

Ферроиндиалит и его уникальная симметрия: структура минералов группы берилла

Р.К.Расцветаева

Институт кристаллографии имени А.В.Шубникова Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» РАН (Москва, Россия)

Методом монокристалльного рентгеноструктурного анализа изучен минерал группы кордиерита, найденный на месторождении Беллерберг (Айфель, Германия). Особенность его химического состава — повышенное содержание Fe по сравнению с Mg. Параметры гексагональной ячейки: $a = 9.8759(3) \text{ \AA}$, $c = 9.3102(3) \text{ \AA}$, $V = 786.40(3) \text{ \AA}^3$. Структура решена в рамках пространственной группы $P622$ и уточнена до R -фактора 5.9% по 860 отражениям с $|F| > 3\sigma(F)$. Кристаллохимическая формула ($Z = 1$): $K_{0.12}[Fe_2][(Mg_{0.85}Fe_{0.15})_2Al_3[Al_{1.5}Si_{1.5}][Si_{0.4}Al_{3.6}]O_{36}]$, где квадратными скобками выделены составы октаэдров и тетраэдров. Минерал представляет собой Fe-аналог индиалита с высокоупорядоченной структурой, пониженной симметрией и впервые установленной в природных соединениях пространственной группой $P622$.

Ключевые слова: ферроиндиалит, группа берилла, кристаллическая структура, симметрия.

Однажды к нам обратились немецкие коллеги с предложением исследовать потенциально новый минерал группы берилла, найденный в Германии в действующем базальтовом карьере Каспар на горе Беллерберг вулканического района Айфель. Он отличался от индиалита $Mg_2Al_3(AlSi_5O_{18})$ повышенным содержанием железа, которое доминирует над магнием. Высокожелезистый индиалит — редкий минерал, и найден он в пирометаморфизованном ксенолите впервые. Задача казалась предельно простой, так как структура индиалита хорошо известна, а заменить магний железом — не проблема. Эти два элемента хорошо различимы по атомному весу. Конечно же, мы согласились, и нам передали для исследования коричневато-фиолетовые кристаллы призматической формы до 1.5 мм в длину.

Микронзондовый химический анализ образца установил соответствие составу индиалита и подтвердил преобладание в нем железа над магнием: $K_{0.06}Na_{0.03}Fe_{1.15}^{2+}Mg_{0.78}Mn_{0.10}Al_{3.79}Fe_{0.21}^{3+}Si_{4.98}O_{18}$.



Рамиза Кераровна Расцветаева, доктор геолого-минералогических наук, главный научный сотрудник Института кристаллографии имени А.В.Шубникова РАН, соавтор открытий более 85 минералов. Область научных интересов — структурная минералогия, кристаллохимия, рентгеноструктурный анализ. Постоянный автор «Природы». e-mail: rast.crys@gmail.com; rascrystal.ru

Однако при дальнейшем исследовании нас ждал сюрприз. В дифракционном наборе из 48000 отражений присутствовало большое количество (~5%, включая эквивалентные по симметрии) неслабых (много больше 3σ) отражений типа hhl с $l = 2n + 1$, $h0l$ с $l = 2n + 1$ и $00l$ с $l \neq 3n$ и $l \neq 6n$. А это значит, что симметрия структуры не отвечает общепринятой пространственной группе $P6/mcc$. Попытки решить структуру с понижением симметрии в рамках осевой группы $P6_322$, а также ряда пространственных групп, содержащих плоскости симметрии зеркального отражения, не привели к успеху. И толь-

ко в осевой группе $P622$ была получена структурная модель минерала прямыми методами с последующей процедурой последовательных приближений, реализованных в комплексе программ AREN [1]. Уточнение структуры в анизотропном приближении привело к R -фактору 5.9 % по 860 независимым отражениям.

Порядок и беспорядок

Что же произошло со структурой? Почему понизилась ее симметрия? Ведь топологически она аналогична индиалитовой [2] с параметрами ячейки в пределах: $a = 9.79\text{--}9.86 \text{ \AA}$, $c = 9.28\text{--}9.36 \text{ \AA}$. Ее основу составляет каркас из T -тетраэдров и M -октаэдров: Si-тетраэдры образуют шестичленные кольца $[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$, развернутые относительно друг друга на 25° и скрепленные октаэдрами Mg (или Fe) и одиночными тетраэдрами Al. В каркасе имеются каналы, проходящие через центры колец и заполненные крупными катионами и/или молекулами воды. Как

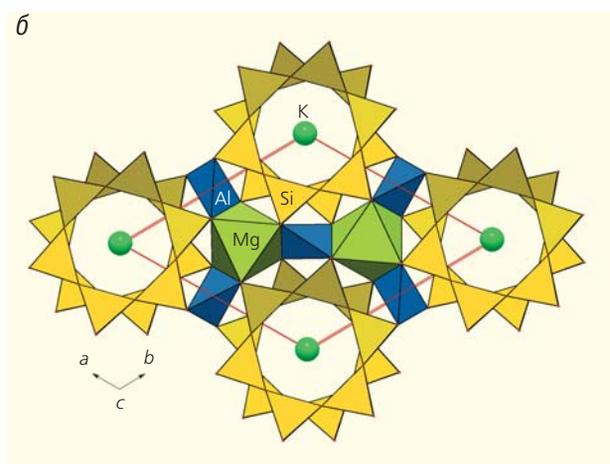
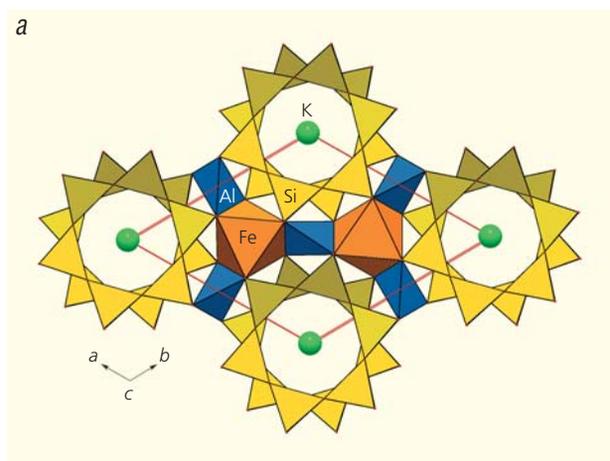


Рис.1. Фрагменты структуры ферроиндиалита в проекции на плоскость (001) на уровне $z = 0$ (а) и $z = 0.5$ (б).

и в индиалите, в данном образце в каналах находится позиция, на 6% заселенная K с небольшой примесью Na (рис.1).

Все как обычно, но не совсем. По сравнению со структурой индиалита с пространственной группой $P6/mcs$, в которой присутствует один независимый октаэдр, в исследованном минерале имеются два независимых октаэдра, которые заселены Fe и Mg соответственно (см. рис.1,а,б). Средние значения расстояний катион–анион (2.155 и 2.136 \AA) соответствуют ионным радиусам этих элементов (0.74 и 0.66 \AA). В исследованном минерале наблюдается также упорядоченное распределение Al и Si в тетраэдрических позициях, отмечаемое и для ромбических представителей группы берилла. В структуре неупорядоченного индиалита две тетраэдрические позиции заняты Al с примесью Fe и Si с примесью Al соответственно. В упорядоченном же индиалите присутствуют не два, а три независимых тетраэдра, которые характеризуются собственными составами T -позиций. Тетраэдр Al1 занят полностью алюминием, а его несколько увеличенные размеры позволяют разместиться в нем небольшому количеству железа (среднее расстояние Al1–O = 1.745 \AA). Тетраэдр Al2 с меньшими размерами отвечает составу с приблизительно равным количеством Al и Si (Al2–O = 1.684 \AA), в то время как кремний доминирует в Si-тетраэдре (среднее расстояние Si–O = 1.653 \AA). Таким образом, распределение Fe и Mg по разным этажам структуры сопровождается распределением Al на первом этаже вместе с Fe и (Al,Si) и на втором этаже – вместе с Mg (рис.2).

Основные особенности состава и строения минерала отражены в его кристаллохимической формуле ($Z = 1$): $\text{K}_{0.12}[\text{Fe}_2][(\text{Mg}_{0.85}\text{Fe}_{0.15})_2\text{Al}_3[\text{Al}_{1.5}\text{Si}_{1.5}][\text{Si}_{8.4}\text{Al}_{3.6}]\text{O}_{36}$,

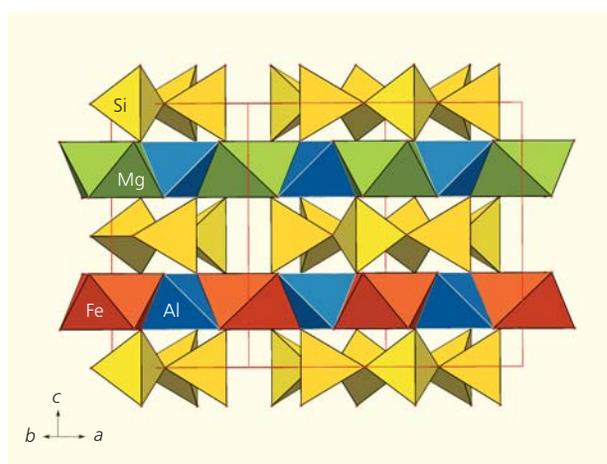


Рис.2. Объединение шестерных Si_6O -колец вдоль c -оси в структуре ферроиндиалита.

где квадратными скобками выделены составы октаэдров и тетраэдров. Хотя формула указывала на преобладание железа над магнием только в одном из октаэдров, его суммарное количество было в пользу железа.

P622 — быть или не быть?

Но как быть с симметрией? Понижение симметрии не входило в планы моих соавторов. Это вызвало бы дополнительные вопросы у членов Комиссии по новым минералам, номенклатуре и классификации (КНМНК). Тем более, что и сама группа симметрии могла вызывать подозрения. Найденная осевая пространственная группа P622 считается подгруппой P6/mcc. Согласно статистическому анализу распределения кристаллических структур по отдельным пространственным группам в неорганических кристаллах и минералах, в пространственной группе P622 кристаллизуются только два синтетических соединения [3], и она относится к числу редких (т.е. с малым числом представителей). А в природных минералах на тот период времени она и вообще была встречена впервые.

Вопрос о симметрии индиалита и раньше был дискуссионным. Редко встречающийся минерал часто приурочен к пирогенным породам — продуктам плавления осадочных пород при горении каменного угля [4]. Впервые его обнаружили в Бокаро (Индия), где он был описан как магниевый кордиерит и получил свое название по месту находки [5]. Затем его находили и в других регионах: Германии, Италии, США (Вайоминге, Неваде, Южной Дакоте) и в Японии. В работе П.Даниелса сообщается, что при повторном исследовании образца из Бокаро на прецессионных дифрактограммах и вейсенбергограммах обнаружили слабые рефлексы, не согласующиеся с ранее установленной группой P6/mcc [6]. Чтобы проверить этот результат, автор вырастил кристаллы калиево-магнезиевого индиалита. Они также обладали найденными в природном образце слабыми рефлексами, запрещающими плоскость скольжения *c*. По мнению Даниелса, истинная симметрия индиалита отвечает не пространственной группе P6/mcc, а одной из ее подгрупп — P6 или P6. И даже возможен переход в тригональную симметрию (пространственная группа P3). Понижение симметрии индиалита автор цитируемой работы связывает с упорядочением Si и Al в тетраэдрах структуры, а также вхождением атомов K в позицию с координатами $z \approx 0.14$ вместо 0.25 в рамках симметрии P6/mcc. Однако авторы более поздней работы, исследуя высокомагнезиальный индиалит из пород вулкана

Сомма-Везувий (Италия), не нашли в его дифракционной картине значительных отклонений от пространственной группы P6/mcc, которая была установлена для образца из Бокаро [7].

Исследованный нами минерал оптически аномально двуосный, отрицательный: $n_p = 1.539(2)$, $n_m = 1.552(2)$, $n_g = 1.554(2)$, $2V_{изм} = 30(10)^\circ$, $2V_{выч} = 43^\circ$ [8], в то время как индиалит оптически одноосный ($n_e = 1.532-1.539$, $n_o = 1.537-1.541$) [9]. Аномальная двуосность не считается редкостью для различных тригональных и гексагональных минералов (в том числе для членов группы берилла). Причины этого могут быть в деформации кристалла, зональности состава, полисинтетическом двойниковании, наличии включений и др. Поскольку ни одна из причин такого рода в индиалитах не выявлена, можно предположить, что двуосность данного образца связана с упорядоченным распределением катионов, что и подтверждается рентгеноструктурным анализом. Однако и эта причина моими соавторами не рассматривалась. Минерал был представлен КНМНК в традиционной пространственной группе P6/mcc с упрощенной формулой $(Fe^{2+}, Mg)_2Al_4Si_5O_{18}$ и утвержден в качестве нового минерального вида с названием ферроиндиалит [8].

А как обстоит дело с симметрией в других минералах группы?

Группа берилла

Ферроиндиалит, как и индиалит, принадлежит к группе берилла, которая объединяет кольцевые структурно близкие гексагональные силикаты и алюмосиликаты с параметрами элементарных ячеек в пределах $a = 9.15-9.83 \text{ \AA}$, $c = 9.10-9.37 \text{ \AA}$, $V \approx 790 \text{ \AA}^3$ [9]. Состав этих минералов описывается общей формулой $A_xM_2T1_3(T2_6O_{18})$, где *M* — октаэдрически координированные катионы Al^{3+} , Sc^{3+} , Fe^{2+} , Mg^{2+} ; *T1* — катионы Al^{3+} , Be^{2+} , Li^+ , имеющие тетраэдрическую координацию; *T2* — тетраэдрически координированные атомы (Si, Al); $x < 1$. Тетраэдры *T1* объединяют шестерные кольца [$T2_6O_{18}$], которые располагаются перпендикулярно направлению [001], в трехмерный каркас (рис.3). В его каналах, идущих вдоль *c*-параметра, могут находиться крупные А-катионы щелочных и щелочноземельных элементов (Na, K, Cs, Rb, Ca) и молекулы воды. Катионы восполняют недостаток положительного заряда при частичной замене Si^{4+} и M^{3+} на катионы с меньшим зарядом.

Родоначальник группы — **берилл** $Al_2Be_3(Si_6O_{18})$ (он же белир, вериллос, вериллий, псевдоизумруд) — широко распространен во многих гранитах и гранитных пегматитах в ассоциации с кварцем,

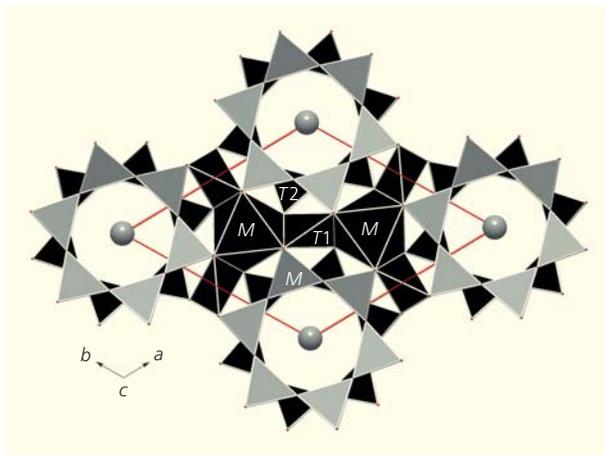


Рис.3. Структура минералов группы берилла.

полевыми шпатами, мусковитом, сподуменом, турмалином и рядом других минералов. Его месторождения известны во многих странах мира: Афганистане, Бразилии, США, Пакистане, а также на африканском континенте. В России берилл образует скопления на Урале (Мурзинка, Алабашка) и в Сибири. Его название происходит от греческого «βήρυλλος», что относится к любым видам зеленых минералов, в то время как первоначальное значение названия неизвестно. Сам берилл — зеленый, а его разновидности окрашены примесями во все цвета радуги и находят применение как драгоценные камни (например, зеленый изумруд, голубой аквамарин, желтый гелиодор, розовый воробьевит и др.). Параметры гексагональной ячейки изменяются в пределах: $a = 9.205\text{--}9.274 \text{ \AA}$, $c = 9.187\text{--}9.259 \text{ \AA}$, пространственная группа $P6/mcc$ [9]. Структура берилла состоит из шестичленных кремнекислородных колец, объединенных Al-октаэдрами и Be-тетраэдрами. Каналы чаще всего пусты или заняты небольшим количеством катионов. В группу берилла входят еще два минерала, в которых шестерные кольца объединяются Be-тетраэдрами.

Бацит $\text{Sc}_2\text{Be}_3(\text{Si}_6\text{O}_{18})$ (баззит) назван в честь итальянского инженера А.Э.Бацци, который впер-

вые нашел этот богатый скандием минерал в горах Италии. Впоследствии его встречали в гранитах Швейцарии и в гранитных пегматитах Австрии, Норвегии и США в ассоциации с кварцем, ортоклазом, мусковитом, альбитом, гематитом, кальцитом, флюоритом и бериллом. В СССР он впервые был обнаружен в Центральном Казахстане [10]. Параметры ячейки бацита: $a = 9.521(5) \text{ \AA}$, $c = 9.165(5) \text{ \AA}$, пространственная группа $P6/mcc$. Шестерные кольца Si-тетраэдров объединяются октаэдрами Sc и тетраэдрами Be.

Железодоминантный аналог берилла **стоппаниит** $\text{Na}(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})\text{Fe}_3^{3+}\text{Be}_6(\text{Si}_6\text{O}_{18})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ — очень редкий минерал с мелкими кристаллами (призмы до 0.5 мм в длину) светло-синего цвета. Он магматического происхождения и найден в полостях нефелиновых сиенитов вулканического комплекса Вико близ Рима. Минерал назван в честь Франческо С.Стоппани — итальянского юриста, коллекционирующего минералы. Параметры ячейки стоппаниита: $a = 9.397 \text{ \AA}$, $c = 9.202 \text{ \AA}$, пространственная группа $P6/mcc$ [11]. Шестерные кольца объединяются октаэдрами Fe^{3+} и тетраэдрами Be.

Все эти минералы гексагональной симметрии (пространственная группа $P6/mcc$) и с близкими параметрами ячейки различаются заполнением M-октаэдра и T1-тетраэдра. Небольшие примеси в этих позициях не влияют на симметрию и параметры ячейки, а в каналах находятся молекулы воды с примесью атомов Na (рис.4).

Пеццоттаит $\text{CsAl}_2\text{LiBe}_2(\text{Si}_6\text{O}_{18})$ (пезцоттаит, педцоттаит) — редкий цезиевый аналог берилла. Назван он в честь Фредерико Пеццотты — итальянского геолога и минералога из Гражданского музея Милана. Пластинчатые малиново-красные кристаллы пеццоттаита до 7 см в поперечнике впервые найдены в пегматитах Сакавалана на Южном Мадагаскаре, а впоследствии были обнаружены также в Афганистане и Бирме. Они используются в ювелирном деле как драгоценные камни. Особенность пеццоттаита в том, что при нагревании до 450°C в течение двух часов его кристаллы обесцвечиваются.

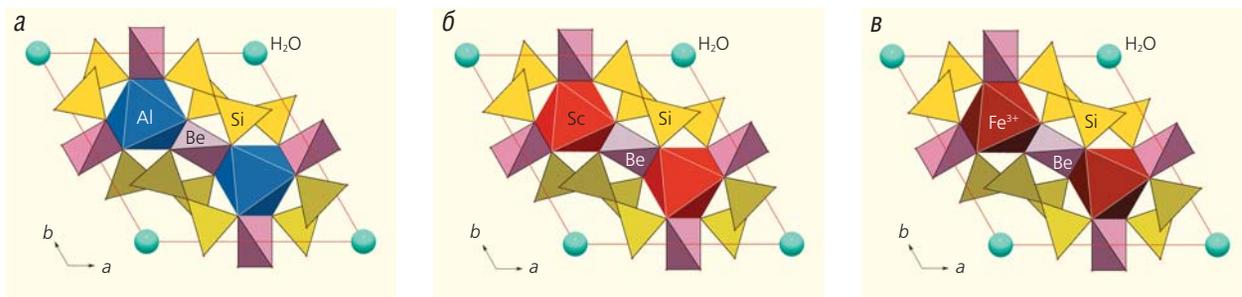


Рис.4. Структура берилла (а), бацита (б) и стоппаниита (в).

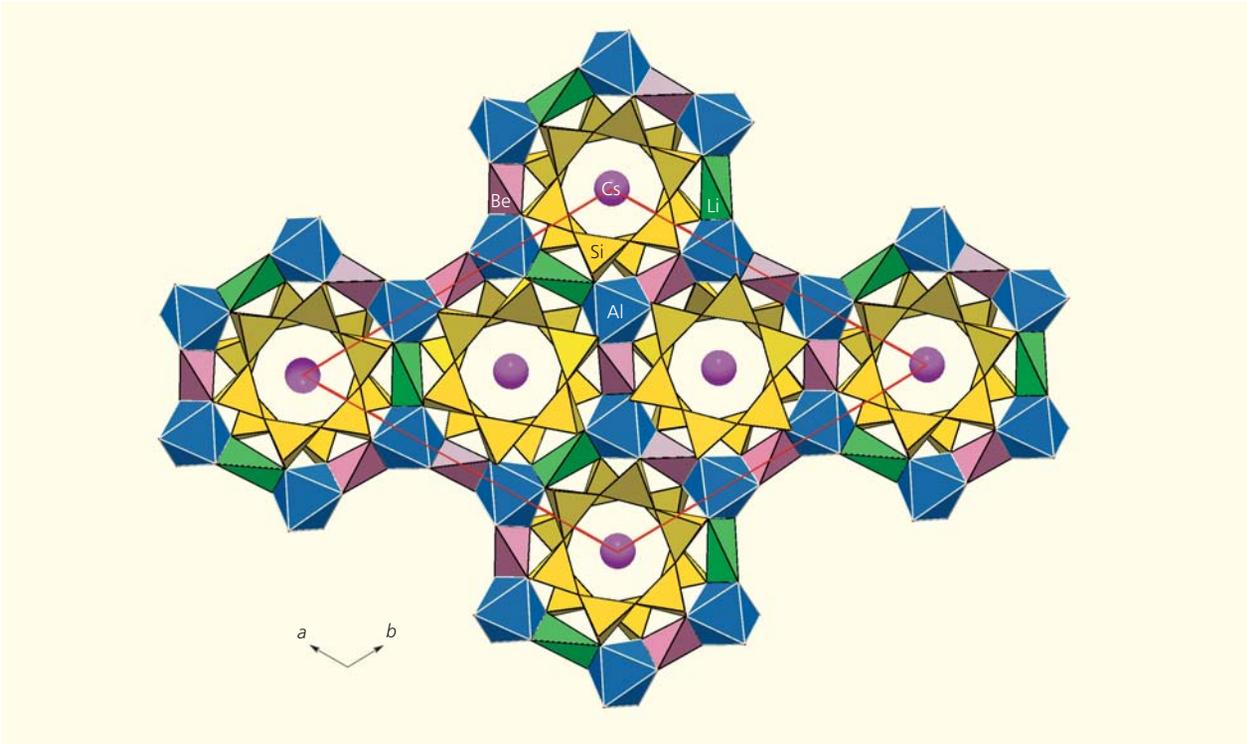


Рис.5. Структура пеццоттаита.

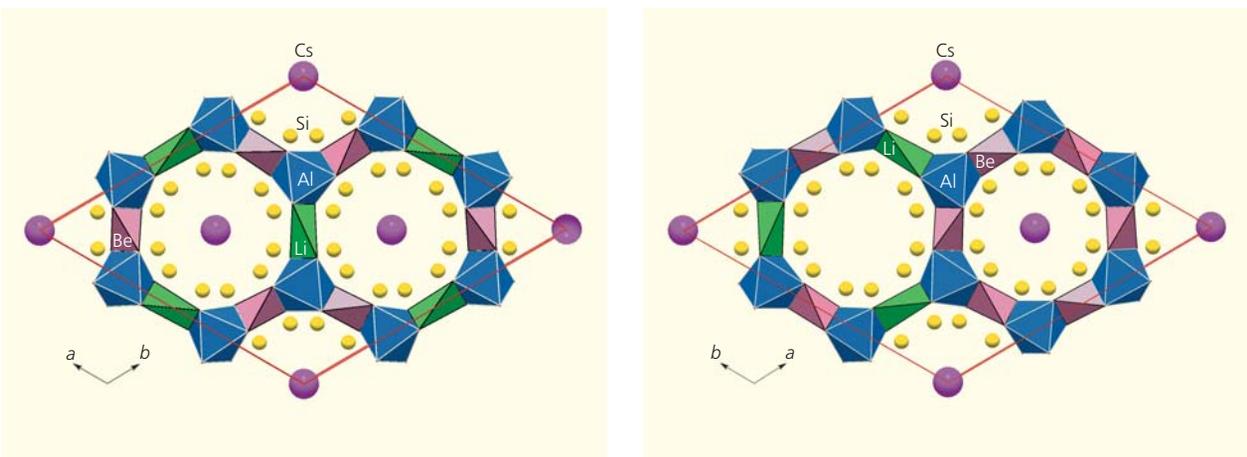
чиваются, но могут восстановить окраску при гамма-облучении.

Пеццоттаит кристаллизуется не в гексагональной, а в тригональной системе с параметрами ячейки: $a = 15.9515 \text{ \AA}$, $c = 27.8568 \text{ \AA}$, пространственная группа $R\bar{3}c$ [12]. Переход в тригональную систему с увеличенными параметрами ячейки обусловлен чередованием Be и Li в позициях T1-тетраэдров (рис.5).

Поскольку в составе пеццоттаита Li в два раза меньше, чем Be, его хватает только на половину

T1-тетраэдров. В другом же независимом T1-тетраэдре позиция лития занята целиком бериллием (рис.6). Чередование вдоль c -параметра слоев, содержащих различные по размерам тетраэдры (средние расстояния Be—O = 1.66, Li—O = 1.8 Å), приводит к утроению этого параметра.

В группу берилла кроме гексагональных (с пространственной группой $P6/mcc$) входят также минералы ромбической симметрии (с пространственной группой $Ccmt$). Гексагональная ячейка связана с ромбической матрицей перехода: $[210/010/001]$.

Рис.6. Чередование Li- и Be-атомов в T1-тетраэдрах пеццоттаита на разных уровнях вдоль c -параметра.

Ромбические минералы кордиерит [13] и секанинаит [14] — алюмосиликаты с общей формулой $(\text{Mg,Fe})_2\text{Al}_4(\text{Si}_5\text{O}_{18}) \cdot n\text{H}_2\text{O}$. Они — диморфные аналоги индиалита и ферроиндиалита. Метастабильный индиалит при давлении 5 кбар устойчив до 550°C , а при длительном нагревании при 830°C и давлении 1 кбар он превращается в более устойчивый кордиерит, который присутствует даже в метеоритах [15].

Кордиерит $(\text{Fe,Mg})_2\text{Al}_4(\text{Si}_5\text{O}_{18})$ — широко распространенный минерал группы берилла. Назван он в честь французского горного инженера и геолога, нашедшего его, — Пьера Люиса Кордье. Призматические, голубые, зеленоватые и серые кристаллы кордиерита длиной до 18 см обнаружены в термически метаморфизованных глинистых породах, гнейсах и гранитах во многих регионах мира: Австралии, Германии, Зимбабве, Индии, Канаде, Намибии, Норвегии, США, Финляндии, Шри-Ланке и др. Он встречается в ассоциации с силиманитом, полевым шпатом, мусковитом, биотитом, корундом, андалузитом и шпинелью. В России кордиерит обнаружен на Среднем Урале, в районе Мурзинки. Минерал из разных месторождений используется в керамическом производстве. Он давно и многократно изучался рентгеноструктурным анализом. Одна из последних работ выполнена на образце из Мурзинки [16].

В отличие от бериллиевых минералов группы в кордиерите вместо Be^{2+} в позицию T1 входят атомы Al^{3+} и Si^{4+} , и потому в шестерном кольце в позиции T2 один Si^{4+} замещается на Al^{3+} . Тетраэдры Si и Al имеют разные размеры (средние расстояния $\text{Si}-\text{O} = 1.61$, $\text{Al}-\text{O} = 1.75 \text{ \AA}$), что приводит к искажению кольца (рис.7), понижению симметрии и псевдогексагональности ячейки. Небольшие примеси Fe в T1-тетраэдрах и Li в M-октаэдре не влияют на симметрию, а переход в ромбическую симметрию обусловлен упорядочением Al и Si как в T1, так и в T2-позициях.

Шестичленные Si,Al-кольца располагаются в шахматном порядке и объединяются Mg-октаэдрами и Al- и Si-тетраэдрами в трехмерный каркас, в каналах которого находятся молекулы воды (рис.8). Параметры ромбической ячейки изменяются в пределах: $a = 17.0046\text{--}17.140 \text{ \AA}$,

$b = 9.725\text{--}9.797 \text{ \AA}$, $c = 9.293\text{--}9.356 \text{ \AA}$, $V = 1553.66 \text{ \AA}^3$, пространственная группа $C_{3h}cm$.

Секанинаит $(\text{Fe}^{2+},\text{Mg})_2\text{Al}_4(\text{Si}_5\text{O}_{18}) \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (он же феррокордиерит) назван в честь профессора Йозефа Секанина — чешского минералога, открывшего этот редкий минерал. Секанинаит образует голубые кристаллы до 70 см в длину в пегматитах и гнейсах, метаморфизованных в процессе горения. Его находят в паралавах некоторых регионов Чехии (Дальние Бору), в Ирландии, Италии, Швеции и в Японии. Параметры ромбической ячейки: $a = 17.186\text{--}17.234 \text{ \AA}$, $b = 9.827\text{--}9.846 \text{ \AA}$, $c =$

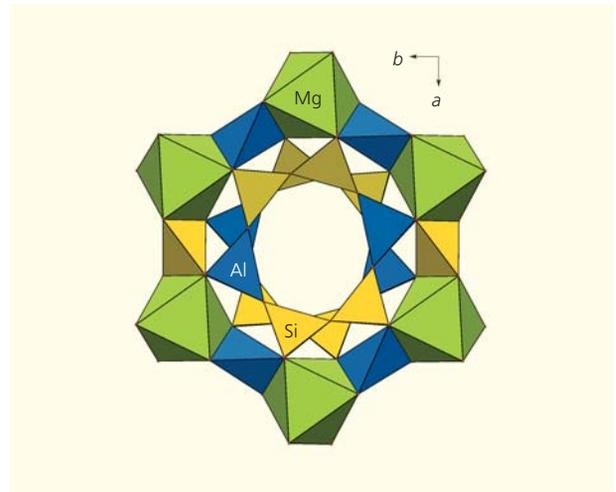


Рис.7. Кольца $[\text{Si}_4\text{Al}_2\text{O}_{18}]$ в структуре кордиерита.

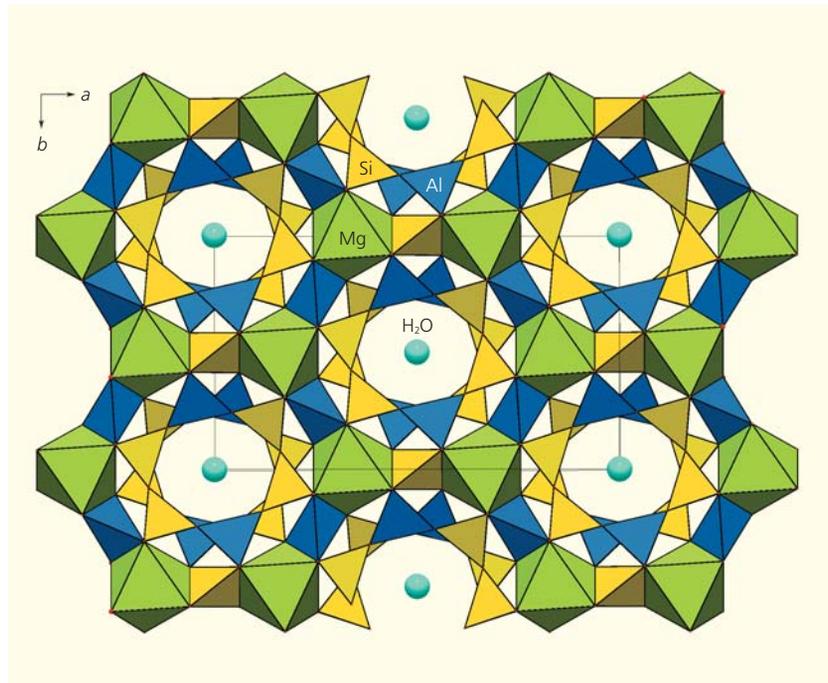


Рис.8. Структура кордиерита.

= 9.298–9.346 Å, $V = 1585.89 \text{ \AA}^3$. Секанинаит отличается от кордиерита составом октаэдра. Шестерные кольца объединяются октаэдрами Fe и T1-тетраэдрами, состоящими из чередующихся атомов кремния и алюминия [17] (рис.9).

* * *

Изученный нами Fe-аналог индиалита — минерал с высокоупорядоченной структурой, пониженной симметрией и уникальной, впервые установленной в природных соединениях, пространственной группой $P622$ [18]. Поскольку ферроиндиалит был утвержден как минеральный вид с симметрией $P6/mcs$, я не смогла с этим согласиться и выбыла из числа авторов нового минерала [8].

Упорядочение катионов в структуре кольцевых минералов группы берилла может приводить к изменению симметрии и параметров ячейки при сохранении топологии каркаса (тригональный пеццоттаит, ромбические кордиерит и секанинаит). Что касается понижения симметрии в рамках той же ячейки, то оно многими исследователями долго не признавалось законным. Однако сейчас установлено немало случаев понижения симметрии в минералах, которое связано с упорядочением катионов по структурным позициям без изменения ячейки. Об одном из них я рассказывала и в «Природе»*, когда в дифракционном наборе экспериментальных данных низкокальциевого и высокоциркониевого эвдиалита из ультраагпаитового пегматита горы Аллуайв (Ловозерский массив, Кольский п-ов) обнаружилось несколько сот слабых отражений, которые отвечали за нарушение R -трансляции. Проведенное нами исследова-

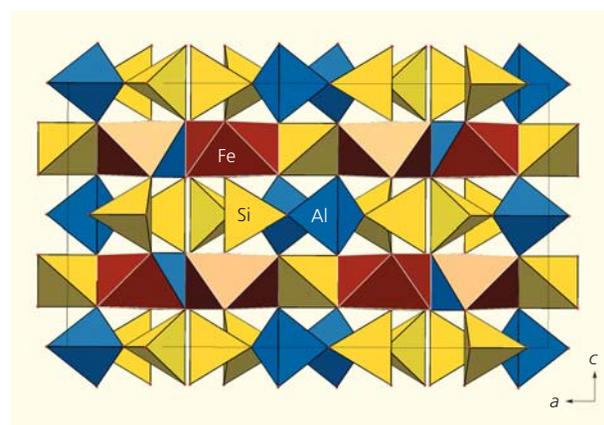


Рис.9. Структура секанинаита вдоль c -оси.

ние показало, что в специфических условиях медленной кристаллизации при низких температурах, на последних стадиях остывания остаточного расплава атомы, входящие в состав эвдиалита, упорядочиваются по позициям структуры с понижением симметрии от ромбоэдрической $R3$ до примитивной $P3$ [19]. Возможно, и в случае ферроиндиалита упорядочение катионов определяется аналогичными условиями кристаллизации минерала, а пространственная группа $P6/mcs$ дает лишь усредненную картину их распределения по позициям.

В заключение хочется подчеркнуть, что рентгеноструктурный анализ был и остается надежным инструментом для решения многих вопросов в химии и в минералогии, обусловленных строением кристаллических соединений. И не стоит пренебрегать деталями структуры и распределения состава в ее позициях, которые могут быть полезны для решения задач кристаллохимического, генетического, петрографического и технологического плана. ■

* *Расцветоваева Р.К.* От $R3$ -эвдиалитов к $P3$ -эвдиалитам. Природа. 2021; 6: 45–53.

Литература / References

1. Андрианов В.И. AREN-85 — система кристаллографических программ «Рентген» на ЭВМ NORD, SM-4 и EC. Кристаллография. 1987; 32(1): 228–232. [Andrianov V.I. AREN-85 — system of crystallographical programs Rentgen for EVM NORD, SM-4 and EC. Crystallography Reports. 1987; 32(1): 228–232. (In Russ.).]
2. Meagher E. P., Gibbs G. V. The polymorphism of cordierite: II. The crystal structure of indialite. *Canad. Miner.* 1977; 15: 43–49.
3. Урусов В.С., Надежина Т.Н. Журнал структурной химии. Частотное распределение и «селекция» пространственных групп в неорганической кристаллохимии. 2009; 50(7): S26–S43. [Urusov V.S. Nadezhina T.N. Statistical analysis of modern structural databases on inorganic crystals and minerals is carried out to elucidate the classification of crystal structure. *Journal of Structural Chemistry.* 2009; 50: 22–37.]
4. Kitamura M., Hiroi Y. Indialite from Unazuki Pelitic Schist, Japan, and its transition texture to cordierite. *Contrib. Miner. Petrol.* 1982; 80: 110–116.
5. Miyashiro A., Liyama T. A preliminary note on a new mineral, indialite, polymorphic with cordierite. *Proc. Imp. Japan Acad.* 1954; 30: 746–751.
6. Daniels P. What is the true space group of high-cordierite? *Zeit. Krist.* 1990; 190: 271–276.
7. Balassone G., Franco E., Mattia C.A., Puliti R. Indialite in xenolithic rocks from Somma-Vesuvius volcano (Southern Italy): Crystal chemistry and petrogenetic features. *Amer. Miner.* 2004; 89: 1–6.

8. Чуканов Н.В., Аксенов С.М., Пеков И.В. и др. Ферроиндиалит $(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg})_2\text{Al}_3\text{Si}_5\text{O}_{18}$ — новый минерал группы берилла из вулканического района Айфель, Германия. ЗРМО. 2014; CXLIII(1): 46–56 [Chukanov N.V., Aksenov S.M., Pekov I.V. et al. Ferroindialite $(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg})_2\text{Al}_3\text{Si}_5\text{O}_{18}$, a new beryl-group mineral from the Eifel volcanic region, German. Notes of the Russian Mineralogical Society. 2014; CXLIII(1): 46–56. (In Russ.).]
9. Минералы. III(2). Справочник. Ф.В.Чухров, Н.Н.Смолянинов (ред.). М., 1981. [Minerals. III(2). Directory. F.V.Chukhrov, N.N.Smolyaninov (eds.). Moscow, 1981. (In Russ.).]
10. Чистякова М.Б., Молева В.А., Разманова З.П. Базцит, впервые найденный в СССР. ДАН СССР. 1966; 169: 1421–1424. [Chistyakova M.B., Moleva V.A., Razmanova Z.P. Bazzite found for the first time in the USSR. Dokl. Acad. Sci. USSR. 1966; 169: 157–161].
11. Ferraris G., Prencipe M., Rossi P. Stoppaniite, a new member of the beryl group: crystal structure and crystal-chemical implications. Europ. J. Miner. 1998; 10: 491–496.
12. Gatta D.G., Adamo I., Meven M., Lambruschi E. A single-crystal neutron and X-ray diffraction of pezzottaite. Physics and Chemistry of Minerals. 2012; 39: 829–840.
13. Malcherek T., Domeneghetti M.C., Tazzoli V. et al. Structural properties of ferromagnesian cordierites. Amer. Miner. 2001; 86: 66–79.
14. Stanek J., Miskovsky J. Sekaninaite, a new mineral of the cordierite series, from Dolni Bory, Czechoslovakia. Scripta Facultatis Scientiarum Naturalium Universitatis Purkynianae Brunensis, Geologia. 1975; 1(5): 21–30.
15. Fuchs L.H. Occurrence of cordierite and aluminous orthoenstatite in the Allende meteorite. Amer. Miner. 1969; 54: 1645–1653.
16. Sokol E.V., Seryotkin Y.V., Bul'bak T.A. Na-Li-Be-rich cordierite from the Murzinka pegmatite field, Middle Urals, Russia. Europ. J. Miner. 2010; 22: 565–575.
17. Radica F., Capitelli F., Bellatreccia F. et al. Spectroscopy and X-ray structure refinement of sekaninaite from Dolni Bory, Czech Republic. Miner. Mag. 2013; 77: 485–498.
18. Расцветова Р.К. Упорядоченная структура Fe-аналога индиалита — первого минерала с пространственной группой $P622$. Докл. РАН. 2014; 455(5): 544–546. [Rastsvetaeva R.K. Ordered structure of indialite Fe-analog — first mineral with space group $P622$. Dokl. Acad. Sci. 2014; 455(5): 544–546. (In Russ.).]
19. Расцветова Р.К., Чуканов Н.В. Кристаллическая структура первого представителя группы эвдиалита с примитивной ячейкой. Кристаллография. 2021; 66(6): 884–893. [Rastsvetaeva R.K., Chukanov N.V. Crystal structure of the first representative of eudialyte group with the primitive cell. Crystallography Reports. 2021; 66(6): 940–948.]

Ferroindialite and Its Unique Symmetry: the Structure of Beryl Group Minerals

R.K.Rastsvetaeva

Shubnikov Institute of Crystallography, Federal Scientific Research Centre “Crystallography and Photonics”, RAS (Moscow, Russia)

Single crystal X-ray diffraction analysis has been used to study a cordierite group mineral found at the Bellerberg deposit (Eifel, Germany). This mineral is distinguished by the increased content of Fe in comparison with Mg in its chemical composition. The hexagonal cell parameters are $a = 9.8759(3) \text{ \AA}$, $b = 9.3102(3) \text{ \AA}$, $V = 786.40(3) \text{ \AA}^3$. The crystal structure has been solved in the space group $P622$ and refined to final R -value of 5.9% for 860 independent reflections with $|F| > 3\sigma(F)$. The main structural features of the mineral are reflected in its crystal chemical formula ($Z = 1$): $\text{K}_{0.12}[\text{Fe}_2][(\text{Mg}_{0.85}\text{Fe}_{0.15})_2\text{Al}_3[\text{Al}_{1.5}\text{Si}_{1.5}][\text{Si}_{8.4}\text{Al}_{3.6}]\text{O}_{36}]$, where brackets denote the composition of the octahedral and tetrahedral structural sites. Studied mineral is an iron analogue of indialite with a highly ordered structure, reduced symmetry, and space group $P622$ that has been for the first time established in natural compounds.

Keywords: ferroindialite, beryl group, crystal structure, symmetry.