

## МИНЕРАЛОГИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

### НЕЙИТ ИЗ ЮГО-КОНЕВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ (ЮЖНЫЙ УРАЛ) И ЕГО КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

© 2024 г. И.В. Корняков<sup>1,2,\*</sup>, А.В. Касаткин<sup>3</sup>, д. чл. В.В. Гуржий<sup>1</sup>, Р. Шкода<sup>4</sup>,  
А.М. Кузнецов<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Институт наук о земле,  
Университетская наб., 7/9, г. Санкт-Петербург, 199034 Россия

<sup>2</sup>Центр наноматериаловедения, Кольский научный центр, Российская академия наук,  
ул. Ферсмана, д. 14, г. Апатиты, 184209 Россия

<sup>3</sup>Минералогический музей им. А.Е. Ферсмана РАН, Ленинский пр., 18/2, г. Москва,  
119071 Россия

<sup>4</sup>Масариков университет, кафедра геологических наук, Котларшиска, 2, г. Брно, 611 37, Чехия  
<sup>5</sup>ул. Октябрьская, 5-337, г. Челябинск, 454071 Россия

\*e-mail: ikornyakov@mail.ru

Поступила в редакцию: 15.03.2024 г.

После доработки: 10.04.2024 г.

Принята к публикации: 11.04.2024 г.

В отвалах Юго-Коневского вольфрамового месторождения (Челябинская обл., Южный Урал) впервые на территории России установлен нейит  $\text{Ag}_2\text{Cu}_6\text{Pb}_{25}\text{Bi}_{26}\text{S}_{68}$ . Эта редкая сульфосоля слагает призматические кристаллы до  $3 \times 0.5$  мм во флюорит-мусковит-кварцевых жилах и ассоциирует с айкинитом, тетрадимитом и пиритом. Спектры и коэффициенты отражения нейита опубликованы впервые. Химический состав нейита, определенный электронно-зондовым методом (мас. %, среднее значение по 7 анализам), таков: Ag 1.75, Cu 3.59, Pb 35.01, Cd 0.12, Bi 42.59, S 16.54, сумма 99.60. Он отвечает эмпирической формуле, рассчитанной на 68 атомов S:  $\text{Ag}_{2.14}\text{Cu}_{7.45}\text{Pb}_{22.27}\text{Cd}_{0.14}\text{Bi}_{26.86}\text{S}_{68}$ . На монокристалле юго-коневского нейита уточнена его кристаллическая структура,  $R_1 = 3.43\%$ ,  $wR_2 = 7.22\%$ . Минерал моноклинный, пространственная группа  $C2/m$ ,  $a = 37.3900(6)$ ,  $b = 4.05500(10)$ ,  $c = 43.5821(7)$  Å,  $\beta = 108.740(2)^\circ$ ,  $V = 6257.5(2)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ . Структура нейита основана на трех различных модулях архетипной структуры галенита: блоки  $(111)_{\text{PbS}}$  представляют собой октаэдрические «колонны» вытянутые вдоль направления  $b$ , которые чередуются вдоль направления  $a$  с блоками  $(100)_{\text{PbS}}$ . Получившиеся слои поочередно сменяются со слоями  $(922)_{\text{PbS}}$  вдоль  $c$ . Особенности структуры южно-уральского нейита, отличающимися его от опубликованных структур нейита и купронеита из мест их первых находок, являются разупорядочение в позиции Me16 и появление дополнительной позиции Cu5. Вкупе с анализом сумм валентностей межатомных связей эти особенности позволяют предположить присутствие цепей тетраэдров  $\text{CuS}_4$ , чередующихся с цепями октаэдров  $\text{BiS}_6$ .

**Ключевые слова:** нейит, оптические свойства, химический состав, кристаллическая структура, Юго-Коневское вольфрамовое месторождение, Южный Урал, первая находка в России

**DOI:** 10.31857/S0869605524040054, **EDN:** PDEASY

## ВВЕДЕНИЕ

Нейит, минерал, относящийся к классу сульфосолей, был открыт в Канаде, в молибденовом месторождении Лайм Крик (Lime Creek) у поселка Элис Арм (Alice Arm)

приблизительно в 500 милях к СЗ от г. Ванкувер. В этом месторождении нейит образует призматические, пластинчатые и игольчатые кристаллы до 3 мм длиной в кварцевых жилах и ассоциирует с разнообразными сульфидами (пирит, галенит, сфалерит, халькопирит, молибденит) и сульфосолями (айкинит, козалит, наффилдит, тетраэдрит). Минерал был описан с формулой  $Pb_7Bi_6(Cu, Ag)_2S_{17}$ , моноклинной элементарной ячейкой с параметрами  $a = 37.5 \pm 0.1$ ,  $b = 4.07 \pm 0.01$ ,  $c = 41.6 \pm 0.1$  Å,  $\beta = 96.8 \pm 0.3^\circ$  и пространственной группой  $C2/m$  (Drummond et al., 1969).

Тридцать с лишним лет спустя была решена кристаллическая структура нейита, подтверждены моноклинная сингония и пространственная группа  $C2/m$ , а параметры ячейки уточнены:  $a = 37.527(6)$ ,  $b = 4.0705(6)$ ,  $c = 43.701(7)$  Å,  $\beta = 108.801(2)^\circ$ ,  $V = 6319(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ . Кроме того, химическая формула минерала была переопределена:  $Ag_2Cu_6Pb_{25}Bi_{26}S_{68}$  (Makovicky et al., 2001). Именно она сейчас принята Международной минералогической ассоциацией в качестве идеальной формулы нейита (The New IMA List of Minerals, <http://cnmnc.units.it>).

Находки этой сульфосоли отмечались и в других странах. В Португалии минерал, по химическому составу «примерно соответствующий нейиту» (формулировка авторов) был описан в кварцевых жилах вольфрамового рудника Вале даш Гаташ (Vale das Gatas) в виде отдельных зерен до 10 мкм и пластинчатых включений в галените (Gaspar et al., 1987). В работе приведены два электронно-зондовых анализа, из которых видно, что в составе минерала полностью отсутствует Cu. В этой связи диагностику данной сульфосоли как нейита, очевидно, следует признать ошибочной.

В качестве третьей находки в мире был описан нейит из рудника Аляска (Alaska Mine) в Колорадо, США. Минерал образует пластинки длиной до нескольких миллиметров в Ag-Bi-содержащем галените и ассоциирует с наффилдитом, тетраэдритом, халькопиритом, сфалеритом и пиритом (Karup-Møller, Makovicky, 1992). К сожалению, аналитических данных, подтверждающих диагностику, в статье не приведено.

В последующие годы находки нейита упоминались и в ряде других месторождений США: Джонни Лайон Хиллз (Johnny Lyon Hills) и Кортез (Cortez prospect) в Аризоне (Anthony et al., 1990; Bernard, Hyršl, 2015), Идарато (Idarado Mine) в Колорадо (Eckel, 1997), Виски Каньон (Whisky Canyon) и Блю Бёрд (Blue Bird Mine) в Неваде (Castor, Ferdock, 2004), а также в рудном районе Фалун в Швеции (Bernard, Hyršl, 2015). Все эти работы, однако, также не содержат диагностической информации и, соответственно, эти находки нейита нуждаются в подтверждении современными инструментальными методами.

Нейит в виде включений до 0.18 мм в халькопирите был установлен в рудах месторождения Охори (Ohori) на острове Хонсю, Япония (Yokoro, Nakashima, 2008). Минерал диагностирован электронно-зондовым методом, его состав очень близок к идеальному для данной сульфосоли.

В 2012 году в скарнах месторождения Бэица Бихор (Băița Bihor) в Румынии был описан изоструктурный нейиту новый минерал, получивший название купронеит  $Cu_7Pb_{27}Bi_{25}S_{68}$  (Pinea et al., 2012). Основное его отличие от нейита заключается в том, что структурная позиция Ag1 в купронеите полностью занята медью. В статье по купронеиту опубликованы и химические анализы нейита из других месторождений — Догнечеа (Dognecea) в Румынии и Фелбертал (Felbertal) в Австрии. Вслед за купронеитом в месторождении Бэица Бихор был также достоверно установлен и нейит (Ciobanu et al., 2016).

Таким образом, нейит следует считать относительно редким минералом. В России, насколько известно авторам данной статьи, он ранее не отмечался, поэтому описываемую в настоящей статье находку на отвалах Юго-Коневского вольфрамового месторождения на Южном Урале мы считаем первой на территории нашей страны. Ниже приводятся минералогическая и кристаллохимическая характеристики этой сульфосоли и ее сравнение со структурно изученными нейитом и купронеитом из мест их первых находок.

## КРАТКИЕ СВЕДЕНИЯ О ЮГО-КОНЕВСКОМ МЕСТОРОЖДЕНИИ

Юго-Коневское вольфрамовое месторождение ( $56^{\circ}05'03''$  с. ш. и  $61^{\circ}17'38''$  в. д.) расположено в 4,5 км к северо-западу от дер. Юшково Каслинского района Челябинской области, приблизительно в 100 км к северу от г. Челябинска. Оно, наряду с соседними Пороховским и Карасьевским вольфрамовыми месторождениями, принадлежит Коневско-Карасьевскому рудному узлу, который является частью Боевско-Биктимировской редкометаллической зоны, простирающейся более чем на 25 км в меридиональном направлении вдоль цепочки небольших гранитных массивов юго-коневского комплекса согласно с направлением Кодинского надвига и общей структурой Урала (Золоев и др., 2004). Формирование всех месторождений Коневско-Карасьевского рудного узла связано с постмагматическими гидротермальными процессами.

В геологическом отношении Юго-Коневское месторождение приурочено к восточной части одноименного гранитного массива. В пределах массива различаются два типа пород: биотитовые порфиroidные мелкозернистые адамеллиты первой фазы со средним содержанием кремнезема 69,5 % и средне- и крупнозернистые лейкократовые граниты второй фазы с содержанием кремнезема 73,6—75,5 %. В зоне контакта обоих типов пород биотитовые порфиroidные адамеллиты первой фазы подверглись метасоматическому преобразованию под влиянием лейкогранитов второй фазы. В северной части рудного поля кварцевые жилы залегают в среднезернистых лейкогранитах, а в южной — в мелкозернистых порфиroidных адамеллитах. Мощность жил колеблется от 1—6 см до 1,5 м, они прослежены до глубины 200 м. Жилы имеют кварц-мусковит-флюоритовый состав. Рудная минерализация представлена вольфрамитом, шеелитом, бериллом, пиритом, сфалеритом, халькопиритом, галенитом и молибденитом. Выделения сульфосолей  $\text{V}_i$  чаще всего занимают пространство между нерудными минералами жил, что интерпретируется как их более позднее образование по отношению к кварцу, мусковиту и флюориту. С другой стороны, иногда висмутовые минералы образуют моно- или полиминеральные включения в сульфидах, преимущественно пирите, образующемся близодновременно с породообразующими минералами жил. Таким образом, сульфосоли  $\text{V}_i$  формировались, скорее всего, на протяжении всего рудного интервала (Золоев и др., 2004; Рогов и др., 2023; Касаткин и др., 2023).

Юго-Коневское месторождение имеет довольно долгую историю изучения, разведки и эксплуатации. Оно было открыто в 1930 г. Боевской ГРП под руководством С. П. Колодкина. В 1931 г. при разведке магистральными канавами была обнаружена густая сеть кварцевых вольфрамоносных жил. В 1932—1934 гг. эти жилы вскрывались по простиранию мелкими выработками, а на глубину — шурфами и шахтами. В 1934 г. был построен Коневский рудник и начата эксплуатация месторождения, получившего название «3-й год пятилетки» (Колодкин, 1936). Основными рудными минералами являлись вольфрамит, шеелит и берилл. В рудоносных жилах содержание  $\text{WO}_3$  составляло 0,22—0,99 %, а  $\text{V}_i\text{O}_5$  — 0,005—0,097 % (Золоев и др., 2004). Запасы  $\text{WO}_3$  по состоянию на 1956 год составляли 395 т (Коровко и др., 2015). В 1957 г. в результате аварии на химическом комбинате «Маяк» в закрытом городе Челябинск-40 (ныне — Озёрск) и возникшей радиационной чрезвычайной ситуации техногенного характера Юго-Коневское месторождение, расположенное всего в 45 км к северо-востоку от места аварии, было законсервировано, а рудничный поселок разрушен. В настоящее время на территории месторождения сохранились только фрагменты шахтных сооружений и рудничных построек, а также отвалы пустой породы, занимающие площадь около  $70 \times 50$  м.

Несмотря на то, что месторождение известно давно, его минералогия до последнего времени оставалась слабо изученной. Имеющаяся в литературе информация

ограничивалась кратким перечнем минеральных видов, встреченных на месторождении, и общим описанием главных жильных и рудных минералов, таких как кварц и вольфрамит (Бонштедт-Куплетская, 1943; Золоев и др., 2004). Недавно, в 2023 году, были опубликованы сразу две статьи, посвященные минералогии Юго-Коневского месторождения. В первой из них подробно освещены минеральные формы вольфрама (Рогов и др., 2023), а во второй — находки гипогенных минералов висмута (Касаткин и др., 2023). Повышенный интерес к данному объекту обусловлен появлением и последующим изучением нового каменного материала, отобранного в начале 2020-х годов на отвалах месторождения как профессиональными минералогами, так и коллекционерами-любителями. Благодаря указанным публикациям кадастр Юго-Коневского месторождения пополнился не одним десятком минеральных видов. Особенно примечательны находки редких висмутовых сульфосолей, надежная диагностика которых, как известно, сопряжена с трудностями в силу малого размера выделений и частых сростаний друг с другом. Ангелаит, дантопаит, купромаковицкиит и купромакованит были впервые достоверно диагностированы на территории Российской Федерации, а залыцбургит, купропаванит, маковицкиит и муммеит — на территории Южного Урала (Касаткин и др., 2023).

Посещение одним из авторов настоящей статьи (А.М.К.) отвалов месторождения в мае 2023 года (рис. 1) дало дополнительные образцы, в которых и был обнаружен описываемый в настоящей статье нейит.



**Рис. 1.** Отвалы Юго-Коневского вольфрамового месторождения. Место отбора образцов с нейитом показано стрелкой. Поле зрения ~ 15×10 м. Май 2023 года. Фото: П. М. Андриушченко.

**Fig. 1.** Dumps of the Yugo-Konevo tungsten deposit. Place of neyite sampling is shown by an arrow. FOV ~ 15×10 m. May 2023. Photo: P. M. Andryushchenko.

## МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Оптические свойства нейита и ассоциирующих с ним рудных минералов в отраженном свете исследованы под поляризационными микроскопами ПОЛАР-3 и ПОЛАМ-215. Спектры отражения измерены в воздухе по стандарту Si на микроскопическом спектрофотометре МСФ-Р фирмы ЛОМО (диаметр фотометрической диафрагмы 0.3 мм, размер выходной щели монохроматора 0.1 мм, спектральный интервал 6 нм; аналитик А. В. Касаткин).

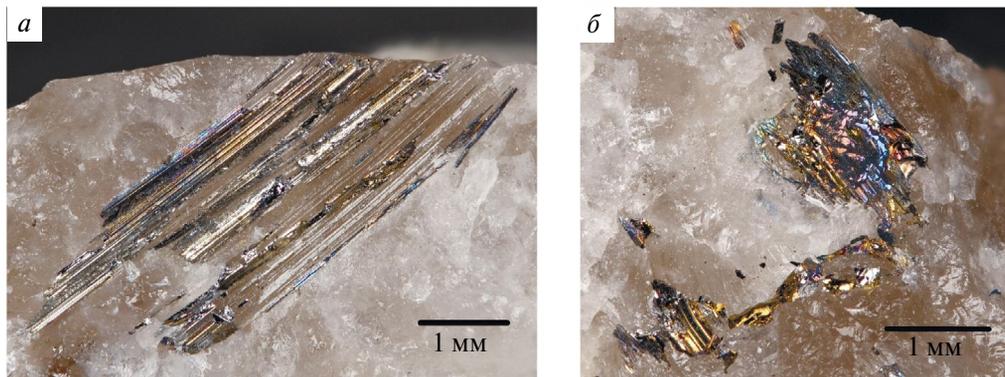
Изучение микроморфологии и первичное определение химического состава южно-уральского нейита и ассоциирующих с ним минералов выполнено на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) Hitachi FlexSEM 1000 с ЭДС-детектором Xplore Contact 30 и системой анализа Oxford AZtecLive STD при ускоряющем напряжении 20 кВ, диаметре зонда 2  $\mu\text{м}$  и поглощенном токе 5 нА на металлическом кобальте (аналитик А. В. Касаткин). Определявшиеся элементы, аналитические рентгеновские линии и стандарты:  $SK\alpha$  — FeS<sub>2</sub>;  $CuK\alpha$  — Cu;  $AgL\alpha$  — Ag;  $CdL\beta$  — Cd;  $TeL\alpha$  — HgTe;  $PbL\alpha$  — PbSe;  $BiL\alpha$  — Bi. Количественные анализы химического состава выполнены с помощью волнового электронно-зондового микроанализатора Cameca SX 100 в лаборатории электронной микроскопии и микроанализа Департамента геологических наук Масарикова университета, г. Брно, Чехия (аналитик Р. Шкода). Условия анализа: ускоряющее напряжение 25 кВ, ток зонда 5 нА, диаметр зонда 3  $\mu\text{м}$ . Определявшиеся элементы, аналитические рентгеновские линии, кристаллы-анализаторы и использовавшиеся стандарты:  $SK\alpha$  (LPET) — халькопирит;  $CuK\alpha$  (LLIF) — Cu;  $AgL\alpha$  (PET) — Ag;  $CdL\beta$  (PET) — Cd;  $TeL\alpha$  (LPET) — HgTe;  $PbM\alpha$  (LPET) — PbSe;  $BiM\beta$  (LPET) — Bi. Содержания в изученных минералах остальных элементов с атомными номерами выше, чем у бериллия, в частности Fe, As, Se и Sb, оказались ниже предела чувствительности электронно-зондового метода.

Рентгендифракционные данные получены на дифрактометре Rigaku XtaLAB Synergy-S, оснащенный монохроматическим микрофокусным  $MoK\alpha$  источником излучения PhotonJet-S ( $\lambda = 0.71073 \text{ \AA}$ ) работающем при 50 кВ и 1.0 мА, и гибридным фотонным счетчиком NuPix 6000HE (аналитики И. В. Корняков и В. В. Гуржий). Стратегия эксперимента была рассчитана с целью получить полную сферу Эвальда, и содержала 12  $\omega$ -проходов с суммарным количеством кадров равным 2235, шагом 0.38°, и экспозицией, равной 30 секундам.

Процедуры интегрирования, а также введения поправок на поляризацию и эффект Лоренца выполнены в программном комплексе *CrysAlisPro* (2023). Поправка на поглощение проведена численным методом на основе воссозданной трехмерной модели кристалла с использованием сеток интегрированных по Гауссу—Лежандру. Кристаллическая структура решена с помощью алгоритма двойного пространства *SHELXT* (Sheldrick 2015a) и уточнена методом наименьших квадратов *SHELXL* (Sheldrick 2015b), встроенных в программный комплекс *OLEX2* (Dolomanov et al., 2009).

МОРФОЛОГИЯ, ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
И ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НЕЙИТА

Нейит найден в образцах, представляющих собой небольшие фрагменты кварцевых жил с мусковитом и флюоритом. Он образует длиннопризматические и игольчатые кристаллы длиной до 3 мм и толщиной до 0.5 мм с продольной штриховкой на гранях (рис. 2, а). Нейит имеет свинцово-серый цвет и сильный металлический блеск. Часть кристаллов покрыта характерной для этого минерала тонкой пленкой радужной побелости (рис. 2, б). Минерал чрезвычайно хрупкий, при раскалывании демонстрирует раковистый излом. По этой причине в изученных образцах очень мало целых кристаллов. Большая часть их обломана с одного или обоих концов, кроме того, в кварце



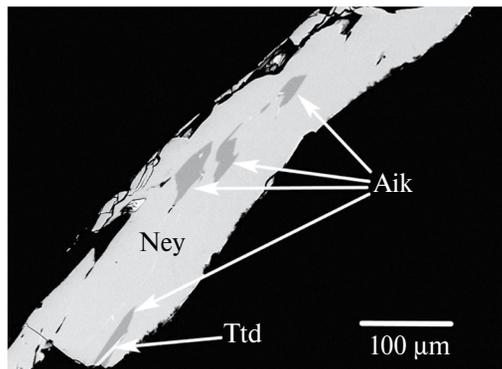
**Рис. 2.** Нейит из Юго-Коневского вольфрамового месторождения: *a* — фрагмент призматического кристалла в кварце; *б* — фрагменты кристаллов нейита с характерной побежалостью. Фото: М. Д. Мильшина.

**Fig. 2.** Neyite from the Yugo-Konevo tungsten deposit. *a* — fragment of prismatic crystal in quartz; *b* — fragments of crystals and grains of neyite showing characteristic iridescence. Photo: M. D. Milshina.

имеются многочисленные отпечатки от выпавших или разрушенных кристаллов и их фрагментов. По физическим свойствам южно-уральская сульфосоля идентична нейиту из места его первой находки (Drummond et al., 1969).

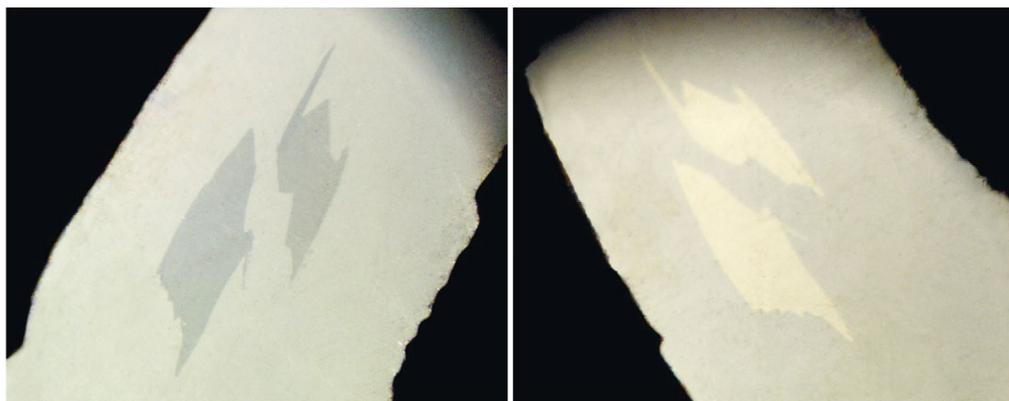
Под сканирующим электронным микроскопом в некоторых кристаллах нейита фиксируются мелкие (до  $0.1 \times 0.05$  мм) вросстки айкинита и еще более мелкие (до  $0.05 \times 0.005$  мм) ламели тетрадимита (рис. 3). Айкинит также образует мономинеральные идиоморфные зерна свинцово-серого цвета размером до 0.5 мм. Пирит в кубических кристаллах до 1 мм дополняет ассоциацию рудных минералов.

В отраженном свете нейит белый, близкий по отражательной способности с ассоциирующим айкинитом, однако последний имеет слабый желтоватый оттенок. Нейит хорошо отличим от айкинита по двуотражению (очень слабое у нейита и отчетливое у айкинита) и особенно по эффектам анизотропии. В скрещенных николях анизотропия у нейита умеренная, в серых тонах, а у айкинита она очень сильная, с изменением цветовой тональности при повороте столика микроскопа на  $45^\circ$  от темно-серого до очень светло-серого (рис. 4).



**Рис. 3.** Включения айкинита (Aik) и тетрадимита (Ttd) в кристалле нейита (Ney). СЭМ-изображение в отраженных электронах.

**Fig. 3.** Aikinite (Aik) and tetradymite (Ttd) inclusions in neyite (Ney) crystal. SEM image, BSE mode.



**Рис. 4.** Центральная часть кристалла нейита с включениями айкинита, изображенного на рис. 3, при вращении столика микроскопа на 45°. Отраженный свет, николи скрещены. Хорошо видна разница в цветных эффектах анизотропии между айкинитом и вмещающим нейитом.

**Fig. 4.** Cental part of neyite crystal with aikinite inclusions pictured in Fig. 3, when rotating the microscope stage by 45°. Reflected light, crossed nicols. The difference in anisotropy color effects between aikinite and neyite is well observed.

Спектры отражения нейита и ассоциирующего с ним айкинита (табл. 1, рис. 5) имеют пологий профиль. У нейита отмечается небольшой максимум на границе голубой и зеленой областей, в то время как у айкинита он сдвинут в более длинноволновую область 540–560 нм. Спектры и коэффициенты отражения нейита публикуются, вероятно, впервые. В справочнике (Criddle, Stanley, 1993) приведены коэффициенты отражения для «нейита из Китая», но при этом сами авторы указывают, что к ним надо относиться с осторожностью, так как диагностика этой сульфосоли не подтверждена рентгенографически. Более того, в опубликованном там же химическом анализе минерала полностью отсутствует серебро, поэтому его диагностика в качестве нейита представляется нам ошибочной.

**Таблица 1.** Коэффициенты отражения нейита и айкинита из Юго-Коневского месторождения  
**Table 1.** Reflectance values of neyite and aikinite from the Yugo-Konevo deposit

λ (нм)	Нейит		Айкинит	
	$R_{\max}$	$R_{\min}$	$R_{\max}$	$R_{\min}$
400	42.0	39.6	43.1	38.7
420	42.1	39.8	43.4	39.0
440	42.3	39.9	43.7	39.4
460	42.5	40.1	44.0	39.7
480	42.6	40.2	44.4	40.0
500	42.7	40.4	44.6	40.1
520	42.6	40.4	44.8	40.2
540	42.3	40.1	45.1	40.3
560	42.0	39.9	45.0	40.0
580	41.6	39.6	44.8	39.7
600	41.3	39.4	44.5	39.4
620	41.1	39.5	44.2	39.1
640	41.1	39.5	43.9	38.9
660	41.1	39.5	43.6	38.7
680	41.3	39.7	43.4	38.6
700	41.4	39.9	43.2	38.5

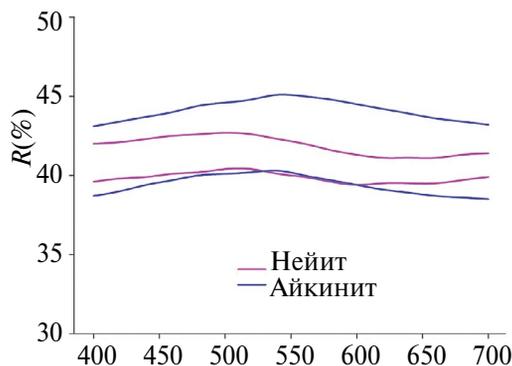


Рис. 5. Спектры отражения нейита и айкинита из Юго-Коневского месторождения.

Fig. 5. Reflectance spectra of neyite and aikinite from Yugo-Konevo deposit.

## ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ

Химический состав юго-коневского нейита, а также ассоциирующих с ним айкинита и тетрадимита дан в табл. 2. Усредненный химический состав нейита, рассчитанный по 7 анализам, таков (мас. %): Ag 1.75, Cu 3.59, Pb 35.01, Cd 0.12, Bi 42.59, S 16.54, сумма 99.60. Он отвечает эмпирической формуле (расчет на 68 атомов S):

Таблица 2. Химический состав нейита и ассоциирующих с ним минералов (мас. %). Месторождение Юго-Коневское

Table 2. Chemical composition of neyite and associated minerals (wt %) from the Yugo-Konevo deposit

Компонент	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Cu	3.50	3.62	3.58	3.57	3.67	3.63	3.57	10.49	10.10	10.81	—
Ag	1.67	1.93	1.86	1.97	1.96	1.28	1.55	—	—	—	—
Cd	0.14	0.13	0.09	0.24	0.08	0.10	0.06	—	—	—	—
Pb	34.19	34.51	34.48	34.51	34.92	37.52	34.97	33.62	34.24	34.04	—
Bi	42.02	42.15	42.63	42.37	43.42	42.81	42.71	40.28	38.96	38.07	59.52
Te	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	35.94
S	16.49	16.44	16.35	16.34	16.58	16.84	16.77	17.44	15.67	16.23	4.37
Сумма	98.01	98.78	98.99	99.00	100.63	102.18	99.63	101.83	98.97	99.15	99.83
Формульные коэффициенты											
Cu	7.28	7.55	7.51	7.49	7.59	7.39	7.30	0.93	0.95	1.00	—
Ag	2.05	2.37	2.30	2.44	2.39	1.54	1.87	—	—	—	—
Cd	0.16	0.15	0.11	0.28	0.09	0.12	0.07	—	—	—	—
Pb	21.82	22.09	22.19	22.22	22.16	23.44	21.94	0.91	0.99	0.96	—
Bi	26.58	26.75	27.20	27.05	27.32	26.52	26.57	1.09	1.12	1.07	2.03
Te	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.00
S	68	68	68	68	68	68	68	3.07	2.93	2.97	0.97
N <sub>aik</sub> , %	—							91.54	93.03	95.61	—

Примечание. 1—7 — нейит, 8—10 — айкинит (8 — включения в нейите; 9, 10 — отдельные зерна), 11 — тетрадимит. Формульные коэффициенты рассчитаны на 68 атомов серы (нейит) и на сумму атомов, равную 6 (айкинит) и 5 (тетрадимит). N<sub>aik</sub>, % — доля айкинитового компонента в минерале. Прочерк — содержание компонента ниже предела обнаружения.

$\text{Ag}_{2.14}\text{Cu}_{7.45}\text{Pb}_{22.27}\text{Cd}_{0.14}\text{Bi}_{26.86}\text{S}_{68}$ . Таким образом, по сравнению с идеальной формулой  $\text{Ag}_2\text{Cu}_6\text{Pb}_{25}\text{Bi}_{26}\text{S}_{68}$  южно-уральский минерал имеет небольшой избыток Cu и весьма ощутимый дефицит Pb. Содержание свинца в юго-конеvской сульфосоли наименьшее (до 21.82 а. ф.) из всех опубликованных в литературе химических анализов нейита из разных месторождений. Также в южно-уральском минерале имеется небольшая примесь Cd, традиционно помещаемого в формулах свинцовых сульфосолей вместе с Pb. Ранее очень малая примесь Cd (0.04 а. ф.) отмечалась только в нейите из Японии (Yokoro, Nakashima, 2008).

Ассоциирующий с нейитом айкинит диагностирован на основании доли айкинитового минала  $N_{\text{aik}}$  в нем (см. табл. 2), рассчитанной в соответствии с Makovicky, Makovicky (1978), а также монокристалльных рентгеновских данных. Отметим, что по доле айкинитового компонента ( $N_{\text{aik}} = 91.54$ ) сульфосоль, образующая микровключения в нейите (ан. 8), располагается посередине между фридрихитом ( $N_{\text{aik}}$  в идеальной формуле 83.33) и айкинитом ( $N_{\text{aik}} = 100$ ), однако правомерность ее отнесения именно к айкиниту подтверждается монокристалльными рентгеновскими данными (см. ниже).

### РЕНТГЕНОВСКИЕ ДАННЫЕ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА

Все кристаллы нейита, изученные с помощью монокристалльной рентгенографии и рентгеноструктурного анализа, содержали вросстки айкинита. После тщательного изучения дифракционных картин был отобран монокристалл с наиболее четко разделенными отражениями нейита и айкинита. Кристаллографические данные, условия съемки и параметры уточнения кристаллической структуры нейита приведены в табл. 3. Финальные факторы расходимости  $R_1$  и  $wR_2$  равны, соответственно, 3.40 % и 6.96 % для 7660 независимых отражений с  $I > 2\sigma(I)$ . Химическая формула, рассчитанная из структурных данных, такова:  $\text{Ag}_{2.33}\text{Cu}_{7.15}\text{Pb}_{22.43}\text{Cd}_{0.22}\text{Bi}_{26.87}\text{S}_{68}$ . Она находится в очень хорошем соответствии с эмпирической формулой, полученной электронно-зондовым методом.

Полученный массив дифракционных данных также позволил решить и уточнить структуру айкинита вплоть до  $R_1 = 2.05\%$  и  $wR_2 = 4.51\%$  для 690 независимых отражений с  $I > 2\sigma(I)$ . Структура была уточнена в пространственной группе  $Pnma$  со следующими параметрами элементарной ячейки:  $a = 11.6245(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 4.0355(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 11.3033(3) \text{ \AA}$ ,  $V = 530.25(2) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ .

Так же, как и в структурах нейита и купронеита, опубликованных ранее (Makovicky et al., 2001; Ilinsa et al., 2012), кристаллическая структура южно-уральской сульфосоли содержит 26 позиций тяжелых катионов ( $\text{Bi}^{3+}$  и  $\text{Pb}^{2+}$  с малыми примесями  $\text{Ag}^+$  и  $\text{Cd}^{2+}$ ) и 34 позиции анионов  $\text{S}^{2-}$ . Однако если в структурах нейита и купронеита из мест их первых находок всего четыре позиции, заселенные легкими катионами, то в изученном нами нейите таких позиций пять. Одна из них (Ag1) заселена катионами  $\text{Ag}^+$  и  $\text{Cu}^+$  в пропорции 0.75(3):0.25(3), три позиции полностью заселены катионами  $\text{Cu}^+$ , и последняя заселена катионами  $\text{Cu}^+$  на 0.45. Именно доминирование Ag над Cu в позиции Ag1 позволяет уверенно отнести южно-уральскую сульфосоль к нейиту, а не купронеиту.

Отдельного упоминания заслуживает методика уточнения факторов заселенностей смешанных позиций тяжелых катионов. Очевидно, что катионы  $\text{Pb}^{2+}$  и  $\text{Bi}^{3+}$ , имея одинаковое количество электронов ( $80 e^-$ ), не могут быть уточнены с достаточной степенью уверенности исключительно на основе дифракционных данных. Поэтому, соотношения Pb:Bi были вычислены на основе методов баланса валентностей связей и распределения заряда, после чего заселенности позиций фиксировались вручную. Кроме того, согласно распределению электронной плотности, несколько позиций (Me3, 6, 7, 9, 11, 17) заселены тяжелыми катионами не полностью, что является индикатором

**Таблица 3.** Кристаллографические данные, условия съемки и параметры уточнения кристаллической структуры нейита.**Table 3.** Crystal parameters, data collection and structure refinement details of neyite.

<i>Кристаллографические параметры</i>	
Химическая формула	$\text{Ag}_{2.329}\text{Bi}_{26.874}\text{Cd}_{0.215}\text{Cu}_{7.153}\text{Pb}_{22.429}\text{S}_{68}$
$M_r$	13176.86
Пространственная группа	$C2/m$
$a, b, c$ (Å)	37.3900(6), 4.0550(1), 43.5821(7)
$\beta$ (°)	108.740(2)
$V$ (Å <sup>3</sup> )	6257.5(2)
$Z$	2
$\mu$ (мм <sup>-1</sup> )	70.41
Рассчитанная плотность (г/см <sup>3</sup> )	6.992
<i>Параметры сбора дифракционных данных</i>	
Дифрактометр	Rigaku XtaLAB Synergy-S
Тип излучения	MoK $\alpha$ ( $\lambda = 0.71073$ )
Размеры кристалла (мм)	0.07 × 0.05 × 0.04
Угловой диапазон 2 $\theta$ (°)	4.294–54.994
Температура (К)	296(2)
Диапазон $hkl$	$-48 \leq h \leq 48, -5 \leq k \leq 5, -56 \leq l \leq 56$
$T_{\min}, T_{\max}$	0.071, 0.185
Количество измеренных отражений, независимых отражений и отражений с $I > 2\sigma(I)$	81747, 8222, 7660
$(\sin \theta/\lambda)_{\max}$ (Å <sup>-1</sup> )	0.65
$R_{\text{int}}, R_{\sigma}$	0.052, 0.025
<i>Параметры уточнения</i>	
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$	0.034, 0.069
$R_1$ и $wR_2$ для всех данных	0.038, 0.071
Количество уточняемых параметров	400
Остаточная электронная плотность $\Delta\rho_{\max}$ и $\Delta\rho_{\min}$ (e <sup>-</sup> Å <sup>-3</sup> )	4.32/-2.54

присутствия в них более легких катионов. В таких случаях эти позиции уточнялись с введением примеси легких катионов, затем рассчитывались суммы валентностей и распределения заряда, после чего заселенности либо фиксировались на основе уже уточненных значений (в случае наличия трех сортов атомов в позиции), либо оставались уточняемыми (в случае наличия двух сортов атомов в позиции). Отметим также, что параметры анизотропных смещений позиции *Me25* демонстрировали сильную анизотропию, что вынудило нас расщепить данную позицию на две. К сожалению, из-за программного ограничения пакета SHELX, номер позиции не может превышать четырех знаков, из-за чего позиция *Me25* разделена на *Me25* и *Me26*, а позиция *Me27*, в свою очередь, аналогична позициям *Me26* в уже опубликованных структурных моделях нейита и купронейита. Во избежание путаницы при описании структуры

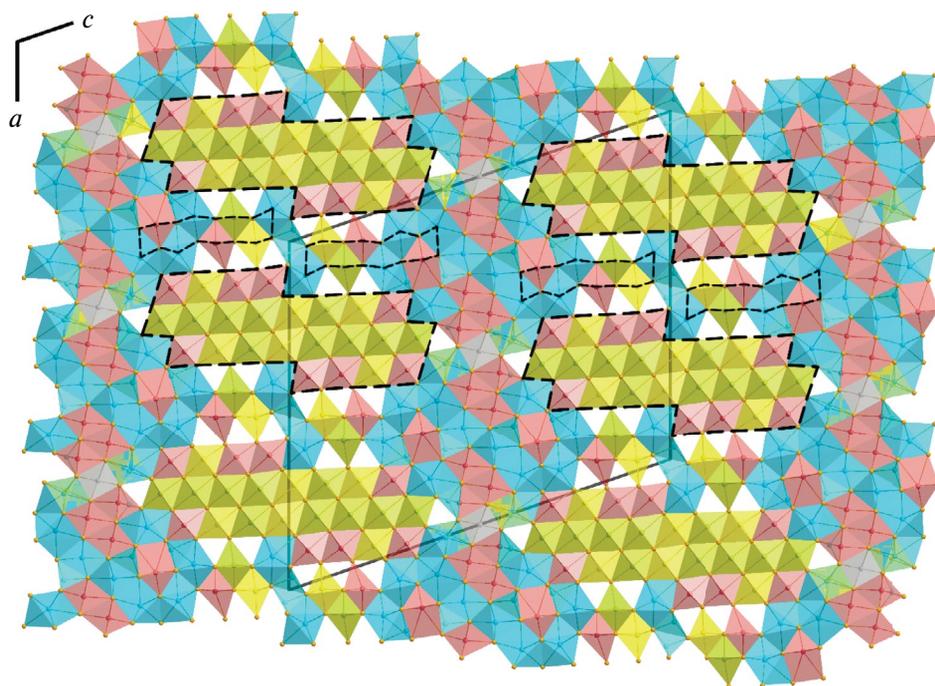
южно-уральской сульфосоли, позиции *Me25* и *Me26* ниже обозначены как *Me25a* и *Me25b*, а позиция *Me27* — как *Me26*.

Одиннадцать из 26 позиций тяжелых катионов являются смешанными и заселены катионами  $Pb^{2+}$  и  $Bi^{3+}$  с примесями  $Ag^+$  и  $Cd^{2+}$ . Катионы, заселяющие данные позиции, координируются анионами  $S^{2-}$ : 17 позиций демонстрируют октаэдрическую координационную геометрию, еще 5 позиций являются семикоординированными (координации октаэдра с одной расщепленной вершиной и одношапочной тригональной призмой), а оставшиеся позиции окружены восемью анионами каждая (координация двушапочной тригональной призмы). Позиции легких катионов не показывают подобного разнообразия геометрий: позиция  $Ag1:Cu1$  находится в координации [2+4]-сжатого октаэдра, в то время как оставшиеся находятся в тетраэдрических полях лигандов.

Кристаллическую структуру нейита можно в общем виде описать как состоящую из трех различных структурных блоков, условно принадлежащих структуре галенита  $PbS$ . Наиболее заметным из них является одномерный блок вытянутый вдоль направления *b*. Данный блок представляет из себя слэбы из слоев (111) структуры  $PbS$  толщиной в три октаэдра, и ориентированных примерно параллельно направлению *c* (рис. 6). В направлении *a* блоки  $(111)_{PbS}$  чередуются с блоками  $(100)_{PbS}$ , толщиной в два атомных слоя. При этом, центральная октаэдрическая позиция  $(100)_{PbS}$  на  $z = 0$  является вакантной, и вместо тяжелого катиона присутствуют два симметрично эквивалентных катиона  $Cu^+$  в тетраэдрической координации. Образованная таким образом «ступень» в блоке  $(100)_{PbS}$  формирует аналогичную в блоке  $(111)_{PbS}$ . Полученный модульный слой чередуется вдоль направления *c* с сильно искаженными слоями  $(922)_{PbS}$  расположенными на  $z = \frac{1}{2}$ , толщиной от трех до четырех атомных слоев. Отметим, что одна октаэдрическая позиция слоя  $(922)_{PbS}$  с катионной позицией на  $z = 0$ , заселена катионами легких металлов ( $Ag_{0.75(3)}:Cu_{0.25(3)}$ ).

Все перечисленные модули кристаллической структуры нейита, в основном, состоят из октаэдров  $MeS_6$ , в то время как иные координационные геометрии по большей части сконцентрированы на границах между ними. Так, блоки  $(111)_{PbS}$  сформированы октаэдрами  $Me1-12S_6$ , что чуть менее половины всех симметрично независимых позиций тяжелых катионов структуры. Блоки  $(100)_{PbS}$  сформированы октаэдрами  $Me17$  и  $Me21$ , а также «расщепленным» октаэдром  $Me20$  (октаэдр с одной двойной апикальной вершиной). Рассматривая данный блок с точки зрения атомных слоев, принадлежащих материнской структуре галенита, к полиэдрам, формирующим блок  $(100)_{PbS}$  также можно отнести двушапочные тригональные призмы  $Me18$  и  $Me22$ , а также расщепленный октаэдр  $Me19$ . В качестве дополнительного связующего элемента между перечисленными двумя блоками присутствует двушапочная тригональная призма  $Me24$ , которую можно отнести как к одному, так и ко второму блокам. В свою очередь, слой  $(922)_{PbS}$  сформирован октаэдрами  $Me13$ , 15, 16 и одной одношапочной тригональной призмой  $Me14$ . Оставшиеся координационные полиэдры можно рассматривать как мостиковые между слоем  $(922)_{PbS}$  и блоками  $(111)_{PbS}$  и  $(100)_{PbS}$ . Так, одношапочная тригональная призма  $Me23$  имеет общие ребра с полиэдрами  $Me19$  и  $Me22$ , и общую вершину с октаэдром  $Me8$ . Расщепленная позиция  $Me25$  центрирует либо семи-, либо восьмивершинник (в зависимости от конкретной позиции, полученной в результате расщепления), и присоединяется к полиэдрам  $Me8$ , 11, 22, 23. Позиция  $Me26$  находится в координации двушапочной тригональной призмы, которая присоединяется к полиэдрам  $Me11$ , 18, 19.

Позиции легких катионов (не считая смешанные с тяжелыми) в кристаллической структуре нейита представлены в значительно меньшем количестве. Так, позиция  $Ag1$  (частично заселенная катионами  $Cu^+$ ) расположена внутри [2+4]-сжатого октаэдра, который расположен в центре ( $z = 0$ ) слоя  $(922)_{PbS}$ . Данные октаэдры, образуя непрерывный ряд вдоль направления *b*, в плоскости  $(100)$  окружены полиэдрами



**Рис. 6.** Кристаллическая структура нейита. Легенда: красный = позиции полностью заселенные  $\text{Bi}^{3+}$ ; синий = позиции полностью заселенные  $\text{Pb}^{3+}$ ; желтый = смешанно-заселенные позиции  $\text{Pb}^{2+}$ :  $\text{Bi}^{3+}$ ; зеленый = позиции с примесью  $\text{Ag}^+$  и  $\text{Cd}^{2+}$ ; оранжевый = атомы серы; бирюзовый = атомы  $\text{Cu}^+$ ; серый = атомы  $\text{Ag}^+$ . Черной штриховой линией выделены блоки  $(111)_{\text{PbS}}$  и  $(100)_{\text{PbS}}$ .

**Fig. 6.** A crystal structure of neyite. Legend: red = positions fully occupied by  $\text{Bi}^{3+}$ ; blue = positions fully occupied by  $\text{Pb}^{3+}$ ; yellow = positions occupied by a mixture of  $\text{Bi}^{3+}$  and  $\text{Pb}^{2+}$ ; green = positions with admixtures of  $\text{Ag}^+$  and  $\text{Cd}^{2+}$ ; orange = sulfur; cyan = copper; grey = silver. Dashed black lines denote  $(111)_{\text{PbS}}$  and  $(100)_{\text{PbS}}$  modules.

$\text{Me}25$ , а в направлении  $[10^{-1}]$  имеют общие ребра с октаэдрами  $\text{Me}16$ . Отметим, что позиция  $\text{Me}16$  заселена на 55 %, и между данными соседними октаэдрами находится дополнительная позиция  $\text{Cu}5$ , заселенная на 45 %, которая не представлена в опубликованных структурных моделях нейита и купронейита (детали данного разупорядочения обсуждаются ниже). Позиция  $\text{Cu}2$  находится в тетраэдрической координации, и два таких симметрично эквивалентных тетраэдра окружают «центр»  $(0, \frac{1}{2}, 0)$  блока  $(100)_{\text{PbS}}$ . Позиции  $\text{Cu}3$  и  $\text{Cu}4$  также находятся в тетраэдрических геометриях, которые расположены на «стыке» трех рассматриваемых блоков. Оба тетраэдра обращены гранями друг к другу, тетраэдр  $\text{Cu}3$  связывает между собой блоки  $(111)_{\text{PbS}}$  и  $(100)_{\text{PbS}}$ , а тетраэдр  $\text{Cu}4$  присоединяется к блоку  $(922)_{\text{PbS}}$ , и делит общие ребра с полиэдрами  $\text{Me}19$  и  $\text{Me}26$ .

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Из-за очень близкого количества электронов у  $\text{Pb}$  и  $\text{Bi}$  расчет заселенности смешанных позиций в структуре нейита производился нами на основе эмпирических кристаллохимических теорий: (i) теории валентности связей (Bresle, O'Keeffe, 1991; Brown, Altermatt, 1985; Brown, 2021), (ii) метода расчета распределения заряда (Норре, 1979; Nespolo et al., 1999; Nespolo et al., 2001; Nespolo, 2016), (iii) анализа искажений координационных полиэдров (Balić-Žunić, Makovicky, 1996; Makovicky, Balić-Žunić,

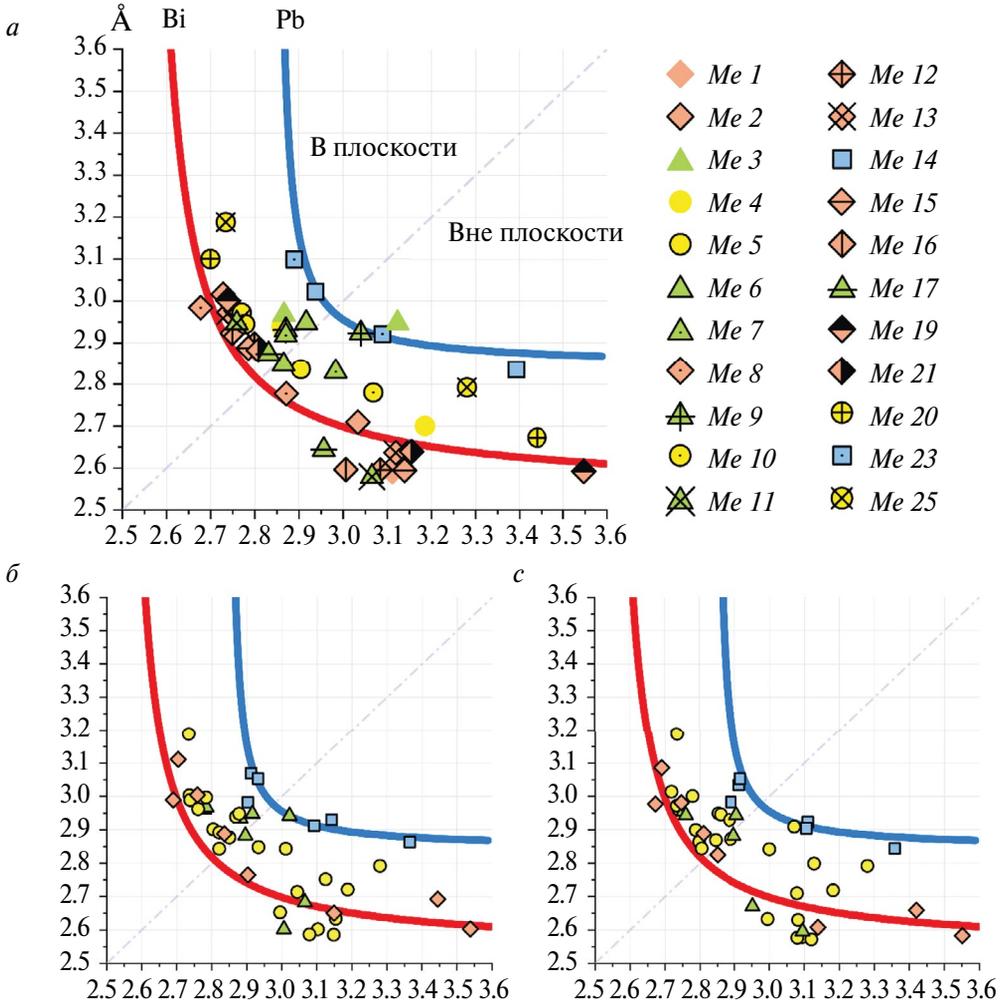
1998) и (iv) диаграммы противоположащих связей Трёмеля (Trömmel, 1981; Тора, Маковичку 2010). Первоначальный расчет заселенностей проведен с помощью расчета сумм валентностей связей (использовались параметры  $b$  и  $r_0$  равные 2.55 и 0.37 как для  $\text{Vi}^{3+}$ , так и для  $\text{Pb}^{2+}$  (Breese, O'Keeffe, 1991)), а затем рассчитанные заселенности уточнены с помощью метода расчета распределения заряда в программном пакете ECoN21 (Iinca, 2022). Для расчета валентностей связей  $\text{Cu-S}$  и  $\text{Cd-S}$  использованы значения, опубликованные в работах (Shields et al., 2000; Palenik, 2006). Расчеты параметров искажений КП и анализ противоположащих связей также выполнены в программе ECoN21 (Iinca, 2022).

Отдельно поясним применение метода расчета распределения заряда (charge distribution method; CD) и эффективного координационного числа (effective coordination number; ECoN) (Nespolo et al., 1999). В рамках методологии CD каждой связи в координационном полиэдре (КП) присваивается собственный вес, определяющий относительную силу данной связи: наиболее короткая связь имеет наибольший вес, и наоборот. С помощью данных весов рассчитывается соответствующее ECoN, после чего вычисляются заряды как центральных атомов,  $Q_X$ , так и полные заряды лигандов,  $Q_A$ . Полученные значения сравниваются с формальными зарядами  $q_X$  и  $q_A$  путем деления формальных зарядов на рассчитанные, и чем ближе полученное значение к 1, тем лучше заселенности позиций центральных атомов соответствуют своим длинам связей. Общие отклонения  $Q_X$  и  $Q_A$  от  $q_X$  и  $q_A$  оцениваются с помощью вычисления среднего абсолютного процентного отклонения, (mean absolute percentage deviation; MAPD) (Eon, Nespolo, 2015). Соответственно, чем ближе данное значение к 0%, тем меньше отклонения  $Q_X$  и  $Q_A$  от  $q_X$  и  $q_A$ .

Из табл. 6 следует, что рассчитанные суммы валентностей для позиций тяжелых катионов по большей части соответствуют своим заселенностям. Коэффициент MAPD всех катионных позиций равен 2.12%, что говорит о хорошем соответствии рассчитанных зарядов формальным. При этом следует отметить существенное отличие между заселенностями позиций в структуре южно-уральского нейита и структурах нейита и купронеита, опубликованных ранее. Так, в нашей модели 15 из 26 позиций являются несмешанными («чистыми»), в то время как в структурах нейита и купронеита из туpe localities таковых всего по 12. Также обращает на себя внимание большее количество позиций с примесями легких катионов в южно-уральской сульфосоли: в пяти позициях (*Me3*, 6, 7, 9, 11) здесь наблюдается примесь  $\text{Ag}^+$ , и еще в одной (*Me17*) — примесь  $\text{Cd}^{2+}$ , тогда как в опубликованных структурах нейита и купронеита таких позиций — соответственно, четыре (*Me6*, 9, 11, 16) и три (*Me6*, 9, 16). Несмотря на перечисленные отличия, параметры полиэдров всех трех структур отличаются друг от друга минимально. За исключением наблюдаемого в нашей модели разупорядочения позиции *Me25*, а также позиции *Me16* и дополнительной позиции *Cu5*, параметры полиэдров во всех трех структурах близки друг к другу.

Некоторые несмешанные позиции характеризуются сильным валентным недосыщением ( $>0.15$  валентных единиц; в. е.). Так, позиции *Me2*, 13, 19, 20, 24 и 26 демонстрируют недосыщение в пределах 0.16—0.31 в. е. Несмотря на это, значения  $q_X/Q_X$  находятся в диапазоне 0.99—1.05, что, в совокупности с анализом распределения противоположащих связей (рис. 7), позволяет говорить о корректности уточненных заселенностей. Позиция *Me18* является пересыщенной (2.17 в. е.), однако отношение  $q_X/Q_X$  равно 1.02, что также свидетельствует об отсутствии гетеровалентного замещения.

Наибольшее внимание привлекают смешанно-заселенные позиции тяжелых катионов. Восемь из одиннадцати смешанных позиций образуют центральные октаэдры блоков  $(111)_{\text{PbS}}$  (рис. 6). Здесь же расположены все позиции в структуре, содержащие катионы  $\text{Ag}^+$  в качестве примесных. Лишь четыре позиции данного блока не являются смешанными и полностью заселены катионами  $\text{Vi}^{3+}$ , и все они сконцентрированы



**Рис. 7.** Диаграммы противлежащих связей Трёмеля кристаллических структур (а) нейита из Юго-Коневского месторождения, наши данные (б) нейита из месторождения Лайм Крик, Канада (Makovicky et al., 2001), (в) купронейита (Ilinca et al., 2012).

Красные ромбы = позиции полностью заселенные  $\text{Bi}^{3+}$ ; синие квадраты = позиции полностью заселенные  $\text{Pb}^{2+}$ ; желтые круги = смешанно-заселенные позиции  $\text{Pb}^{2+}$ :  $\text{Bi}^{3+}$ ; зеленые треугольники = позиции с примесью  $\text{Ag}^+$  и  $\text{Cd}^{2+}$ . Гиперболы обозначают положение точек для идеализированных геометрий КП  $\text{Bi}^{3+}$  (красным) и  $\text{Pb}^{2+}$  (синий). Детали поясняются в тексте.

**Fig. 7.** Trörmel diagrams of opposing bond-lengths in the crystal structures of (a) neyite from Yugo-Konevo deposit, our data, (b) neyite from Lime Creek deposit, Canada (Makovicky et al., 2001), and (в) cupronenite (Ilinca et al., 2012). Red diamonds = positions fully occupied by  $\text{Bi}^{3+}$ ; blue squares = positions fully occupied by  $\text{Pb}^{2+}$ ; yellow circles = positions occupied by a mixture of  $\text{Bi}^{3+}$  and  $\text{Pb}^{2+}$ ; green triangles = positions with admixtures of  $\text{Ag}^+$  and  $\text{Cd}^{2+}$ . Hyperbolas means arrangement of points of idealized polyhedra centered by  $\text{Bi}^{3+}$  (red) and  $\text{Pb}^{2+}$  (blue). See details in the text.

на границах между блоками  $(111)_{\text{PbS}}$  и  $(100)_{\text{PbS}}$ . Оставшаяся часть смешанных позиций распределена между двумя оставшимися блоками. Так, блок  $(100)_{\text{PbS}}$  сформирован в частности позициями  $\text{Me}17$  и  $\text{Me}20$ , первая из которых содержит примесь  $\text{Cd}^{2+}$ , а вторая в равных пропорциях заселена  $\text{Bi}^{3+}$  и  $\text{Pb}^{2+}$ . Позиция  $\text{Me}25$ , содержащая минимальную примесь  $\text{Bi}^{3+}$ , расположена между блоками  $(111)_{\text{PbS}}$  и  $(922)_{\text{PbS}}$ .

Таблица 4. Координаты атомов, заселенность позиций, а также анизотропные и изотропные параметры их теплового смещения ( $\text{\AA}^2$ ) в кристаллической структуре нейтита

Table 4. Fractional atomic coordinates and anisotropic and isotropic thermal displacement parameters of atoms ( $\text{\AA}^2$ ) in the crystal structure of neyite

Позиция	Заселенность	$x/a$	$z/c$	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{13}$	$U_{iso}$
Me1	Bi <sub>1,00</sub>	0.40503(2)	0.05038(2)	0.0190(2)	0.0176(3)	0.0149(2)	0.00614(19)	0.01697(11)
Me2	Bi <sub>1,00</sub>	0.43172(2)	0.13693(2)	0.0232(3)	0.0198(3)	0.0156(2)	0.0052(2)	0.01978(11)
Me3	Pb <sub>0,839(6)</sub> Ag <sub>0,161(6)</sub>	0.31795(2)	0.07448(2)	0.0206(3)	0.0198(4)	0.0201(3)	0.0024(2)	0.0212(2)
Me4	Pb <sub>0,60</sub> Bi <sub>0,40</sub>	0.20528(2)	0.01426(2)	0.0209(3)	0.0181(3)	0.0186(2)	0.0043(2)	0.01970(11)
Me5	Bi <sub>0,82</sub> Pb <sub>0,18</sub>	0.45830(2)	0.22354(2)	0.0209(3)	0.0189(3)	0.0163(2)	0.00429(19)	0.01910(11)
Me6	Pb <sub>0,57</sub> Bi <sub>0,25</sub> Ag <sub>0,18</sub>	0.34386(2)	0.16126(2)	0.0217(3)	0.0229(3)	0.0184(3)	0.0073(2)	0.02080(13)
Me7	Pb <sub>0,30</sub> Bi <sub>0,36</sub> Ag <sub>0,14</sub>	0.23012(2)	0.09933(2)	0.0229(3)	0.0216(3)	0.0183(3)	0.0048(2)	0.02140(12)
Me8	Bi <sub>1,00</sub>	0.48366(2)	0.30960(2)	0.0176(2)	0.0177(3)	0.0172(2)	0.00367(19)	0.01794(11)
Me9	Pb <sub>0,76</sub> Bi <sub>0,08</sub> Ag <sub>0,16</sub>	0.37083(2)	0.24754(2)	0.0185(3)	0.0186(3)	0.0198(3)	0.0041(2)	0.01944(12)
Me10	Bi <sub>0,60</sub> Pb <sub>0,40</sub>	0.25669(2)	0.18637(2)	0.0238(3)	0.0201(3)	0.0220(3)	0.0053(2)	0.02243(12)
Me11	Bi <sub>0,849(6)</sub> Ag <sub>0,151(6)</sub>	0.40079(2)	0.33619(2)	0.0218(3)	0.0199(3)	0.0185(3)	0.0037(2)	0.0207(2)
Me12	Bi <sub>1,00</sub>	0.28823(2)	0.27427(2)	0.0201(2)	0.0187(3)	0.0176(2)	0.00805(19)	0.01832(11)
Me13	Bi <sub>1,00</sub>	0.59645(2)	0.47240(2)	0.0215(2)	0.0174(3)	0.0147(2)	0.00233(19)	0.01869(11)
Me14	Pb <sub>1,00</sub>	0.20469(2)	0.45815(2)	0.0291(3)	0.0223(3)	0.0220(3)	0.0065(2)	0.02489(12)
Me15	Bi <sub>1,00</sub>	0.31766(2)	0.46260(2)	0.0276(3)	0.0192(3)	0.0134(2)	0.0000(2)	0.02167(12)
Me16	Bi <sub>1,00</sub>	0.41770(3)	0.44709(3)	0.0291(5)	0.0245(6)	0.0420(6)	0.0196(5)	0.0299(2)
Me17	Bi <sub>0,892(7)</sub> Cd <sub>0,108(7)</sub>	0.12515(2)	0.14378(2)	0.0213(3)	0.0220(3)	0.0190(3)	0.0062(2)	0.0208(2)
Me18	Pb <sub>1,00</sub>	0.16740(2)	0.24911(2)	0.0294(3)	0.0205(3)	0.0230(3)	0.0057(2)	0.02496(12)
Me19	Bi <sub>1,00</sub>	0.18126(2)	0.34912(2)	0.0215(3)	0.0187(3)	0.0197(2)	0.0062(2)	0.02007(11)
Me20	Bi <sub>0,50</sub> Pb <sub>0,50</sub>	0.02927(2)	0.08669(2)	0.0312(3)	0.0210(3)	0.0208(3)	0.0010(2)	0.02610(13)
Me21	Bi <sub>1,00</sub>	0.06821(2)	0.19287(2)	0.0229(3)	0.0218(3)	0.0195(2)	0.0056(2)	0.02171(12)
Me22	Pb <sub>1,00</sub>	0.57804(2)	0.28986(2)	0.0391(3)	0.0220(3)	0.0202(3)	0.0045(2)	0.02830(13)
Me23	Pb <sub>1,00</sub>	0.60113(2)	0.38906(2)	0.0316(3)	0.0194(3)	0.0226(3)	0.0045(2)	0.02552(13)
Me24	Pb <sub>1,00</sub>	0.11217(2)	0.04297(2)	0.0406(4)	0.0329(4)	0.0295(3)	-0.0029(3)	0.03773(16)

Таблица 4 (продолжение)

Позиция	Заселенность	$x/a$	$z/c$	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{13}$	$U_{180}$
Me25	Pb <sub>0,315</sub> Bi <sub>0,135</sub>	0.49704(12)	0.41852(10)	0.0209(14)	0.0250(9)	0.0363(17)	0.0021(9)	0.0291(6)
Me26	Pb <sub>0,55</sub>	0.50284(11)	0.41071(9)	0.0244(11)	0.0268(8)	0.0434(17)	0.0062(8)	0.0327(6)
Me27	Pb <sub>1,00</sub>	0.31858(2)	0.37118(2)	0.0393(4)	0.0373(4)	0.0518(4)	0.0231(3)	0.04075(17)
Cu1	Ag <sub>0,75(3)</sub> Cu <sub>0,25(3)</sub>	0.5	0.5	0.0427(15)	0.090(2)	0.0190(11)	0.0011(9)	0.0528(10)
Cu2	Cu <sub>1,00</sub>	0.03112(6)	-0.01054(5)	0.0243(10)	0.0351(12)	0.0344(11)	0.0040(8)	0.0326(5)
Cu3	Cu <sub>1,00</sub>	0.23123(6)	0.30859(6)	0.0263(10)	0.0264(11)	0.0524(13)	0.0120(9)	0.0352(5)
Cu4	Cu <sub>1,00</sub>	0.25033(6)	0.41018(5)	0.0236(9)	0.0274(11)	0.0413(12)	0.0048(8)	0.0321(5)
Cu5	Cu <sub>0,45</sub>	0.40108(13)	0.41802(12)	0.030(2)	0.053(3)	0.033(2)	0.010(2)	0.0387(11)
S1	S <sub>1,00</sub>	0.06499(9)	-0.00442(8)	0.0208(16)	0.0171(17)	0.0123(14)	0.0079(12)	0.0161(6)
S2	S <sub>1,00</sub>	0.45385(9)	0.08352(8)	0.0163(15)	0.0223(18)	0.0156(15)	0.0060(12)	0.0178(7)
S3	S <sub>1,00</sub>	0.35146(10)	0.01742(9)	0.0224(17)	0.0196(18)	0.0240(18)	0.0007(14)	0.0236(8)
S4	S <sub>1,00</sub>	0.47914(10)	0.16646(9)	0.0162(16)	0.0237(19)	0.0239(17)	0.0056(13)	0.0214(7)
S5	S <sub>1,00</sub>	0.37086(11)	0.10672(8)	0.035(2)	0.0166(17)	0.0143(16)	0.0071(14)	0.0222(7)
S6	S <sub>1,00</sub>	0.25955(11)	0.04332(9)	0.0248(18)	0.026(2)	0.0229(18)	0.0065(15)	0.0247(8)
S7	S <sub>1,00</sub>	0.50775(10)	0.25334(9)	0.0176(16)	0.029(2)	0.0225(17)	0.0064(14)	0.0231(7)
S8	S <sub>1,00</sub>	0.39968(10)	0.19264(8)	0.0247(17)	0.0201(18)	0.0158(15)	0.0086(13)	0.0197(7)
S9	S <sub>1,00</sub>	0.28699(11)	0.12878(9)	0.0290(19)	0.0204(18)	0.0189(17)	0.0087(14)	0.0225(7)
S10	S <sub>1,00</sub>	0.17844(10)	0.06485(9)	0.0190(16)	0.0212(18)	0.0250(17)	0.0096(14)	0.0211(7)
S11	S <sub>1,00</sub>	0.53069(9)	0.33479(8)	0.0150(15)	0.0178(17)	0.0213(16)	0.0006(13)	0.0193(7)
S12	S <sub>1,00</sub>	0.42587(10)	0.27581(8)	0.0189(16)	0.0183(17)	0.0150(15)	0.0044(12)	0.0176(7)
S13	S <sub>1,00</sub>	0.31519(10)	0.21442(9)	0.0241(18)	0.025(2)	0.0216(17)	0.0073(14)	0.0237(8)
S14	S <sub>1,00</sub>	0.20751(11)	0.15543(10)	0.0286(19)	0.0188(19)	0.033(2)	0.0124(16)	0.0262(8)
S15	S <sub>1,00</sub>	0.45244(10)	0.35945(8)	0.0190(16)	0.0205(18)	0.0144(15)	0.0026(12)	0.0186(7)
S16	S <sub>1,00</sub>	0.34304(10)	0.30587(8)	0.0191(16)	0.0171(17)	0.0197(16)	0.0036(13)	0.0193(7)
S17	S <sub>1,00</sub>	0.23805(10)	0.24319(8)	0.0174(16)	0.0216(18)	0.0200(16)	0.0052(13)	0.0199(7)
S18	S <sub>1,00</sub>	0.55078(10)	0.48019(8)	0.0228(17)	0.0163(17)	0.0210(16)	0.0061(14)	0.0203(7)

Таблица 4 (окончание)

Позиция	Заселенность	$x/a$	$z/c$	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{13}$	$U_{iso}$
S19	S <sub>1,00</sub>	0.14922(10)	0.46145(8)	0.0206(16)	0.0175(17)	0.0162(15)	0.0025(13)	0.0189(7)
S20	S <sub>1,00</sub>	0.26792(10)	0.47318(8)	0.0200(16)	0.0182(17)	0.0145(15)	0.0052(12)	0.0176(7)
S21	S <sub>1,00</sub>	0.36387(10)	0.45277(9)	0.0227(17)	0.0194(18)	0.0258(18)	0.0135(14)	0.0213(7)
S22	S <sub>1,00</sub>	0.46587(10)	0.44357(9)	0.0222(17)	0.0237(19)	0.0274(18)	0.0109(15)	0.0237(8)
S23	S <sub>1,00</sub>	0.10349(9)	0.09602(8)	0.0176(15)	0.0170(17)	0.0172(15)	0.0061(12)	0.0172(7)
S24	S <sub>1,00</sub>	0.13882(9)	0.19297(8)	0.0157(15)	0.0195(17)	0.0162(15)	0.0029(12)	0.0177(7)
S25	S <sub>1,00</sub>	0.16630(10)	0.29567(8)	0.0217(17)	0.0197(18)	0.0193(16)	0.0053(13)	0.0206(7)
S26	S <sub>1,00</sub>	0.18604(10)	0.39248(8)	0.0178(16)	0.0218(18)	0.0165(15)	0.0023(13)	0.0195(7)
S27	S <sub>1,00</sub>	0.02887(9)	0.04572(8)	0.0194(16)	0.0179(17)	0.0125(14)	0.0038(12)	0.0169(6)
S28	S <sub>1,00</sub>	0.05427(9)	0.14343(8)	0.0180(16)	0.0208(18)	0.0150(15)	0.0038(12)	0.0183(7)
S29	S <sub>1,00</sub>	0.09224(10)	0.23956(8)	0.0190(16)	0.0199(17)	0.0139(15)	0.0057(12)	0.0175(7)
S30	S <sub>1,00</sub>	0.10883(9)	0.33776(8)	0.0166(15)	0.0138(16)	0.0162(15)	0.0036(12)	0.0159(6)
S31	S <sub>1,00</sub>	0.55886(10)	0.40984(8)	0.0258(17)	0.0182(17)	0.0131(15)	0.0042(13)	0.0195(7)
S32	S <sub>1,00</sub>	0.27701(10)	0.40187(8)	0.0236(17)	0.0171(17)	0.0132(15)	0.0046(13)	0.0183(7)
S33	S <sub>1,00</sub>	0.37794(11)	0.38608(9)	0.0241(18)	0.0247(19)	0.0259(18)	0.0126(15)	0.0238(8)
S34	S <sub>1,00</sub>	0.26131(10)	0.32224(8)	0.0209(16)	0.0216(18)	0.0169(16)	0.0086(13)	0.0192(7)

Примечание. Значения  $y/b$ ,  $U_{23}$  и  $U_{12}$  равны 0 для всех атомов.

Таблица 5. Избранные межатомные длины связей (Å) в кристаллической структуре нейита  
Table 5. Selected interatomic bond lengths (Å) in the crystal structure of neyite

Me1—	Me2—	Me3—	Me4—
S1 2.591(3)	S2 2.710(3)	S3 3.123(4)	S3 2.939(3) ×2
S2 2.799(2) ×2	S4 2.728(2) ×2	S5 2.866(3) ×2	S6 2.860(3) ×2
S3 2.887(3) ×2	S5 3.016(3) ×2	S6 2.969(3) ×2	S6 3.186(4)
S5 3.111(4)	S8 3.033(3)	S9 2.950(4)	S10 2.700(4)

Таблица 5 (продолжение)

<i>Me5—</i>		<i>Me6—</i>		<i>Me7—</i>		<i>Me8—</i>	
S4	2.836(4)	S5	2.865(4)	S6	2.982(4)	S7	2.871(4)
S7	2.770(2)	S8	2.916(3)	S9	2.920(3)	S11	2.677(2)
S8	2.972(3)	S9	2.950(3)	S10	2.870(3)	S12	2.984(3)
S12	2.904(3)	S13	2.848(4)	S14	2.832(4)	S15	2.777(3)
<i>Me9—</i>		<i>Me10—</i>		<i>Me11—</i>		<i>Me12—</i>	
S8	2.923(3)	S9	3.068(4)	S12	3.065(3)	S13	3.084(4)
S12	2.870(2)	S13	2.945(3)	S15	2.759(2)	S16	2.897(2)
S13	2.931(3)	S14	2.778(3)	S16	2.947(3)	S17	2.799(2)
S16	3.040(4)	S17	2.780(4)	S33	2.579(4)	S34	2.595(3)
<i>Me13—</i>		<i>Me14—</i>		<i>Me15—</i>		<i>Me16—</i>	
S18	2.741(2)	S19	2.937(3)	S19	3.139(3)	S18	3.006(4)
S19	2.973(3)	S20	2.834(3)	S20	2.887(2)	S21	2.923(3)
S21	3.119(4)	S20	3.022(3)	S21	2.785(2)	S22	2.749(3)
S31	2.635(3)	S26	3.392(3)	S32	2.594(3)	S33	2.596(4)
<i>Me17—</i>		<i>Me18—</i>		<i>Me19—</i>		<i>Me20—</i>	
S14	2.956(4)	S17	3.405(3)	S25	3.002(3)	S2	3.440(3)
S23	2.831(2)	S24	3.092(3)	S26	2.738(2)	S23	2.672(3)
S24	2.875(2)	S25	2.878(3)	S30	2.592(3)	S27	2.699(2)
S28	2.645(3)	S29	2.705(3)	S32	3.580(4)	S28	3.101(3)
		S34	3.911(4)	S34	3.547(5)		
<i>Me21—</i>		<i>Me22—</i>		<i>Me23—</i>		<i>Me24—</i>	
S4	3.155(4)	S7	3.296(3)	S11	2.921(3)	S1	3.025(2)
S24	2.639(3)	S11	3.033(4)	S19	3.089(3)	S3	3.328(4)
S28	2.882(2)	S25	3.228(4)	S26	3.130(3)	S10	3.105(3)
S29	2.808(2)	S29	3.154(3)	S30	3.099(2)	S23	3.169(3)
		S30	2.872(2)	S31	2.890(3)	S27	3.155(4)

Таблица 5 (окончание)

Me25a—		Me25b—		Me26—		Cu1—		
S15	3.280(4)	×2	S11	3.774(6)	S16	3.257(5)	S18	3.085(3)
S18	2.791(6)		S15	3.154(4)	×2	3.412(4)	S22	2.379(4)
S22	2.734(3)	×2	S18	2.982(5)		3.107(3)		×2
S31	3.187(4)	×2	S22	3.057(3)	×2	2.921(3)		×2
			S31	2.924(3)	×2	3.211(3)		×2
Cu2—		Cu3—		Cu4—		Cu5—		
S1	2.360(2)	×2	S17	2.942(4)	S20	2.610(4)	S21	2.363(6)
S27	2.480(4)		S25	2.309(4)	S26	2.276(4)	S22	2.318(6)
S27	2.274(4)		S34	2.302(2)	×2	2.339(2)	×2	2.454(3)

Таблица 6. Параметры полиэдров катионов в кристаллической структуре нейта

Table 6. Polyhedron characteristics for cations of crystal structure of neyite

Позиция	Заселенность	КЧ	$R_{CS}$	$V_{CS}$	$E_{ссy}$	$Sph_{y}$	$V_{poly}$	$q_x/Q_x$	СВС
Me1	$Bi_{1,00}$		2.85	96.98	0.26	1.00	30.69	0.96	2.94
	$Bi_{0,87}Pb_{0,13}$	6	2.86	97.62	0.25	1.00	30.91	0.94	2.87
	<b><math>Bi_{0,87}Pb_{0,13}</math></b>		<b>2.84</b>	<b>95.54</b>	<b>0.25</b>	<b>1.00</b>	<b>30.25</b>	<b>0.94</b>	<b>3.04</b>
Me2	$Bi_{1,00}$		2.87	98.68	0.25	1.00	31.40	0.99	2.72
	$Bi_{0,76}Pb_{0,24}$	6	2.87	98.82	0.24	0.99	31.44	0.96	2.70
	<b><math>Bi_{0,76}Pb_{0,24}</math></b>		<b>2.87</b>	<b>99.01</b>	<b>0.26</b>	<b>0.98</b>	<b>31.50</b>	<b>0.95</b>	<b>2.73</b>
Me3	$Pb_{0,839(6)}As_{0,161(6)}$		2.96	108.66	0.11	0.94	34.38	0.99	1.83
	$Pb_{1,00}$	6	2.98	110.53	0.12	0.95	34.98	1.02	1.95
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>2.97</b>	<b>109.27</b>	<b>0.11</b>	<b>0.96</b>	<b>34.55</b>	<b>1.01</b>	<b>2.01</b>
Me4	$Pb_{0,60}Bi_{0,40}$		2.92	104.29	0.24	0.98	32.90	0.98	2.41
	$Pb_{0,60}Bi_{0,40}$	6	2.93	104.97	0.23	0.98	33.12	1.00	2.35
	<b><math>Pb_{0,60}Bi_{0,40}</math></b>		<b>2.92</b>	<b>104.59</b>	<b>0.23</b>	<b>0.98</b>	<b>32.99</b>	<b>1.01</b>	<b>2.38</b>

Таблица 6 (продолжение)

Позиция	Заселенность	КЧ	$R_{CS}$	$V_{CS}$	$E_{сс\gamma}$	$Sph_{\gamma}$	$V_{pob\gamma}$	$q_X/Q_X$	СВС
Me5	$Bi_{0,82}Pb_{0,18}$		2.87	98.67	0.15	1.00	31.39	0.99	2.59
	$Bi_{0,62}Pb_{0,38}$	6	2.89	100.72	0.15	1.00	32.05	0.97	2.46
	<b><math>Bi_{0,62}Pb_{0,38}</math></b>		<b>2.88</b>	<b>100.31</b>	<b>0.15</b>	<b>0.99</b>	<b>31.88</b>	<b>0.98</b>	<b>2.49</b>
Me6	$Pb_{0,57}Bi_{0,25}Ag_{0,18}$		2.91	102.95	0.03	0.96	32.73	1.00	2.02
	$Pb_{0,58}Bi_{0,32}Ag_{0,10}$	6	2.92	104.11	0.03	0.98	33.11	1.02	2.08
	<b><math>Pb_{0,58}Bi_{0,32}Ag_{0,10}</math></b>		<b>2.91</b>	<b>103.59</b>	<b>0.03</b>	<b>0.98</b>	<b>32.94</b>	<b>1.01</b>	<b>2.10</b>
Me7	$Pb_{0,50}Bi_{0,36}Ag_{0,14}$		2.90	101.78	0.09	0.99	32.32	0.95	2.14
	$Pb_{0,56}Bi_{0,44}$	6	2.91	103.68	0.10	0.99	32.92	1.00	2.25
	<b><math>Pb_{0,56}Bi_{0,44}</math></b>		<b>2.91</b>	<b>102.70</b>	<b>0.10</b>	<b>0.99</b>	<b>32.60</b>	<b>1.00</b>	<b>2.30</b>
Me8	$Bi_{1,00}$		2.82	94.35	0.22	1.00	30.01	0.99	3.00
	$Bi_{1,00}$	6	2.83	95.36	0.22	1.00	30.32	0.99	2.93
	<b><math>Bi_{1,00}</math></b>		<b>2.83</b>	<b>94.42</b>	<b>0.22</b>	<b>0.99</b>	<b>30.02</b>	<b>0.99</b>	<b>2.99</b>
Me9	$Pb_{0,76}Bi_{0,08}Ag_{0,16}$		2.93	105.30	0.07	0.96	33.39	1.01	1.96
	$Pb_{0,69}Bi_{0,27}Ag_{0,10}$	6	2.93	105.81	0.06	0.96	33.59	1.03	2.01
	<b><math>Pb_{0,69}Bi_{0,21}</math></b>		<b>2.94</b>	<b>106.15</b>	<b>0.09</b>	<b>0.96</b>	<b>33.63</b>	<b>1.01</b>	<b>1.94</b>
Me10	$Bi_{0,60}Pb_{0,40}$		2.88	99.71	0.18	0.97	31.72	0.94	2.55
	$Bi_{0,67}Pb_{0,33}$	6	2.88	100.13	0.23	0.96	31.85	0.97	2.58
	<b><math>Bi_{0,67}Pb_{0,33}</math></b>		<b>2.88</b>	<b>100.14</b>	<b>0.22</b>	<b>0.94</b>	<b>31.84</b>	<b>0.98</b>	<b>2.58</b>
Me11	$Bi_{0,849(6)}Ag_{0,151(6)}$		2.84	96.40	0.27	0.98	30.52	1.01	2.70
	$Bi_{0,74}Pb_{0,06}Ag_{0,20}$	6	2.85	97.01	0.24	0.96	30.70	1.01	2.51
	<b><math>Bi_{0,74}Pb_{0,06}Ag_{0,20}</math></b>		<b>2.86</b>	<b>97.48</b>	<b>0.28</b>	<b>0.99</b>	<b>30.79</b>	<b>0.97</b>	<b>2.55</b>
Me12	$Bi_{1,00}$		2.85	97.02	0.25	0.99	30.66	0.95	2.93
	$Bi_{0,90}Pb_{0,10}$	6	2.85	97.18	0.24	0.99	30.76	0.94	2.90
	<b><math>Bi_{0,90}Pb_{0,10}</math></b>		<b>2.84</b>	<b>96.40</b>	<b>0.26</b>	<b>0.99</b>	<b>30.44</b>	<b>0.93</b>	<b>3.00</b>

Таблица 6 (продолжение)

Позиция	Заселенность	КЧ	$R_{CS}$	$V_{CS}$	$E_{ссy}$	$Sph_V$	$V_{poly}$	$q_X/Q_X$	СВС
Me13	$Bi_{1,00}$		2.88	99.49	0.28	0.99	31.23	0.97	2.84
	$Bi_{0,73}Pb_{0,27}$	6	2.89	100.65	0.30	0.99	31.55	0.93	2.81
	<b><math>Bi_{0,73}Pb_{0,27}</math></b>		<b>2.86</b>	<b>98.39</b>	<b>0.27</b>	<b>1.00</b>	<b>30.89</b>	<b>0.94</b>	<b>2.90</b>
Me14	$Pb_{1,00}$		3.08	122.89	0.31	0.95	41.12	1.00	1.93
	$Pb_{1,00}$	7	3.09	123.35	0.30	0.95	41.16	0.98	1.89
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.07</b>	<b>121.46</b>	<b>0.30</b>	<b>0.95</b>	<b>40.64</b>	<b>0.99</b>	<b>1.97</b>
Me15	$Bi_{1,00}$		2.85	97.24	0.27	0.99	30.50	0.99	2.96
	$Bi_{0,97}Pb_{0,03}$	6	2.85	97.28	0.27	0.99	30.44	0.98	2.97
	<b><math>Bi_{0,97}Pb_{0,03}</math></b>		<b>2.84</b>	<b>95.87</b>	<b>0.26</b>	<b>1.00</b>	<b>30.06</b>	<b>0.99</b>	<b>3.07</b>
Me16	$Bi_{0,55}$		2.82	94.30	0.24	0.97	29.82	1.02	1.69
	$Bi_{0,62}Pb_{0,34}Ag_{0,14}$	6	2.88	99.50	0.23	0.99	31.49	1.00	2.40
	<b><math>Bi_{0,62}Pb_{0,24}Ag_{0,14}</math></b>		<b>2.83</b>	<b>95.31</b>	<b>0.20</b>	<b>0.97</b>	<b>30.16</b>	<b>1.00</b>	<b>2.62</b>
Me17	$Bi_{0,892(7)}Cd_{0,108(7)}$		2.84	96.27	0.15	0.96	30.10	1.03	2.71
	$Bi_{0,94}Pb_{0,06}$	6	2.86	98.00	0.17	0.97	30.56	1.08	2.77
	<b><math>Bi_{0,94}Pb_{0,06}</math></b>		<b>2.85</b>	<b>97.36</b>	<b>0.17</b>	<b>0.97</b>	<b>30.28</b>	<b>1.09</b>	<b>2.85</b>
Me18	$Pb_{1,00}$		3.16	131.93	0.43	0.82	54.59	1.02	2.17
	$Pb_{1,00}$	8	3.17	133.15	0.43	0.82	55.09	1.03	2.12
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.16</b>	<b>132.42</b>	<b>0.44</b>	<b>0.81</b>	<b>54.69</b>	<b>1.03</b>	<b>2.18</b>
Me19	$Bi_{1,00}$		3.02	115.07	0.48	0.90	38.83	1.05	2.82
	$Bi_{1,00}$	7	3.03	116.09	0.47	0.90	39.19	1.06	2.72
	<b><math>Bi_{1,00}</math></b>		<b>3.02</b>	<b>114.89</b>	<b>0.48</b>	<b>0.90</b>	<b>38.75</b>	<b>1.06</b>	<b>2.84</b>
Me20	$Bi_{0,50}Pb_{0,50}$		3.04	117.16	0.45	0.94	38.48	1.02	2.69
	$Bi_{1,00}$	7	3.05	118.29	0.44	0.94	38.79	1.12	2.62
	<b><math>Bi_{1,00}</math></b>		<b>3.02</b>	<b>115.80</b>	<b>0.45</b>	<b>0.94</b>	<b>37.93</b>	<b>1.11</b>	<b>2.77</b>

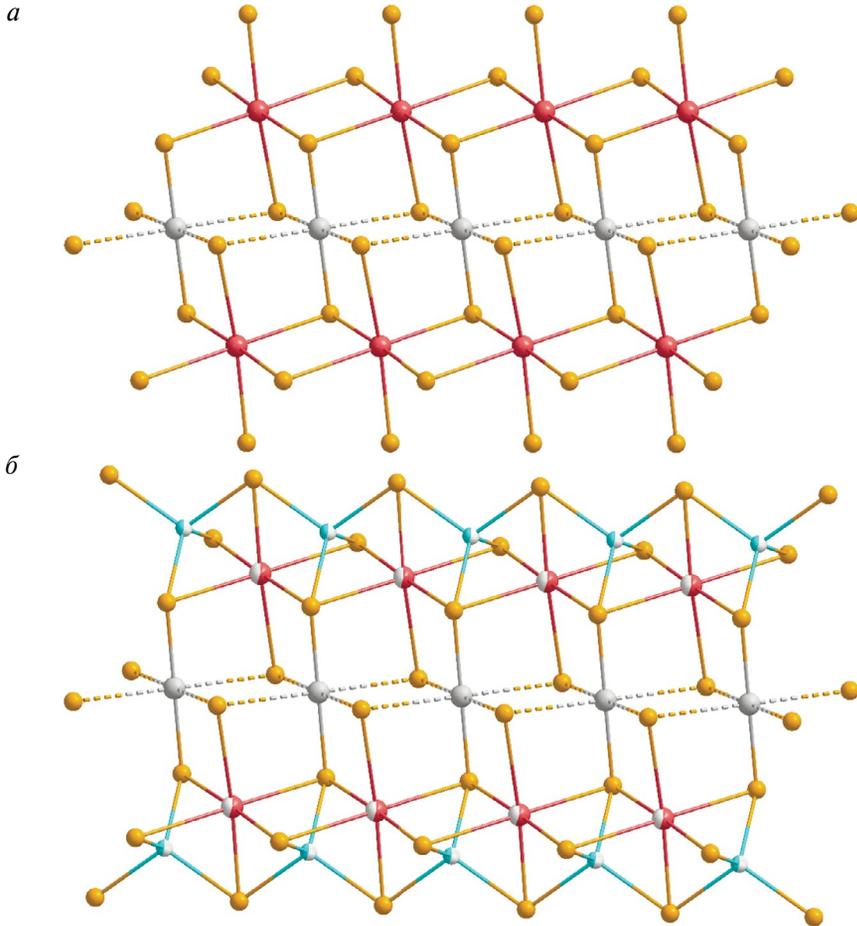
Таблица 6 (продолжение)

Позиция	Заселенность	КЧ	$R_{CS}$	$V_{CS}$	$E_{ссу}$	$S_{phy}$	$V_{pob}$	$q_X/Q_X$	СВС
Me21	$Bi_{1,00}$		2.88	100.29	0.25	0.99	29.92	1.04	2.79
	$Bi_{1,00}$	6	2.90	101.68	0.24	1.00	30.27	1.06	2.69
	<b><math>Bi_{1,00}</math></b>		<b>2.88</b>	<b>99.90</b>	<b>0.26</b>	<b>1.00</b>	<b>29.73</b>	<b>1.06</b>	<b>2.85</b>
Me22	$Pb_{1,00}$		3.11	126.52	0.21	0.91	53.04	1.02	1.93
	$Pb_{1,00}$	8	3.12	127.33	0.16	0.90	53.35	1.02	1.85
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.11</b>	<b>126.40</b>	<b>0.18</b>	<b>0.91</b>	<b>52.99</b>	<b>1.03</b>	<b>1.90</b>
Me23	$Pb_{1,00}$		3.02	115.31	0.15	0.97	38.68	1.02	2.06
	$Pb_{1,00}$	7	3.02	115.20	0.12	0.97	38.73	1.02	2.05
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.01</b>	<b>114.29</b>	<b>0.12</b>	<b>0.97</b>	<b>38.42</b>	<b>1.01</b>	<b>2.10</b>
Me24	$Pb_{1,00}$		3.14	129.34	0.04	0.91	54.05	0.99	1.69
	$Pb_{1,00}$	8	3.14	129.77	0.05	0.91	54.20	1.02	1.68
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.14</b>	<b>129.01</b>	<b>0.06</b>	<b>0.90</b>	<b>53.85</b>	<b>1.02</b>	<b>1.72</b>
Me25a	$Pb_{0,315}Bi_{0,135}$		3.04	117.59	0.38	0.97	38.96	1.00	1.07
	—	7	—	—	—	—	—	—	—
	—		—	—	—	—	—	—	—
Me25b	$Pb_{0,55}$		3.12	127.55	0.26	0.79	52.66	1.00	1.09
	$Pb_{1,00}$	8	3.12	127.54	0.26	0.81	52.78	0.99	1.93
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.13</b>	<b>128.41</b>	<b>0.31</b>	<b>0.80</b>	<b>52.92</b>	<b>0.98</b>	<b>1.97</b>
Me26	$Pb_{1,00}$		3.14	130.08	0.07	0.85	54.36	0.99	1.76
	$Pb_{1,00}$	8	3.15	131.12	0.13	0.84	54.78	0.98	1.80
	<b><math>Pb_{1,00}</math></b>		<b>3.13</b>	<b>128.34</b>	<b>0.09</b>	<b>0.84</b>	<b>53.58</b>	<b>0.97</b>	<b>1.87</b>
Cu1	$Ag_{0,75(3)}Cu_{0,25(3)}$		2.85	96.92	0.00	0.62	29.55	1.02	1.19
	$Ag_{1,00}$	6	2.90	101.89	0.00	0.61	30.79	1.01	1.25
	<b><math>Cu_{1,00}</math></b>		<b>2.83</b>	<b>95.02</b>	<b>0.00</b>	<b>0.51</b>	<b>28.47</b>	<b>1.02</b>	<b>0.74</b>

Таблица 6 (окончание)

Позиция	Заселенность	КЧ	$R_{CS}$	$V_{CS}$	$E_{CV}$	$Sph_V$	$V_{poly}$	$q_X/Q_X$	СВС
Cu2	Cu <sub>1,00</sub>		2.35	54.63	0.16	1.00	6.46	0.98	0.90
	Cu <sub>1,00</sub>	4	2.36	55.33	0.16	1.00	6.53	1.03	0.88
	<b>Cu<sub>1,00</sub></b>		<b>2.35</b>	<b>54.65</b>	<b>0.17</b>	<b>1.00</b>	<b>6.48</b>	<b>1.03</b>	<b>0.90</b>
Cu3	Cu <sub>1,00</sub>		2.42	59.00	0.52	1.00	7.19	0.97	0.84
	Cu <sub>1,00</sub>	4	2.42	59.56	0.54	1.00	7.26	0.96	0.82
	<b>Cu<sub>1,00</sub></b>		<b>2.41</b>	<b>58.90</b>	<b>0.51</b>	<b>1.00</b>	<b>7.17</b>	<b>0.96</b>	<b>0.83</b>
Cu4	Cu <sub>1,00</sub>		2.38	56.26	0.27	1.00	6.85	1.00	0.88
	Cu <sub>1,00</sub>	4	2.38	56.67	0.33	1.00	6.90	0.99	0.88
	<b>Cu<sub>1,00</sub></b>		<b>2.37</b>	<b>55.78</b>	<b>0.27</b>	<b>1.00</b>	<b>6.79</b>	<b>0.99</b>	<b>0.89</b>
Cu5	Cu <sub>0,45</sub>		2.40	57.66	0.13	1.00	6.96	1.03	0.37
	—	4	—	—	—	—	—	—	—
	—	—	—	—	—	—	—	—	—

Примечание. Обычный шрифт — нейит из Юго-Коневского месторождения, наши данные; курсив — нейит из месторождения Лайм Крик, Канада (Makovicky et al., 2001); жирный шрифт — купронейит (Pillsa et al., 2012). Обозначения: КЧ — координационное число;  $R_{CS}$  — радиус описанной сферы;  $V_{CS}$  — объем описанной сферы;  $E_{CV}$  — объемный эксцентриситет;  $Sph_V$  — объемная сферичность распределения лигандов;  $V_{poly}$  — объем полиэдра;  $q_X/Q_X$  — отношение формального заряда к рассчитанному методом CD; СВС — взвешенная сумма валентностей связей, рассчитанная с учетом общей заселенности позиции.



**Рис. 8.** Фрагменты кристаллических структур (а) нейита из месторождения Лайм Крик, Канада (Makovicky et al., 2001) и (б) нейита из Юго-Коневого месторождения, наши данные. Легенда: красный –  $\text{Bi}^{3+}$ ; серый –  $\text{Ag}^+$ ; бирюзовый –  $\text{Cu}^+$ ; оранжевый –  $\text{S}^{2-}$ . Детали поясняются в тексте.

**Fig. 8.** Fragments of crystal structures of (a) neyite from Lime Creek deposit, Canada (Makovicky et al., 2001) and (b) neyite from Yugo-Konevo deposit, our data. Legend: red –  $\text{Bi}^{3+}$ ; gray –  $\text{Ag}^+$ ; cyan –  $\text{Cu}^+$ ; orange –  $\text{S}^{2-}$ . See details in the text.

Главным отличием между настоящей структурной моделью и структурами нейита и купронейита, опубликованными ранее, является наличие разупорядочения во второй координационной сфере позиции  $\text{Ag}1$ , расположенной на  $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$ . В ранее опубликованных структурах сжатые октаэдры  $\text{Ag}1\text{S}_6$  в направлении  $[10^{-1}]$  делят общие ребра с октаэдрами  $\text{Me}16\text{S}_6$ , заселенность позиции  $\text{Me}16$  которых составляет  $\text{Bi}_{0.62}\text{Pb}_{0.24}\text{Ag}_{0.14}$ . Соединение данных октаэдров образует ленты вдоль  $b$ , где центральная часть ленты представлена цепью  $\text{Ag}^+$ -центрированных октаэдров, а крайние части являются цепями октаэдров  $\text{Me}16\text{S}_6$  (рис. 8, а). Однако в нашей модели позиция  $\text{Me}16$  имеет фактор заселенности 0.55 и представлена исключительно катионами  $\text{Bi}^{3+}$ , а между соседними октаэдрами расположена дополнительная позиция  $\text{Cu}5$  с фактором заселенности 0.45 ( $\text{Me}16\text{--Cu}5 = 2.366(3) \text{ \AA}$ ). Позиция  $\text{Cu}5$  тетраэдрически координирована анионами  $\text{S}^{2-}$ , и образованные тетраэдры «внедряются» между

октаэдрами  $\text{Bi16S}_6$ , присоединяясь через общие грани (рис. 8, б). По всей видимости, такое разупорядочение приводит к расщеплению позиции  $\text{Me25}$ . В структурах нейита и купронеита позиция  $\text{Me25}$  находится в координации двушапочной тригональной призмы, присоединенной через общие ребра к октаэдрам  $\text{Ag1S}_6$  и  $\text{Me16S}_6$  сверху и снизу образованных лент. В нашей модели данная позиция расщеплена на  $\text{Me25a}$  и  $\text{Me25b}$  с факторами заселенности 0.45 и 0.55, соответственно. При этом позиция  $\text{Me25a}$  находится в координации одношапочной тригональной призмы, в то время как позиция  $\text{Me25b}$  сохраняет координацию двушапочной тригональной призмы. Учитывая описанное распределение позиций и их заселенностей, можно предложить две схемы упорядочения: (i) атомы  $\text{Bi}^{3+}$  и  $\text{Cu}^+$  распределены вдоль ленты случайным образом и (ii) цепочки  $\text{CuS}_3$  вершинно-связанных тетраэдров чередуются с цепочками  $\text{BiS}_6$  реберно-связанных октаэдров. Первая схема упорядочения приводит к наличию сильного пересыщения анионов  $\text{S}^{2-}$  (вплоть до 2.7 в. е. для S33), являющихся общими для тетраэдров  $\text{CuS}_4$  и октаэдров  $\text{BiS}_6$ . В свою очередь, вторая схема демонстрирует приемлемые значения сумм валентностей связей (СВС) как анионов, так и катионов. Единственное выбивающееся значение сумм валентностей 2.54 в. е. наблюдается у аниона S33 при расчете для цепочек  $\text{Bi}^{3+}$ -центрированных октаэдров. Однако, учитывая что валентное пересыщение данной позиции наблюдается и в структурах нейита и купронеита (2.43 и 2.44 в. е., соответственно), а также тот факт, что для цепочек  $\text{Cu}^+$ -центрированных октаэдров СВС равно 2.01 в. е., такое пересыщение можно принимать как статистически приемлемое.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают глубокую признательность И. В. Пекову и С. В. Кривовичеву за рецензирование текста статьи и высказанные при этом ценные замечания, а М. Д. Мильшиной — за фотографии нейита и помощь в оформлении иллюстраций.

Исследование структуры нейита выполнено в центре рентгенодифракционных методов исследования Научного парка СПбГУ в рамках проекта 118201839.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Бонштедт-Куплетская Э.М.* К минералогии Карасьевского и Юго-Коневского вольфрамовых месторождений на Среднем Урале // ДАН СССР. **1943**. Т. 40. № 9. С. 412—415.
- Золов К.К., Левин В.Я., Мормиль С.И., Шардакова Г.Ю.* Минерагения и месторождения редких металлов, молибдена, вольфрама Урала. Екатеринбург: Министерство природных ресурсов РФ, ГУПР по Свердловской обл., Институт геологии и геохимии им. А.Н. Заварицкого УрО РАН, ОАО УГСЭ, **2004**. 336 с.
- Коровко А.В., Двоеглазов Д.А., Кузовков Г.Н., Смирнов В.Н., Пуртов В.А., Бурнатная Л.Н., Герасименко Б.Н., Глазырина Н.С., Сидорова М.Н., Ведерников В.В.* (2015) Государственная геологическая карта Российской Федерации. Масштаб 1: 200000. Издание второе. Серия Среднеуральская. Лист О-41-XXXII. Объяснительная записка. М.: МФ ВСЕГЕИ, **2015**. 274 с.
- Колодкин С.П.* (1936) Месторождение вольфрамовых руд «3-й год пятилетки» // Доклады Разведка недр. **1936**. Вып. 8. С. 9—13.
- Рогов Д.А., Белогуб Е.В., Новоселов К.А., Рассомахин М.А., Ирмаков Р.Р., Чугаев А.Е.* Минеральные формы вольфрама на Пороховском и Юго-Коневском месторождениях (Южный Урал) // Минералогия. **2023**. Т. 9. № 2. С. 41—59.
- Касаткин А.В., Белогуб Е.В., Кузнецов А.М., Новоселов К.А., Шкода Р., Нестола Ф., Рогов Д.А.* Висмутовые минералы Юго-Коневского и Пороховского месторождений вольфрама (Южный Урал) // Минералогия. **2023**. Т. 9. № 3. С. 26—49.

## Neyite from the Yugo-Konevo Deposit (Southern Urals, Russia) and Its Crystal Structure

I. V. Korniyakov<sup>a, \*</sup>, A. V. Kasatkin<sup>b</sup>, V. V. Gurzhiy<sup>a</sup>, R. Škoda<sup>c</sup>, and A. M. Kuznetsov<sup>d</sup><sup>a</sup>Institute of Earth Sciences, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia<sup>b</sup>Fersman Mineralogical Museum RAS, Moscow, Russia<sup>c</sup>Department of Geological Sciences, Masaryk University, Brno, Czech Republic<sup>d</sup>Oktjabrskaya, 5—337, Chelyabinsk, 454071 Russia

\*e-mail: ikorniyakov@mail.ru

Neyite  $\text{Ag}_2\text{Cu}_6\text{Pb}_{25}\text{Bi}_{26}\text{S}_{68}$  was identified in the dumps of Yugo-Konevo tungsten deposit (Chelyabinsk oblast, Southern Urals) for a first time in Russia. This rare sulfosalt forms prismatic crystals up to 3 x 0.5 mm in fluorite-muscovite-quartz veins and is associated with aikinite, tetradymite and pyrite. Reflectance spectra and values of neyite are published for the first time. The chemical composition of neyite is (wt. %, electron microprobe, mean of 7 analyses): Ag 1.75, Cu 3.59, Pb 35.01, Cd 0.12, Bi 42.59, S16.54, total 99.60. The empirical formula calculated based on S = 68 atoms per formula unit is  $\text{Ag}_{2.14}\text{Cu}_{7.45}\text{Pb}_{22.27}\text{Cd}_0.14\text{Bi}_{26.86}\text{S}_{68}$ . The crystal structure of neyite from Yugo-Konevo was refined on the single crystal,  $R_1 = 3.43\%$ ,  $wR_2 = 7.22\%$ . The mineral is monoclinic, space group  $C2/m$ ,  $a = 37.3900(6)$  Å,  $b = 4.05500(10)$ ,  $c = 43.5821(7)$  Å,  $\beta = 108.740(2)^\circ$ ,  $V = 6257.5(2)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ . The structure of neyite is based upon three different modules of archetypal PbS structure:  $(111)_{\text{PbS}}$  slabs of octahedra extended along  $b$  alternate with  $(100)_{\text{PbS}}$  slabs in  $a$  direction. Resulting layers are alternated with  $(922)_{\text{PbS}}$  layers along  $c$ . The main structural feature of neyite from Yugo-Konevo deposit that distinguishes it from previously published data on neyite from type locality and cuproneyite is the disorder of  $Me16$  site and the presence of the additional Cu5 site. These features, combined with the bond valence sums analysis, suggest the presence of chains of  $\text{CuS}_4$  tetrahedra alternating with chains of  $\text{BiS}_6$  octahedra.

**Keywords:** neyite, optical data, chemical composition, crystal structure, Yugo-Konevo tungsten deposits, Southern Urals, first find in Russia

## REFERENCES

- Anthony J.W., Bideaux R.A., Bladh K.W., Nichols M.C. Handbook of mineralogy. Vol. 1. Elements, sulfides, sulfosalts. Tucson, Arizona: Mineral data publishing, **1990**. 588 p.
- Balić-Žunić T., Makovicky E. Determination of the Centroid or 'the Best Centre' of a Coordination Polyhedron. *Acta Crystallogr.* **1996**. Vol. B52. P. 78—81.
- Bernard J.H., Hyršl J. Minerals and their localities. Third updated edition. Granit, s. r.o, **2015**. 912 p.
- Bonstedt-Kupletskaya E.M. On the mineralogy of the Karas'evskoe and Yugo-Konevskoe tungsten deposits in the Middle Urals. *Doklady USSR Acad. Sci.* **1943**. Vol. 40. N 9. P. 412—415 (in Russian).
- Brese N.E., O'Keeffe M. Bond-valence parameters for solids. *Acta Crystallogr.* **1991**. Vol. B47. P. 192—197.
- Brown I.D. Modern Bond Valence Theory. In: *Comprehensive Coordination Chemistry III*. United States: Elsevier, **2021**. P. 276—306.
- Brown I.D., Altermatt D. Bond-valence parameters obtained from a systematic analysis of the inorganic crystal structure database. *Acta Crystallogr.* **1985**. Vol. B41. P. 244—247.
- Castor S.B., Ferdock G.C. Minerals of Nevada. Nevada Bureau of Mines and Geology. Special Publication 31 in association with University of Nevada Press, **2004**. 512 p.
- Ciobanu C.L., Cook N.J., Maunders C., Wade B.P., Ehrig K. Focused Ion Beam and Advanced Electron Microscopy for Minerals: Insights and Outlook from Bismuth Sulphosalts. *Minerals*, **2016**. Vol. 6(4). Paper 112.
- Criddle A.J., Stanley C.J. Quantitative data files for ore minerals. Third edition. Springer-science+Business media, **1993**. 635 p.
- CrysAlisPro Software System, version 11.171.41.93a (**2023**). Rigaku Oxford Diffraction: Oxford, UK.
- Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., Howard J.A.K., Puschmann H. OLEX2: A complete structure solution, refinement and analysis program. *J. Appl. Cryst.* **2009**. Vol. 42. P. 339—341.

- Drummond A.D., Trotter J., Thompson R.M., Gower J.A.* Neyite, a new sulphosalt from Alice Arm, British Columbia. *Canad. Miner.* **1969**. Vol. 10. P. 90—96.
- Eckel E.B.* Minerals of Colorado. Updated and revised by R.R. Cobban, D.S. Collins, E.E. Foord, D.E. Kile, P.J. Modreski and J.A. Murphy. Fulcrum Publishing, **1997**. 665 p.
- Eon J.-G., Nespolo M.* Charge distribution as a tool to investigate structural details. III. Extension to description in terms of anion-centred polyhedra. *Acta Crystallogr.* **2015**. Vol. B71. P. 34—47.
- Gaspar O., Bowles J.F.W., Shepherd T.J.* Silver mineralization at the Vale Gatas tungsten mine, Portugal. *Miner. Mag.* **1987**. Vol. 51. P. 305—310.
- Hoppe R.* Effective coordination numbers (ECoN) and mean fictive ionic radii (MEFIR). *Z. Kristallogr.* **1979**. Vol. 150. P. 23—52.
- Ilinca G.* Charge Distribution and Bond Valence Sum Analysis of Sulfosalts — The ECoN21 Computer Program. *Minerals*. **2022**. Vol. 12. Paper 924.
- Ilinca G., Makovicky E., Topa D., Zagler G.* Cuproneite,  $\text{Cu}_7\text{Pb}_{27}\text{Bi}_{25}\text{S}_{68}$ , a new mineral species from Băița Bihor, Romania. *Canad. Miner.* **2012**. Vol. 50. P. 353—370.
- Karup-Møller S., Makovicky E.* Mummeite — A new member of the pavonite homologous series from Alaska mine, Colorado. *N. Jb. Miner. Mh.* **1992**. P. 555—576.
- Kasatkin A.V., Belogub E.V., Kuznetsov A.M., Novoselov K.A., Škoda R., Nestola F., Rogov D.A.* Bismuth minerals from Yugo-Konevo and Porokhovskoe tungsten deposits (South Urals). *Mineralogy*. **2023**. Vol. 9. N 3. P. 26—49 (in Russian).
- Kolodkin S.P.* Tungsten ore deposit “3rd year of the five-year plan”. *Mineral exploration*. **1936**. Vol. 8. P. 9—13 (in Russian).
- Korovko A.V., Dvoeglazov D.A., Kuzovkov G.N., Smirnov V.N., Purtov V.A., Burnatnaya L.N., Gerasimenko B.N., Glazyrina N.S., Sidorova M.N., Vedernikov V.V.* State Geological Map of the Russian Federation. Scale 1: 200000. Second edition. Series Sredneuralskaya. Sheet O-41-XXXII. Explanatory letter. Moscow, MF VSEGEI, **2015**. 274 p. (in Russian).
- Makovicky E., Balić-Žunić T.* New measure of distortion for coordination polyhedra. *Acta Crystallogr.* **1998**. Vol. B 54. P. 766—773.
- Makovicky E., Balić-Žunić T., Topa D.* The crystal structure of neyite,  $\text{Ag}_2\text{Cu}_6\text{Pb}_{25}\text{Bi}_{26}\text{S}_{68}$ . *Canad. Miner.* **2001**. Vol. 39. P. 1365—1376.
- Makovicky E., Makovicky M.* Representation of compositions in the bismuthinite — aikinite series. *Canad. Miner.* **1978**. Vol. 16. P. 405—409.
- Nespolo M.* Charge distribution as a tool to investigate structural details. IV. A new route to heteroligand polyhedra. *Acta Crystallogr.* **2016**. Vol. 72. P. 51—66.
- Nespolo M., Ferraris G., Ohashi H.* Charge distribution as a tool to investigate structural details: Meaning and application to pyroxenes. *Acta Crystallogr.* **1999**. Vol. 55. P. 902—916.
- Nespolo M., Ferraris G., Ivaldi G., Hoppe R.* Charge distribution as a tool to investigate structural details. II. Extension to hydrogen bonds, distorted and hetero-ligand polyhedra. *Acta Crystallogr.* **2001**. Vol. B57. P. 652—664.
- Palenik G.J.* A critical evaluation of homo- and hetero-leptic cadmium complexes using bond valence sums. *Can. J. Chem.* **2006**. Vol. 84. P. 99—104.
- Rogov D.A., Belogub E.V., Novoselov K.A., Rassomakhin M.A., Irmakov R.R., Chugaev A.E.* Mineral forms of tungsten at the Porokhovskoe and Yugo-Konevskoe deposits (South Urals). *Mineralogy*. **2023**. Vol. 9. N 2. P. 41—59 (in Russian).
- Sheldrick G.M.* SHELXT — Integrated space-group and crystal structure determination. *Acta Crystallogr.* **2015a**. Vol. A71. P. 3—8.
- Sheldrick G.M.* Crystal structure refinement with SHELXL. *Acta Crystallogr.* **2015b**. Vol. C71. P. 3—8.
- Shields G.P., Raithby P.R., Allen F.H., Motherwell W.D.S.* The assignment and validation of metal oxidation states in the Cambridge Structural Database. *Acta Crystallogr.* **2000**. Vol. B56. P. 455—465.
- Topa D., Makovicky E.* The crystal chemistry of cosalite based on new electron-microprobe data and single-crystal determinations of the structure. *Canad. Miner.* **2010**. Vol. 48. P. 1081—1107.
- Trömmel M.* Abstandskorrelationen bei der Tellur(IV)-Sauerstoff- und bei der Antimon(III)-Sauerstoff-Koordination. *Z. Kristallogr.* **1981**. Vol. 154. P. 338—339.
- Yokoro Y., Nakashima K.* Ag-Cu-Pb-Bi-S Minerals Newly Discovered from the Ohori Base Metal Deposit, Yamagata Prefecture, NE Japan: Implications for Bi-metallogenesis in the Green-Tuff Region. *Resource Geology*. **2008**. Vol. 60. P. 1—17.
- Zolov K.K., Levin V. Ya., Mormil S.I., Schardakova G. Yu.* Minerageny and deposits of rare metals, molybdenum, tungsten of the Urals. Yekaterinburg, OAO UGSE, **2004**. 336 p. (in Russian).