

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ К СТАТЬЕ

**СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ
ГИДРАТИРОВАННЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ ГРУППЫ ЛАБУНЦОВИТА:
УТОЧНЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР ПРОМЕЖУТОЧНЫХ
ЧЛЕНОВ ТВЕРДОГО РАСТВОРА ЦЕПИНИТ-Na–«ЦЕПИНИТ-Ba»–ЦЕПИНИТ-K**

**Ю.А. Вайтиева¹, Н.В. Чуканов², М.Ф. Вигасина³, Д.А. Варламов⁴,
С.Н. Волков¹, Р.К. Расцветаева⁵, С.М. Аксенов^{1,5,6}**

¹Лаборатория арктической минералогии и материаловедения, ФИЦ Кольский научный центр РАН, Апатиты, Россия

²ФИЦ Проблем физической химии и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия

³Московский государственный университет, Москва, Россия

⁴Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, Россия

⁵НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия

⁶Геологический институт, ФИЦ Кольский научный центр РАН, Апатиты, Россия

E-mail: aks.crys@gmail.com

Таблица S1. Координаты, кратность (Q), эквивалентные параметры смещений ($U_{\text{экв}}$, Å²) и состав позиций в кристаллической структуре образца 1

Позиция	x/a	y/b	z/c	Q	$U_{\text{экв}}$	Состав
M1	0.5	0.7661(4)	0	4	0.0256(2)	Ti _{0.6} Nb _{0.4}
M2	0.75	0.75	0	4	0.0287(3)	Ti _{0.55} Nb _{0.45}
Si1	0.6845(1)	0.6100(1)	0.2600(1)	8	0.0115(2)	Si
Si2	0.7029(1)	0.8898(1)	0.2943(1)	8	0.0115(2)	Si
O1	0.7406(1)	0.8692(2)	0.5179(2)	8	0.0260(7)	O
O2	0.7713(1)	0.8290(1)	0.2202(2)	8	0.0189(6)	O
O3	0.5794(1)	0.6692(1)	0.1900(3)	8	0.0192(6)	O
O4	0.7215(2)	1	0.2687(4)	4	0.0259(9)	O
O5	0.7545(1)	0.8632(1)	-0.1392(3)	8	0.0195(6)	O
O6	0.5815(1)	0.8649(1)	0.1795(2)	8	0.0168(5)	O
O7	0.6528(2)	0.5	0.2313(4)	4	0.0246(9)	O
X	0.6001(2)	0.7638(1)	-0.1034(3)	8	0.0156(6)	(O,OH)
^A H ₂ O(1)	-0.0833(2)	0.2625(2)	-0.4892(5)	8	0.0143(9)	(H ₂ O) _{0.65}
^A H ₂ O(2)	0.0413(5)	0.1048(12)	-0.3287(15)	8	0.241(10)	(H ₂ O) _{0.65}
^A K	0	0.1904(3)	-0.5	4	0.0358(12)	K _{0.3}
^A Na(1)	0	0.3834(19)	-0.5	4	0.153(11)	Na _{0.3}
^A Na(2)	-0.0263(14)	0.3124(17)	-0.514(4)	8	0.028(8)	Na _{0.06}
B	0.9179(10)	0	0.2044(13)	4	0.073(4)	K _{0.2}
C	0.1030(4)	0.5	-0.1700(6)	4	0.0914(19)	Ba _{0.125} (H ₂ O) _{0.5}
D	0	0.5	0	2	0.0302(8)	Ca _{0.35} Na _{0.15} Fe _{0.025}

Таблица S2. Координаты, кратность (Q), эквивалентные параметры смещений ($U_{\text{экв}}$, $\text{\AA}^2$) и состав позиций в кристаллической структуре образца 2

Позиция	x/a	y/b	z/c	Q	$U_{\text{экв}}$	Состав
$M1$	0.5	0.2273(1)	0.5	4	0.0169(1)	$\text{Ti}_{0.97}\text{Nb}_{0.03}$
$M2$	0.75	0.25	0.5	4	0.0157(1)	$\text{Ti}_{0.94}\text{Nb}_{0.06}$
Si1	0.6803(1)	0.3887(1)	0.7500(1)	8	0.0066(1)	Si
Si2	0.2917(1)	0.1099(1)	0.1969(1)	8	0.0063(1)	Si
O1	0.2674(1)	0.1281(1)	-0.0264(1)	8	0.0119(2)	O
O2	0.2264(1)	0.1832(1)	0.2614(1)	8	0.0095(2)	O
O3	0.5803(1)	0.3192(1)	0.6973(1)	8	0.0122(2)	O
O4	0.2523(1)	0	0.2132(2)	4	0.0114(3)	O
O5	0.7649(1)	0.1254(1)	0.3889(1)	8	0.0102(2)	O
O6	0.4179(1)	0.1154(1)	0.3270(1)	8	0.0108(2)	O
O7	0.6355(1)	0.5	0.7281(2)	4	0.0109(3)	O
X	0.6004(1)	0.2244(1)	0.3966(1)	8	0.0107(2)	(O,OH)
A	0.4132(1)	0.2375(1)	0.0117(3)	8	0.0246(5)	$\text{Na}_{0.4}(\text{H}_2\text{O})_{0.1}$
B	0.0802(1)	0	0.2975(1)	4	0.0364(2)	K
C	0.5855(1)	0	0.3437(1)	4	0.0146(1)	$\text{Ba}_{0.255}\text{Sr}_{0.105}(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$
D	0.5	0	0.5	2	0.0134(2)	$\text{Mn}_{0.3}\text{Ca}_{0.2}$
$\text{H}_2\text{O}(1)$	0.4747(2)	0.1145(2)	0.9934(4)	8	0.0315(10)	$(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$
$\text{H}_2\text{O}(2)$	0.0268(2)	0.1467(2)	0.9900(3)	8	0.0231(6)	$(\text{H}_2\text{O})_{0.5}$