаллическая структура уточнена на основе 1131 рефлексов до $R_1=0.036$ ($a=6.7256(4)$ Å, $b=10.9080(6)$ Å, $c=7.1293(4)$ Å, $\beta=91.106(5)^\circ$, $V=522.93(5)$ Å³, пространственная группа $P2_1/n$). По результатам уточнения установлено, что структура полностью соответствует синтетическому аналогу [4, 5]. Кристаллическая структура слоистая и содержит одну позицию для атомов Ва, две позиции для атомов Сl и две молекулы воды (две независимые позиции для атомов О, и 4 для атомов Н). Изогнутые слои, простирающиеся в плоскости ac , состоят из полиэдров $\text{BaCl}_4(\text{H}_2\text{O})_4$, связанных между собой по ребрам $\text{Cl}-\text{H}_2\text{O}$ с длинами связей 2.839(8)-3.248(3) Å. Каждый атом Ва образует также еще одну связь с Cl1 из соседнего слоя длиной 3.340(3) Å, завершая свой координационный полиэдр. Таким образом,

слои соединяются между собой через полиэдры $\text{BaCl}_5(\text{H}_2\text{O})$ через ребра C11–C11 и вершины. Атомы водорода были зафиксированы с использованием модели «наездника» с длинами связей H1a–O1, H1b–O1, H2a–O2 и H2b–O2 равными 0.970 Å. Внутри слоя H1a и H2b образуют водородные связи с C12 и C11, соответственно, а H1b связан с C12 из соседнего слоя. H2b более слабо координирован C11 и C12, находящимися в соседнем слое.

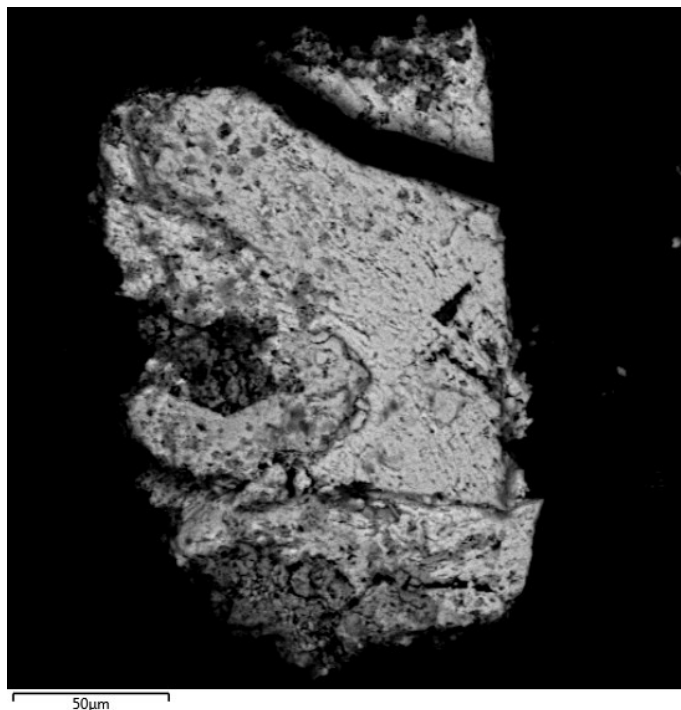


Рисунок. Электронно-микроскопическое изображение минерала краликита.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИВиС ДВО РАН по теме НИР «Роль гидротермальных систем Курило-Камчатской вулканической дуги в перераспределении мантийного и корового вещества в процессе минерало-рудогенеза» (FWME-2024-0006) и при поддержке гранта РФФ 23-77-10066 «Поиск новых минералов с вулкана Толбачик и дизайн новых минералоподобных соединений на их основе для твердотельных электролитов Na- и K-ионных аккумуляторов» (минералогическое исследование и рентгеноструктурный анализ).

Список литературы

1. *Леонов В.Л.* О возможности сопоставления вулканической и солнечной активности на примере БТТИ // Вулканология и сейсмология. 1979. № 6. С. 62-66.
2. *Koděra P., Majzlan J., Pollok K. et al.* Vegrandisite, IMA 2023-045a, in IMA Commission on New Minerals, Nomenclature and Classification (CNMNC) – Newsletter 80 // European Journal of Mineralogy. 2024. V. 36. P. 599-604. <https://doi.org/10.5194/ejm-36-599-2024>
3. *Matýšek D., Jirásek J., Majzlan J. et al.* Králíkite, IMA 2019-070a, in IMA Commission on New Minerals, Nomenclature and Classification (CNMNC) – Newsletter 81 // European Journal of Mineralogy. 2024. V. 36. P. 917-923.
4. *Padmanabhan V.M., Busing W.R., Levy H.A.* Barium chloride dihydrate by neutron diffraction // Acta Crystallographica B. 1978. V. 34. P. 2290-2292.
5. *Ting V.P., Henry P.F., Schmidtman M. et al.* Probing hydrogen positions in hydrous compounds: information from parametric neutron powder diffraction studies // Physical Chemistry Chemical Physics. 2012. V. 14. P. 6914-6921.