

Модульная кристаллохимия группы ловозерита: анализ топологии и стабильности кристаллических структур с использованием атомистического моделирования

Научный руководитель – Марченко Екатерина Игоревна

Кобелева Елена Алексеевна

Студент (магистр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: Kobeleva.elena.2001@gmail.com

Многие цирконосиликаты являются микропористыми соединениями, что делает их перспективными материалами в качестве катализаторов, сорбентов и ионообменников [1]. Группа ловозерита включает природные и синтетические представители с общей формулой: $A_2B_3C_2MT_6O_{12}O_{6-x}(OH)_x \cdot nH_2O$ ($0 \leq x \leq 6$, $n=0-1$), где $T = Si, Ge$ или Al ; $M = Zr, Ti, Fe^{3+}, Ca, Si, Eu, Sn, Sr, Cs$ или Nb ; $C = Ca, Mn^{2+}, Na$ или \square ; $B = Na$ или \square ; и $A = Na, Ca$ или K , охватывают 10 минералов и более 20 синтетических соединений [2]. В соединениях группы ловозерита принято выделять модули из шестичленных колец тетраэдров [3].

В настоящей работе проведен кристаллохимический анализ структур группы ловозерита с использованием модульного подхода для построения теоретических моделей [4], а также формализм Бернигаузена для выявления взаимосвязи группа-подгруппа в этих кристаллических структурах [5]. Для сконструированных каркасов с использованием полумпирических методов теоретического моделирования была оценена их относительная стабильность.

Таким образом, с использованием комплексного подхода теоретически сконструированы все возможные каркасы кристаллических структур группы ловозерита, выявлены взаимосвязи группа-подгруппа между структурами и оценена их относительная стабильность. Результаты проведенного исследования согласуются с имеющимися экспериментальными данными по расшифровке кристаллических структур группы ловозерита и их относительной распространенности в природе.

Источники и литература

- 1) Zubkova N.V., Pushcharovsky D.Yu., New Data on the Crystal Structures of Natural Zirconosilicates: Structure Refinement and Ion-Exchange Behaviour. // Zeitschrift für Kristallographie, 2008, 223, 98-108.
- 2) Зубкова Н.В., Пеков И.В., Чуканов Н.В., Гришин В.Г., Кошлякова Н.Н., Япаскурт В.О., Ксенофонтов Д.А., Турчкова А. Г., Пушаровский Д.Ю., Новые данные по минералогии и кристаллохимии группы ловозерита: необычные разновидности казаковита и литвинскита. // Записки РМО, 2021, Т. 150, №5, С. 134-152.
- 3) Черницова Н.М., Пудовкина З.В., Воронков А.А., Капустин Ю.Л., Пятенко Ю.А. О новом кристаллохимическом семействе ловозерита. // Зап. Всесоюз. минерал. о-ва. 1975. № 1. С. 18–27.
- 4) Кривовичев С.В. Локальный подход и теория ловозеритовых структур. // Труды математического института им. В.А. Стеклова. 2015. т. 288. с. 120–132.
- 5) Bärnighausen H. Commun. A geometric property of central elements. Math. Chem., 1980 9, 139–175. DOI: 10.1007/BF01674443