

Российская академия наук
Федеральное агентство научных организаций
Институт геологии
Коми научного центра УрО РАН
Российское минералогическое общество

**Проблемы и перспективы современной
минералогии**
(Юшкинские чтения—2014)

Материалы минералогического семинара с международным участием

*Сыктывкар, Республика Коми, Россия
19–22 мая 2014 г.*

Problems and perspectives of modern mineralogy
(Yushkin Memorial Seminar—2014)

Proceedings of mineralogical seminar with international participation

*Syktывkar, Komi Republic, Russia
19–22 May 2014*

Сыктывкар
Геопринт
2014

Проблемы и перспективы современной минералогии (Юшкинские чтения—2014): Материалы минералогического семинара с международным участием. Сыктывкар: ИГ Коми НЦ УрО РАН, 2014. 272 с.

В сборнике представлены материалы докладов Минералогического семинара с международным участием «Проблемы и перспективы современной минералогии» (Юшкинские чтения — 2014). Рассматриваются фундаментальные проблемы теоретической и прикладной минералогии, генетической минералогии и минералогической кристаллографии. Широко представлены материалы по актуальным вопросам наноминералогии, биоминералогии и получения новых материалов на основе продуктов геологических процессов, а также рациональному использованию минерального сырья. Сборник представляет интерес для минералогов и широкого круга специалистов естественно-научного профиля.

Problems and perspectives of modern mineralogy (Yushkin Memorial Seminar—2014): Proceedings of mineralogical seminar with international participation. Syktyvkar: IG Komi SC UB RAS, 2014. 272 p.

Volume contains proceedings of Mineralogical seminar with international participation «Problems and perspectives of modern mineralogy» (Yushkin Memorial Seminar — 2014). Fundamental problems of theoretical and applied mineralogy, genetic mineralogy and mineralogical crystallography are considered. Important issues of nanomineralogy, biomineralogy and production of new geomaterials as well as the problems of rational use of mineral resources are widely presented. The volume is of interest for mineralogists and wide range of experts in the natural sciences.

*Тексты докладов воспроизведены в авторской редакции.
Proceedings have been reproduced in the author version.*

ложить обратное соотношение этих элементов на основании больших размеров Fe-содержащих октаэдров: средние значения $M5-O$ и $M6-O$ составляют 2.160 и 2.169 Å в шюллерите из Лелая и 2.22 и 2.18 Å в структуре шюллерита из Каленберга соответственно.

Соизмеримость параметров элементарных ячеек шюллерита и минералов группы лампрофиллита является предпосылкой для образования их эпитактических сростаний и смешаннослойных структур. В образцах из Каленберга наблюдаются как резкие, так и размытые границы между зонами шюллерита и лилейита. Можно предположить, что в последнем случае переходная зона представляет собой смешаннослойное образование с чередованием слоев обоих минералов. Обоснованность этого предположения подтверждается данными рентгеноструктурного анализа и создает предпосылки к образованию нового типа упорядоченных гибридных структур, содержащих одновременно шюллеритовые и лампрофиллитовые модули.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-05-31150 мол_а), Совета при Президенте РФ по грантам и финансовой поддержке молодых кандидатов наук (грант № МК-4990.2014.5) и ведущих научных школ (грант № НШ-2150.2012.5).

Литература

1. Расцветова Р. К., Аксенов С. М. Кристаллохимия силикатов с трехслойными TOT- и НОН-модулями слоистого, ленточного и смешанного типа // Кристаллография. 2011. Т. 56. С. 975.
2. Чуканов Н. В., Расцветова Р. К., Бритвин С. Н. и др. Шюллерит $Ba_2Na(Mn,Ca)(Fe^{3+},Mg,Fe^{2+})_2Ti_2(Si_2O_7)_2(O,F)_4$ — новый минерал из вулканического района Айфель, Германия. // ЗРМО. 2011. № 1. С. 67.
3. Расцветова Р. К., Аксенов С. М., Чуканов Н. В. Кристаллическая структура шюллерита — нового минерала семейства гетерофиллосиликатов // Доклады АН. 2011. Т. 437. С. 499.

База данных по кристаллографии и кристаллохимии минералов WWW-MINCRYST: 16 лет работы, возможности, сервисы, перспективы

Д. А. Варламов, Т. Н. Докина, Н. А. Дрожжина, О. Л. Самохвалова

Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка; dima@iem.ac.ru

База данных WWW-MINCRYST и информационно-вычислительная система (ИВС) на ее основе (<http://mincryst.iem.ac.ru>) стали одними из первых научных интерактивных Интернет-ресурсов в области наук о Земле в России и в мире (декабрь 1997, [1]). Ресурс сначала был призван обеспечить интерактивный Интернет-доступ пользователям к накопленным с 1985 года литературным данным по кристаллическим структурам минералов, затем в ИВС были введены авторские разработки по интерактивной обработке данных и их анализу. Инициатором и идеологом работ стал А. В. Чичагов (зав. группы РСА в ИЭМ РАН). Идеология, методы и основные технологии, используемые в ИВС, освещены здесь [2,3].

Сейчас WWW-MINCRYST представляет собой многоуровневую информационную двуязычную (русский/english) систему (содержание и языки интерфейса). В ИВС входят:

(а) база данных (БД) или информационный фонд — около 8550 записей для более чем 3500 уникальных фаз, т.е. большинства минералов с расшифрованными к настоящему времени кристаллическими структурами (около 4800). Помимо природных объектов, в БД представлены синтетические минералы — их структурные аналоги, отличающиеся по

катионно-анионному составу, и неорганические соединения (силикаты, фосфаты, бораты и др.), близкие по свойствам к природным веществам. БД содержит данные из более 140 иностранных и отечественных журналов за период от 30-х годов XX века вплоть до 2013 года. Ежегодное пополнение — не менее 330 записей. Базовая запись содержит информацию о названии (в соответствии с классификацией IMA или рекомендациями IUPAC), химическом составе, симметрии, параметрах элементарной ячейки, координатах атомных позиций с изотропными температурными факторами и заселенностями, информацию о межплоскостных расстояниях, HKL-индексах и интенсивностях сильнейших рефлексов рентгенодифракционной картины поликристалл-фазы, а также ссылки на соответствующие публикации по расшифровке или уточнению кристаллической структуры. Запись может быть специфицирована по полезным свойствам, особенностям химического состава и структуры, а также по P - T условиям синтеза и т. п. Каждая запись содержит «монокристалльные» и «поликристалльные» характеристики кристаллической фазы. Для 2400 фаз сделаны экспресс-оценки потенциальной энергии кристаллической решетки.

(б) средства поиска по названиям (и их фрагментам) минералов и их спецификаций, химическому составу (комбинации присутствующих/отсутствующих элементов), кристаллографическим параметрам, литературным источникам, вспомогательной информации, причем возможны комбинации поисковых параметров. По ряду параметров поиска у ИВС до сих пор нет аналогов среди минералогическо-кристаллографических баз данных;

(в) мультимедийные интерактивные формы визуализации структур и спектров. Модуль **WWW-Crystpic** формирует динамические интерактивные изображения моделей кристаллических структур в шарах-сферах и в полиэдрических проекциях (до 138 позиций и до 1500(!) атомов на структуру). Модуль позволяет проводить всевозможные манипуляции с моделью структуры, включая масштабирование, непрерывное и/или автоматическое дискретное вращение вокруг «экраных» осей X, Y, Z, ориентацию по кристаллографическим осям, hkl-фрагментацию структуры (на hkl-ориентированные фрагменты толщиной $d(hkl)$), наращивание элементарных ячеек вдоль любых выбранных направлений для формирования «сверхструктур» и мотивов, а также прямой «ручной» и автоматизированный для малых полиэдров (тетраэдров и октаэдров) расчет любых межатомных расстояний и углов в структуре. Программа изображает любые полиэдры, включая «дефектные» с необычно малыми («плохими») межатомными расстояниями. Модуль **WWW-Mixipol** предназначен для графического представления полных расчетных спектральных профилей поликристалл-рентгенограмм с возможностями манипулирования спектрами для разных источников излучения и разных типов спектральных шкал. Также модуль способен формировать рентгенограммы смесей фаз (до 6 фаз) при возможности варьирования содержаниями компонентов смеси. Предусмотрены упрощенные варианты представления информации в виде традиционных шаровых структур и линейчатых спектров.

(г) классификационные схемы (Годовиков, Бокий, Chirioti);

(д) системы динамически формируемых WWW-ссылок на внешние информационные ресурсы (Mindat, Webmineral, Athena, поисковые системы) с обратной связью;

(е) WWW-ориентированный инструментальный разработчик (импорт входных данных, проверка, редакция), возможность работы с пользовательскими данными.

Наличие большого количества структур и средств визуализации позволяет с помощью WWW-MINCRYST развивать принципиально новые подходы к представлению кристаллических структур — благодаря гибкому использованию полиэдров, позволяющему формировать различные варианты структурных моделей минералов. В ряде случаев кристаллическое пространство можно организовать, не строго привязываясь к традиционному катионно-анионному изображению, формируя в смешанном шаровом и полиэдрическом изображении структуру на основе любых атомов, входящих в их состав. Метод особенно эффективен для сложных «неправильных» бескислородных структур (фосфиды, сложные сульфиды и сульфосоли и т. п.).

Востребованность ИВС подтверждается статистикой обращений (4–5 млн успешных единичных запросов в год, 50–60 Гб скачанной информации, до 35000 уникальных клиентов). Работы по ИВС WWW-MINCRYST в 1997–2013 годах были поддержаны несколькими грантами РФФИ (в настоящее время — грант РФФИ 12-07-00742-а, рук. Варламов Д. А.).

Литература

1. Чичагов А. В., Варламов Д. А., Диланян Р. А. и др. МИНКРИСТ — кристаллографическая база данных для минералов: локальный и сетевой (WWW) варианты // Кристаллография, 2001. Т. 46. № 5. С. 950–954.
2. Чичагов А. В., Варламов Д. А., Ершов Е. В. и др. Кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов (WWW-МИНКРИСТ) // Записки РМО, 2007. Т. 136. № 3. С. 135–141.
3. Варламов Д. А., Докина Т. Н., Дрожжина Н. А., Самохвалова О. Л. WWW-MINCRYST: Интернет-ориентированная информационно-вычислительная система по кристаллографии и кристаллохимии минералов // Вестник ЮУрГУ, Серия «Вычислительная математика и информатика», 2013. Т. 2. Вып. 1. С. 26–32.