

КРИСТАЛЛОХИМИЯ МОДУЛЯРНЫХ МИНЕРАЛОВ И МАТЕРИАЛОВ

Аксенов С.М.^{1,2,®}

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

²Геологический институт, ФИЦ Кольский научный центр РАН
® aks.crys@gmail.com

Явление модулярности достаточно распространено в кристаллических структурах природных и синтетических неорганических соединений [1–3]. Особенностью кристаллохимии таких модулярных структур является наличие стабильных единиц – блоков, которые могут иметь размерность 0 (отдельные кластеры), 1 (стержни) и 2 (слои) и повторяться в большом числе родственных соединений. При этом, проявление модулярности кристаллических структур хорошо согласуется с принципом минимальной сложности [2].

Чередование различных фрагментов создает предпосылки к образованию гибридных структур и полисоматических серий, а различные способы укладки одних и тех же модулей – к политипии и OD (“order-disorder”) структурам [1,3,4].

Модулярный подход в современной неорганической кристаллохимии является мощным инструментом, который позволяет не только более детально анализировать известные структуры и находить между ними структурное родство, но также и предсказывать потенциально новые структуры, которые могут быть востребованы современным материаловедением. Большое число примеров соединений с модулярными структурами позволяет говорить о том, что данное явление широко распространено среди природных и синтетических соединений. Применение формализма OD-теории позволяет анализировать симметрию политипов с различным характером кристаллических структур.

Модулярное строение кристаллов существенным образом влияет на их физические свойства, которые могут служить либо диагностическими признаками того или иного минерального вида или нести важную геологическую информацию. Так, различные типы сочленения одномерно протяженных модулей определяют спайность представителей структурного семейства биоприболов (поскольку связь между соседними модулями слабее связей внутри самого модуля),

а различные отношения модулей в минералах группы гумита определяют их оптические константы.

Для неорганических материалов проявление модулярности или полиптипии может также существенным образом влиять на физические и химические свойства за счет изменения топологии кристаллической структуры. В частности, для соединений структурного нелинейно-оптических материалов-бериллоборатов семейства KBВF различные сдвиги слоев будут определять наличие или отсутствие центра симметрии [5], а для микропористых борофосфатов – на возможные пути миграции внекаркасных ионов [6,7].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 20-77-10065-П.

- [1] Ferraris G., Makovicky E., Merlino S., 2008, *Crystallography of Modular Materials*, OUP.
- [2] Krivovichev S.V., 2021, *Crystals*, 11, 1472.
- [3] Aksenov S.M. et al., 2023, *J. Struct. Chem.*, 64, 1797–2028.
- [4] Belokoneva E.L., 2005, *Cryst. Rev.*, 11, 151–198.
- [5] Aksenov S.M. et al., 2024, *J. Phys. Chem. Solids*, 189, 111944.
- [6] Aksenov S.M. et al., 2021, *Minerals*, 11(7), 708.
- [7] Aksenov S.M. et al., 2022, *J. Solid State Chem.*, 308, 122831.