

МИНЕРАЛОГИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

НОВАЯ ВЫСОКОЖЕЛЕЗИСТАЯ РАЗНОВИДНОСТЬ ССАЙБЕЛИИТА И ЕЕ КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ

© 2020 г. Н. В. Зубкова^{1,*}, д. чл. И. В. Пеков¹, д. чл. Н. В. Чуканов²,
д. чл. И. И. Чайковский³, В. О. Япаскурт¹, д. чл. Д. Ю. Пушаровский¹

¹Московский государственный университет, Геологический факультет,
Воробьевы горы, Москва, 119991 Россия

²Институт проблем химической физики РАН,
пр-т Академика Семенова, д. 1, Черноголовка, Московская обл., 142432 Россия

³Горный институт Уральского отделения РАН, Сибирская ул., 78а, Пермь, 614007 Россия

*e-mail: n.v.zubkova@gmail.com

Поступила в редакцию 05.02.2020 г.

После доработки 05.02.2020 г.

Принята к публикации 12.02.2020 г.

Новая разновидность ссайбелиита с необычно высоким содержанием железа установлена в гидротермалитах, развитых на контакте кимберлита с галитовой породой в кимберлитовой трубке Интернациональной, Республика Саха (Якутия), Россия. Этот минерал образует светло-зеленые корочки до $1.5 \times 1.5 \times 0.05$ см в трещинах агрегатов екатеринита. Его химический состав (электронно-зондовые данные, содержание H_2O рассчитано по стехиометрии): MgO 25.52, FeO 28.45, B_2O_3 36.84, H_2O 9.42, сумма 100.23 мас. %; эмпирическая формула: $(Mg_{1.21}Fe_{0.76}^{2+})_{\Sigma 1.97}B_{2.02}O_4(OH)_2$. Приведен и обсуждается ИК-спектр. Кристаллическая структура высокожелезистой разновидности ссайбелиита решена на монокристалле, $R = 5.73\%$. Минерал моноклинный, $P2_1/c$, $a = 3.1714(2)$, $b = 10.4561(7)$, $c = 12.6498(9)$ Å, $\beta = 95.548(7)^\circ$, $V = 417.51(5)$ Å³. Катионы Mg и Fe^{2+} частично упорядочены между двумя октаэдрическими позициями, структурная формула: $(Fe_{0.51}^{2+}Mg_{0.49})(Mg_{0.73}Fe_{0.27}^{2+})(OH)[B_2O_4(OH)]$ ($Z = 4$).

Ключевые слова: ссайбелиит, природный борат, кристаллическая структура, ИК-спектр, кимберлитовая трубка Интернациональная

DOI: 10.31857/S0869605520020112

ВВЕДЕНИЕ

Ссайбелиит — один из наиболее распространенных в природе боратов. Он имеет продолжительную и достаточно сложную историю изучения. Впервые этот минерал был описан в 1861 г. из рудников Рецбанья в Венгрии (ныне — Бэица Бихор, Бихор, Румыния). Однако идентификация ссайбелиита, несмотря на простой химический состав, была сопряжена, особенно в ранний, “дорентгеновский” период изучения, со значительными трудностями в силу тонкоагрегатного строения наиболее типичных для него морфологических разновидностей. Это привело, в частности, к тому, что минерал “открывали” еще не раз, давая новые названия: ашарит, камселлит, β -ашарит. То, что все эти названия относятся к одному минеральному виду, который по правилам приоритета должен называться ссайбелиитом, было показано в 1942 году

В.Т. Шаллером (Schaller, 1942). Тонковолокнистый, а нередко мелоподобный характер агрегатов этого бората способствует поглощению ими воды, что послужило причиной появления еще одного названия – гидроашарит; адсорбционная природа этой дополнительной воды в минерале доказана в работе (Григорьев и др., 1966). Идеализированная химическая формула ссайбелиита – $MgBO_2(OH)$, а упрощенная структурная формула – $Mg_2(OH)[B_2O_4(OH)]$ (Peng et al., 1963; Takeuchi, Kudoh, 1975; Grice, 2008) (подробнее см. ниже). У этого минерала есть намного более редкий в природе изоструктурный марганцовистый аналог – суссексит $MnBO_2(OH) = Mn_2^{2+}(OH)[B_2O_4(OH)]$, с которым ссайбелиит образует протяженный изоморфный ряд (Palache et al., 1951; Малинко и др., 1991; Hoffmann, Armbruster, 1995).

В генетическом отношении ссайбелиит интересен тем, что это один из очень немногих природных боратов, которые образуются в достаточно широком диапазоне обстановок. Он распространен и в эндогенных, и в экзогенных боратных месторождениях. Так, в магнезиальных и апомагнезиальных известковых скарнах это типичный продукт гидротермального изменения котоита, суанита, курчатовита и других боратов, содержащих Mg; кристаллизуется он здесь и самостоятельно. Ссайбелиит – обычный компонент борной минерализации в галогенных месторождениях морского осадочного типа и в элювиальных месторождениях бора в глинисто-гипсовых “шляпах” соляных куполов прорванного типа. В магнезиально-скарновых и элювиальных месторождениях это значимый промышленный минерал бора (Александров, 1990; Малинко и др., 1991); в частности, ссайбелиитовые (“ашаритовые”) руды на протяжении многих лет добывались на Индерском боратном месторождении в Западном Казахстане.

Большинство опубликованных анализов ссайбелиита разного происхождения демонстрирует близость химического состава этого минерала к идеальному. Суммарное содержание примесных катионов (Mn, Fe, Al, Ca) в нем редко поднимается выше 1–1.5 мас. %; исключение составляют лишь редкие обогащенные марганцем образцы, промежуточные по составу между ссайбелиитом и суссекситом (Palache et al., 1951; Малинко и др., 1991). Что касается примеси железа, то ее количество в ссайбелиите обычно весьма мало. Самый богатый железом образец этого минерала, достоверные данные о составе которого удалось обнаружить в литературе, содержит 3.2 мас. % FeO; он происходит из метаморфизованных эвапоритов боратного месторождения Хоусяню в провинции Ляонин, Китай (Jiang et al., 1997). Старые анализы с 3.4 и 4.21 мас. % Fe_2O_3 в ссайбелиите, соответственно, из Рецбаньи и из Пайоч (Невада, США), были выполнены, как указывают авторы более поздних работ (Palache et al., 1951; Marincea, 2001), на загрязненном материале.

В свете этого представляется интересным обнаружение новой, необычно обогащенной железом (28.5 мас. % FeO) разновидности ссайбелиита, которой и посвящена настоящая статья. Для нее изучена кристаллическая структура, включая локализацию атомов водорода, и установлено, что Fe и Mg распределены между структурными позициями неравномерно.

УСЛОВИЯ НАХОЖДЕНИЯ И МОРФОЛОГИЯ ВЫСОКОЖЕЛЕЗИСТОЙ РАЗНОВИДНОСТИ ССАЙБЕЛИИТА

Высокожелезистая разновидность ссайбелиита установлена нами в керне скважины, пробуренной на алмазном руднике Интернациональный, разрабатывающем кимберлитовую трубку Интернациональную в Мирнинском районе Республики Саха (Якутия), Россия. Образец для исследования был предоставлен геологом рудника А.Т. Курневым.

Трубка Интернациональная прорывает осадочный чехол, сложенный галогенно-карбонатными и терригенно-карбонатными породами раннекембрийского возраста.

В четырех свитах (нелбинская и юрегинская нерасчлененная, толбачанская и чарская) этих пород широко распространены пласты каменной соли мощностью от 1.5 до 30 м. Есть она и в самой трубке — в виде ксенолитов (от 0.5 м до нескольких метров), системы диагональных усадочных галитовых жил в эндоконтактной части и цемента автолитовых брекчий. В целом, контаминация кимберлитов эвапоритовым материалом характерна для ряда трубок Якутии (Коруплова et al., 2013).

Интересной особенностью трубки Интернациональной является присутствие небольших, но богатых проявлений боратной минерализации, приуроченных к контакту кимберлита со скоплениями галита. Ранее здесь из боратов был известен только екатеринит $\text{Ca}_2(\text{B}_4\text{O}_7)(\text{Cl}, \text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, образующий многочисленные гнезда и прожилки мощностью до 4.5 см, где с ним ассоциируют галит и серпентин (Никулин, Еремеев, 2011). Установленная нами высокожелезистая разновидность ссайбелиита приурочена к галит-екатеринитовой жиле. Она формирует в трещинах массивного сиренево-розового екатеринита прерывистые корочки площадью до 1.5×1.5 см и толщиной до 0.5 мм. В этой же ассоциации находятся родственный брайанрулстониту недоизученный Са-борат, галит, серпентин, доломит, пирротин и халькопирит. Железистый ссайбелиит образует плотные розетки радиального строения диаметром до 3 мм, отдельные или, чаще, сросшиеся между собой. Они сложены грубообразованными игольчатыми кристаллами длиной до 1.5 мм и толщиной до 0.02 мм. Минерал полупрозрачный, имеет светло-зеленый цвет, а концы кристаллов иногда бесцветные или беловатые. Не вызывает сомнения, что эта минерализация имеет гидротермальную природу, а источником бора являются вмещающие эвапориты: так, в галитовой породе толбачанской свиты нами обнаружен кургантаит $\text{SrCa}[\text{B}_3\text{O}_6]\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$.

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ

Химический состав высокожелезистой разновидности ссайбелиита из трубки Интернациональной определен методом электронно-зондового микроанализа в Лаборатории локальных методов исследования вещества кафедры петрологии МГУ на сканирующем электронном микроскопе JEOL JSM-6480LV, оснащенный волновым спектрометром INCA-Wave 500. Условия анализа: ускоряющее напряжение 20 кВ, ток зонда 20 нА, диаметр зонда 5 мкм. Эталоны: диопсид (Mg), Fe (Fe), BN (B). Содержания прочих элементов с атомными номерами >8 оказались ниже пределов обнаружения электронно-зондовым методом. Содержание H_2O прямым методом не определялось по причине дефицита чистого вещества, а было рассчитано по стехиометрии, с опорой на структурные данные.

Химический состав кристалла, для которого изучена структура (см. ниже), таков: MgO 25.52, FeO 28.45, B_2O_3 36.84, $\text{H}_2\text{O}_{\text{расч}}$ 9.42, сумма 100.23 мас. %. Эмпирическая формула, рассчитанная на $\text{O}_4(\text{OH})_2$, следующая: $(\text{Mg}_{1.21}\text{Fe}_{0.76}^{2+})_{\Sigma 1.97}\text{B}_{2.02}\text{O}_4(\text{OH})_2$.

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

Изучение кристаллической структуры высокожелезистой разновидности ссайбелиита выполнено на монокристалле. Трехмерный набор дифракционных данных получен при комнатной температуре с использованием монокристалльного дифрактометра Xcalibur S CCD на MoK_α -излучении ($\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$) для половины сферы обратного пространства. Обработка экспериментальных данных производилась с помощью пакета программ CrysAlis v. 1.171.39.46. Параметры моноклинной элементарной ячейки, уточненные с использованием 1006 отражений: $a = 3.1714(2)$, $b = 10.4561(7)$, $c = 12.6498(9) \text{ \AA}$, $\beta = 95.548(7)^\circ$, $V = 417.51(5) \text{ \AA}^3$. Кристаллическая структура определена на основе прямых методов в рамках пространственной группы $P2_1/c$ и уточнена в ани-

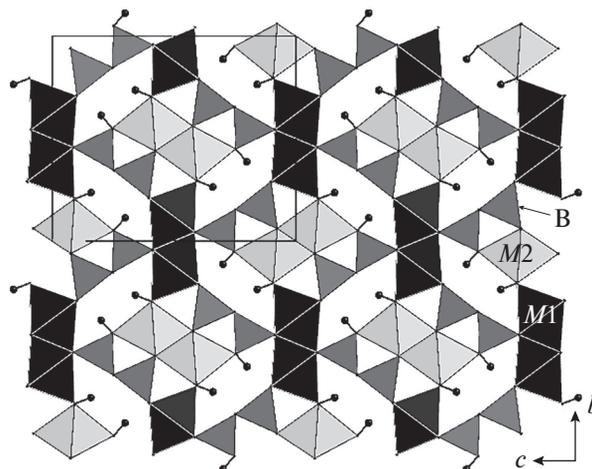


Рис. 1. Кристаллическая структура железистой разновидности ссайбелиита, проекция вдоль оси *a*. Атомы водорода показаны маленькими черными шариками.

Fig. 1. Crystal structure of the Fe²⁺-rich variety of szaibélyite projected along the *a* axis. Hydrogen atoms are shown as small black circles.

зотропном приближении параметров смещений атомов с использованием комплекса программ SHELX (Sheldrick, 2015). Атомы водорода OH-групп локализованы на разностном синтезе и уточнены с ограничением расстояния O–H 0.90(1) Å. Заключительный фактор расходимости составил 0.0573 для 751 независимого отражения с $I > 2\sigma(I)$. Координаты атомов, параметры их смещений и заселенность позиций приведены в таблице.

Как и у типичного, практически чисто магниального ссайбелиита (Peng et al., 1963; Takeuchi, Kudoh, 1975; Grice, 2008), в структуре изученной нами высокожелезистой разновидности этого минерала (рис. 1) выделяются две кристаллографически неэквивалентные октаэдрически координированные позиции *M*. В нашем образце они

Таблица 1. Координаты (*x*, *y*, *z*), параметры смещений ($U_{\text{экв}}$, Å²) атомов и заселенность позиций (s. o. f.) в структуре железистой разновидности ссайбелиита

Table 1. Coordinates (*x*, *y*, *z*), equivalent displacement parameters (U_{eq} , Å²) of atoms and site occupancy factors (s. o. f.) in the crystal structure of Fe²⁺-rich variety of szaibélyite

Позиция	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{экв}}$	s.o.f.
<i>M</i> (1)	0.2361(3)	0.13747(8)	0.50434(7)	0.0068(3)	Fe _{0.507(8)} Mg _{0.493(8)}
<i>M</i> (2)	0.7120(4)	0.42122(11)	0.41180(8)	0.0073(4)	Mg _{0.727(7)} Fe _{0.273(7)}
<i>B</i> (1)	0.7612(18)	0.1670(5)	0.1388(4)	0.0101(12)	1
<i>B</i> (2)	0.617(2)	0.0465(5)	0.3064(5)	0.0136(13)	1
<i>O</i> (1)	0.7798(11)	0.0611(3)	0.0765(2)	0.0109(9)	1
<i>O</i> (2)	0.7759(11)	0.2898(3)	0.1020(2)	0.0115(8)	1
<i>O</i> (3)	0.7198(11)	0.1536(3)	0.2482(2)	0.0134(8)	1
<i>O</i> (4)	0.6078(12)	0.4494(3)	0.2470(3)	0.0143(9)	1
<i>H</i> (4)	0.65(3)	0.387(4)	0.201(4)	0.07(3)*	1
<i>O</i> (5)	0.7199(11)	0.0429(3)	0.4139(3)	0.0125(8)	1
<i>O</i> (6)	0.2096(11)	0.2947(3)	0.4077(2)	0.0102(8)	1
<i>H</i> (6)	0.18(2)	0.264(5)	0.3411(19)	0.05(2)*	1

* $U_{\text{изо}}$.

совместно заселены катионами Mg и Fe. Октаэдры $M(1)O_5(OH)$, соединяясь друг с другом через общие ребра, образуют двойные цепочки, вытянутые вдоль оси a . Аналогичным образом построены цепочки из октаэдров $M(2)O_3(OH)_3$. Чередующиеся цепочки $M(1)$ - и $M(2)$ -октаэдров сочленяются между собой через общие вершины O(6), представленные OH-группами. Сформированные таким образом октаэдрические слои, компланарные (001), объединяются друг с другом через диборатные группы $B_2O_4(OH)$, каждая из которых образована двумя вершинно-связанными треугольниками $B(1)O_3$ и $B(2)O_2(OH)$. Согласно классификации, предложенной в работе (Grice et al., 1999), фундаментальный строительный блок (fundamental building block – FBB) в структуре ссайбелиита может быть представлен с помощью кода 2Δ:2Δ.

Октаэдрически координированные позиции $M(1)$ и $M(2)$ в структуре высокожелезистой разновидности ссайбелиита заселены по-разному: позиция $M(1)$ заполнена Fe^{2+} и Mg приблизительно в равных количествах: $Fe_{0.507(8)}Mg_{0.493(8)}$, в то время как позиция $M(2)$ отчетливо Mg-доминантная: $Mg_{0.727(7)}Fe_{0.273(7)}$. Октаэдр $M(1)O_6$ немного крупнее, чем $M(2)O_6$; расстояния $M(1)–O$ варьируют в пределах от 2.046(3) до 2.231(3) Å (среднее 2.144 Å), а объем октаэдра составляет 13.0 Å³. В октаэдре $M(2)O_6$ вариации величины $M(2)–O$ характеризуются пределами 2.064(4)–2.171(4) Å (среднее 2.106 Å), а объем октаэдра равен 12.2 Å³. Эти цифры хорошо согласуются со значениями ионных радиусов для октаэдрически координированных катионов Mg^{2+} (0.72 Å) и Fe^{2+} (0.78 Å) (Shannon, 1976) и однозначно говорят о том, что железо в исследуемом минерале двухвалентно. Отметим, что в структурно изученном Mg-содержащем суссексите с составом $(Mn_{1.81}^{2+}Mg_{0.19})B_2O_4(OH)_2$ (Hoffmann, Armbruster, 1995) в позиции $M(2)$ также находится больше Mg, чем в $M(1)$. Развернутая структурная формула высокожелезистой разновидности ссайбелиита из трубки Интернациональной такова: $M^{(1)}(Fe_{0.51}^{2+}Mg_{0.49})^{M(2)}(Mg_{0.73}Fe_{0.27}^{2+})(OH)[B_2O_4(OH)]$ ($Z = 4$). Она очень близка к формуле, рассчитанной из данных электронно-зондового анализа.

ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ

ИК-спектры порошков минералов группы ссайбелиита, запрессованных в таблетки с KBr (рис. 2), сняты на фурье-спектрометре ALPHA FTIR (Bruker Optics, Германия) в диапазоне волновых чисел 360–3800 см⁻¹, при разрешающей способности 4 см⁻¹ и числе сканирований, равном 16. В качестве образца сравнения использовалась аналогичная таблетка из чистого KBr.

Данные ИК-спектроскопии подтверждают найденное в результате рентгеноструктурного анализа распределение катионов по октаэдрическим позициям. В спектре практически чисто магnezияльного ссайбелиита (кривая 1 на рис. 2) присутствуют полосы при 3560 см⁻¹, относящаяся к валентным колебаниям основных OH-групп, координированных тремя катионами Mg^{2+} (локальная ситуация $HO \cdots^{M1}Mg^{M2}Mg^{M2}Mg$) и серия полос в диапазоне 1900–3000 см⁻¹, относящихся к колебаниям протона группы В–ОН в различных локальных состояниях. В структуре высокожелезистой разновидности ссайбелиита локальные ситуации $HO \cdots^{M1}Mg^{M2}Mg^{M2}Mg$, $[HO \cdots^{M1}Fe^{M2}Mg^{M2}Mg + HO \cdots^{M1}Mg^{M2}Mg^{M2}Fe]$ и $[HO \cdots^{M1}Fe^{M2}Mg^{M2}Fe + HO \cdots^{M1}Mg^{M2}Fe^{M2}Fe]$ реализуются с вероятностями около 26, 46 и 24% соответственно. Этим ситуациям отвечают полосы при 3554 и 3528 см⁻¹ и плечо при 3500 см⁻¹ соответственно (кривая 2 на рис. 2). Вероятность ситуации $HO \cdots^{M1}Fe^{M2}Fe^{M2}Fe$ составляет около 4%. Ей отвечает слабое поглощение, вносящее вклад в крыло полосы O–H-валентных колебаний около 3470 см⁻¹.

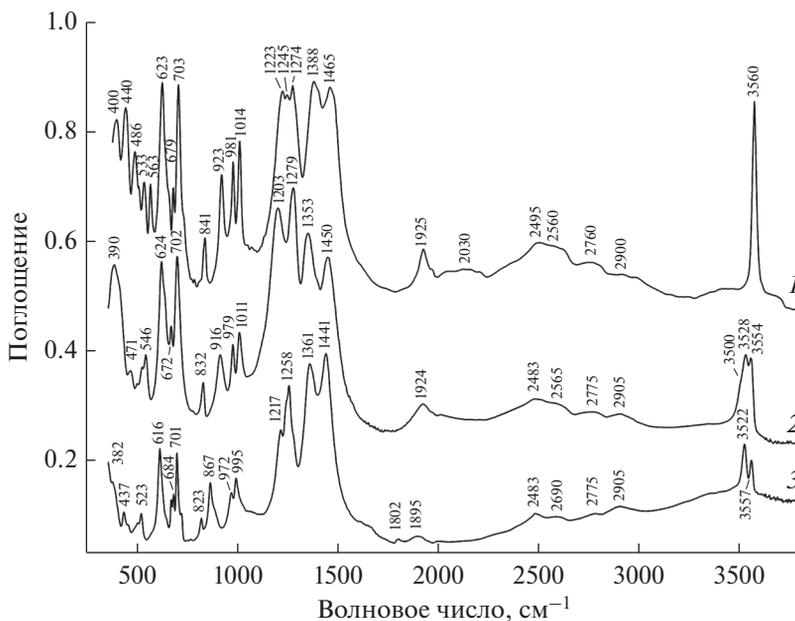


Рис. 2. ИК-спектры чисто магниального ссайбелиита из борного месторождения Кэбиринья, хр. Тас-Хаяхта, Полярная Якутия (1), изученной в настоящей работе высокожелезистой разновидности ссайбелиита из тр. Интернациональной (2) и Mg-содержащего суссексита с атомным отношением Mn : Mg \approx 3 : 1 из рудника Гонцен, Санкт-Галлен, Швейцария (3).

Fig. 2. IR absorption spectra of the Mg-pure saibélyite from the Kebirin'ya boron deposit, Tas-Khayakhtakh Ridge, Polar Yakutia (1), the studied Fe²⁺-rich variety of saibélyite from the Internatsional'naya kimberlite pipe (2) and the Mg-bearing sussexite with the ratio Mn : Mg \approx 3 : 1 from the Gonzen mine, St-Gallen, Switzerland (3).

Остальные полосы в ИК-спектре железистой разновидности ссайбелиита относятся к В–О-валентным (в диапазоне 1200–1500 см⁻¹), В–О–Н- и (Mg, Fe)–О–Н-деформационным (800–1100 см⁻¹), О–В–О-деформационным (500–800 см⁻¹) и (Mg, Fe)–О валентным (ниже 500 см⁻¹) колебаниям.

ИК-спектр Mg-содержащего суссексита (кривая 3 на рис. 2) близок к спектру высокожелезистой разновидности ссайбелиита. Главное различие между ними заключается в распределении интенсивностей полос в области В–О-валентных колебаний. Предположительно, высокая интенсивность полос при 1203 и 1279 см⁻¹ в спектрах чисто магниального ссайбелиита и его высокожелезистой разновидности обусловлена резонансом Ферми с обертоном полосы при 623–624 см⁻¹. Это предположение подтверждается более сильным, по сравнению с суссекситом, расщеплением полос в интервале 1200–1300 см⁻¹.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые обнаружена высокожелезистая разновидность ссайбелиита. В ней установлено 28.5 мас. % FeO, тогда как содержание этой примеси, ранее достоверно фиксировавшееся в этом минерале, не превышало 3.2 мас. %. Среди синтетических соединений такой борат также неизвестен. Рассчитанная по результатам электронно-зондового анализа эмпирическая формула изученного образца $(\text{Mg}_{1.21}\text{Fe}_{0.76}^{2+})_{\Sigma 1.97}\text{B}_{2.02}\text{O}_4(\text{OH})_2$ весьма близка к

формуле, выведенной независимо из результатов структурного уточнения – $(\text{Mg}_{1.22}\text{Fe}_{0.78}^{2+})_{\Sigma 2}\text{B}_2\text{O}_4(\text{OH})_2$, что подтверждает корректность полученных данных. Катионы Mg и Fe^{2+} в высокожелезистом ссайбелиите распределены по двум октаэдрическим позициям неравномерно, демонстрируя существенную степень упорядочения. Установленное в результате рентгеноструктурного анализа распределение магния и железа по двум октаэдрическим позициям подтверждается данными ИК-спектроскопии. Таким образом, эта разновидность минерала, имеющая структурную формулу $M^{(1)}(\text{Fe}_{0.51}^{2+}\text{Mg}_{0.49})^{M(2)}(\text{Mg}_{0.73}\text{Fe}_{0.27}^{2+})(\text{OH})[\text{B}_2\text{O}_4(\text{OH})]$, является в кристаллохимическом отношении пограничной, переходной к гипотетическому Mg-Fe-упорядоченному ссайбелиитоподобному борату с формулой конечного члена $\text{MgFe}^{2+}(\text{OH})[\text{B}_2\text{O}_4(\text{OH})]$.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-05-00332. ИК-спектроскопическое исследование осуществлено в соответствии с темой Государственного задания, номер государственного учета ААА-А19-119092390076-7.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Александров С.М.* Геохимия скарно- и рудообразования в доломитах. М.: Наука, **1990**. 344 с.
Григорьев А.П., Бровкин А.А., Некрасов И.Я. О новой разновидности ашарита // ДАН СССР. **1966**. Т. 166. № 4. С. 937–940.
Малинко С.В., Халтурина И.И., Озол А.А., Бочаров В.М. Минералы бора. Справочник. М.: Недра, **1991**. 232 с.
Никулин И.И., Еремеев Р.В. Новые находки скатеринита в кимберлитах Западной Якутии // Вестник Воронежского гос. ун-та, серия геология. **2011**. № 1. С. 95–102.

THE NEW Fe^{2+} -RICH VARIETY OF SZAIBÉLYITE AND ITS CRYSTAL-CHEMICAL PECULIARITIES

N. V. Zubkova^{a,*}, I. V. Pekov^a, N. V. Chukanov^b, I. I. Chaikovskiy^c,
 V. O. Yapaskurt^a, and D. Yu. Pushcharovskiy^a

^aFaculty of Geology, Moscow State University, Moscow, Russia

^bInstitute of Problems of Chemical Physics, RAS, Chernogolovka, Moscow region, Russia

^cMining Institute, Urals Branch RAS, Perm, Russia

*e-mail: n.v.zubkova@gmail.com

A new, unusually Fe^{2+} -enriched variety of szaibélyite has been found in the hydrothermal assemblage in the contact zone between kimberlite and a halite rock in the International'naya kimberlite pipe, Sakha (Yakutia) Republic, Russia. The mineral forms light-green crusts up to $1.5 \times 1.5 \times 0.05$ cm inside fractures in ekaterinite aggregates. Its chemical composition (electron microprobe, H_2O calculated by stoichiometry) is: MgO 25.52, FeO 28.45, B_2O_3 36.84, H_2O 9.42, total 100.23 wt. %; the empirical formula: $(\text{Mg}_{1.21}\text{Fe}_{0.76}^{2+})_{\Sigma 1.97}\text{B}_{2.02}\text{O}_4(\text{OH})_2$. The IR spectrum is given and discussed. The crystal structure of the Fe^{2+} -rich szaibélyite variety is solved based on single-crystal XRD data; $R = 5.73\%$. The mineral is monoclinic, $P2_1/c$, $a = 3.1714(2)$, $b = 10.4561(7)$, $c = 12.6498(9)$ Å, $\beta = 95.548(7)^\circ$, and $V = 417.51(5)$ Å³. Mg and Fe^{2+} cations are partially ordered between two octahedral sites, the structural formula is: $(\text{Fe}_{0.51}^{2+}\text{Mg}_{0.49})(\text{Mg}_{0.73}\text{Fe}_{0.27}^{2+})(\text{OH})[\text{B}_2\text{O}_4(\text{OH})]$ ($Z = 4$).

Keywords: szaibélyite, borate mineral, crystal structure, IR spectrum, International'naya kimberlite pipe

REFERENCES

- Aleksandrov S.M.* Geochemistry of Formation of Skarns and Ores in Dolomites. Moscow: Nauka, **1990**. 344 p. (in Russian)
- Grice J.D.* Szaibelyite: crystal structure analysis and hydrogen bonding. *Canad. Miner.* **2008**. Vol. 46. P. 671–677.
- Grigoriev A.P., Brovkin A.A., Nekrasov I.Ya.* On new variety of ascharite. *Doklady USSR Acad. Sci.* **1966**. Vol. 166. N 4. P. 937–940 (in Russian).
- Hoffmann C., Armbruster T.* Crystal structure of a (001) twinned sussexite $Mn_2B_2O_4(OH)_2$ from the Kalahari Manganese Field South Africa. *Schweizerische Mineralogische und Petrographische Mitteilungen.* **1995**. Vol. 75. P. 123–133.
- Jiang S.-Y., Palmer M.R., Peng Q.-M., Yang J.-H.* Chemical and stable isotopic compositions of Proterozoic metamorphosed evaporites and associated tourmalines from the Houxianyu borate deposit, eastern Liaoning, China. *Chem. Geol.* **1997**. Vol. 135. P. 189–211.
- Kopylova M.G., Kostrovitsky S.I., Egorov K.N.* Salts in southern Yakutian kimberlites and the problem of primary alkali kimberlite melts. *Earth-Sci. Rev.* **2013**. Vol. 119. P. 1–16.
- Malinko S.V., Khalturina I.I., Ozol A.A., Bocharov V.M.* Minerals of Boron. Handbook. Moscow: Nedra, **1991**. 232 p. (in Russian).
- Marincea S.* New data on szaibelyite from the type locality, Baita Bihor, Romania. *Canad. Miner.* **2001**. Vol. 39. P. 111–127.
- Nikulin I.I., Ereemeev R.V.* New finds of ekaterinite in kimberlites of Western Yakutia. *Voronezh State Univ. Geol. Bull.* **2011**. No 1. P. 95–102 (in Russian).
- Palache C., Berman H., Frondel C.* The System of Mineralogy of James Dwight Dana and Edward Salisbury Dana, Yale University 1837–1892, Volume II. John Wiley and Sons, Inc., New York, **1951**, 7th edition, revised and enlarged.
- Peng C.-T., Wu C.-J., Chang P.-H.* Crystal structure of szaibelyite. *Scientia Sinica.* **1963**. Vol. 12. P. 1761–1764.
- Schaller W.T.* The identity of ascharite, camsellite and β -ascharite with szaibelyite; and some relationships of the magnesium borate minerals. *Amer. Miner.* **1942**. Vol. 27. P. 467–486.
- Shannon R.D.* Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides. *Acta Cryst.* **1976**. Vol. A32. P. 751–767.
- Sheldrick G.M.* Crystal structure refinement with SHELXL. *Acta Cryst.* **2015**. Vol. C71. P. 3–8.
- Takeuchi Y., Kudoh Y.* Szaibelyite, $Mg_2(OH)[B_2O_4(OH)]$. Crystal structure, pseudosymmetry, and polymorphism. *Amer. Miner.* **1975**. Vol. 60. P. 273–279.