

**RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES
Ural Branch**

**Russian Mineralogical Society
Commission on Crystal Chemistry, X-Ray Diffraction and Spectroscopy of Minerals
International Union of Crystallography
Institute of Geology and Geochemistry
Saint-Petersburg State University
Ural Federal University**



Book of Abstracts of the XVIII International Conference

**CRYSTAL CHEMISTRY,
X-RAY DIFFRACTION AND SPECTROSCOPY
OF MINERALS – 2014**

October 13–15, 2014

EKATERINBURG, RUSSIA

УДК 548.3 : 73 + 539.26 + 549.08

Кристаллохимия, рентгенография и спектроскопия минералов – 2014. Екатеринбург: ИГГ УрО РАН, 2014. 242 с.

ISBN 978-5-94332-116-0

В сборник вошли материалы **XVIII Международного совещания по кристаллохимии, рентгенографии и спектроскопии минералов** (13–15 октября 2014 г.), посвященного Международному году кристаллографии, объявленному ООН в 2014 году.

Сборник посвящен актуальным проблемам общей кристаллохимии, результатам рентгенографического и спектроскопического изучения природных минералов и их синтетических аналогов, нано- и биоматериалов, включая исследования при высоких температурах и давлениях. Особое внимание уделено соотношению структура – свойства минералов.

Проведение Совещания и издание материалов осуществлено при поддержке РФФИ (проект № 14-05-20343), УрФУ, Европейской кристаллографической ассоциации (ECA), Международного центра дифракционных данных (ICDD), фирм Техноинфо Лтд., Квантум Лаб, Элемент, Уральское бюро РЕ.

Илл. 138, табл. 37.

Ответственные редакторы: С.Л. Вотяков, С.К. Филатов, С.В. Кривовичев.

Члены редколлегии: Ю.В. Щапова, Р.С. Бубнова, М.Г. Кржижановская, Е.Н. Котельникова, О.В. Франк-Каменецкая, Н.Р. Хисина, О.В. Якубович, Д.В. Киселева.

Макет и техническое редактирование: М.М. Патракеева.

Дизайн обложки: А.Ю. Одинцова.

UDC 548.3 : 73 + 539.26 + 549.08

Crystal chemistry, X-Ray Diffraction and Spectroscopy of Minerals – 2014. Ekaterinburg: IGG UB RAS, 2014. 242 p.

ISBN 978-5-94332-116-0

The book of abstracts contains the materials of **XVIII International Conference on Crystal Chemistry, X-Ray Diffraction and Spectroscopy of Minerals** (October 13–15, 2014) dedicated to the International Year of Crystallography promoted in the 2014 by the United Nations.

The book of abstracts is dedicated to the actual problems of general crystal chemistry, diffraction and spectroscopic studies of minerals, nano- and biomaterials including the studies under non-ambient conditions. Special attention has been drawn to the structure - properties relations.

The conference is supported by Russian Foundation for Basic Research (RFBR, grant № 14-05-20343), Ural Federal University, European Crystallographic Association (ECA), International Center for Diffraction Data (ICDD), Technoinfo Ltd., Quantum Lab, Element, Ural Bureau Perkin Elmer.

Figures 138, tables 37.

Editors in chief: S.L. Votyakov, S.K. Filatov, S.V. Krivovichev.

Editorial board: Yu. V. Shchapova, R.S. Bubnova, M.G. Krzhizhanovskaya, E.N. Kotelnikova, O.V. Frank-Kamenetskaya, N.R. Khisina, O.V. Yakubovich, D.V. Kiseleva.

Technical editor: M.M. Patrakeeva.

Cover design: A. Odintsova.

© Институт геологии и геохимии УрО РАН, 2014

© Авторы тезисов

WWW-MINCRYST – ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ WEB-СИСТЕМА ПО КРИСТАЛЛОХИМИИ МИНЕРАЛОВ И ИХ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ

WWW-MINCRYST – INFORMATION-CALCULATION WEB-SYSTEM ON A CRYSTALLOCHEMISTRY OF MINERALS AND THEIR ANALOGUES

Д.А. Варламов, Т.Н. Докина, Н.А. Дроzhжина, О.Л. Самохвалова.
D.A. Varlamov, T.N. Dokina., N.A. Drozhzhina, O.L. Samokhvalova

Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка, РФ, email: dima@iem.ac.ru
Institute of Experimental Mineralogy RAS, Chernogolovka, Russia, email: dima@iem.ac.ru

The Internet-oriented WWW-MINCRYST bilingual (eng/rus) information-calculation system (ICS) was created in 1997 and develops until now. The ICS is intended for operation with crystal chemistry and crystal structures of minerals and their synthetic analogs in the field of mineralogy, chemistry, solid state physics, etc. The ICS main components are actually a database of crystallochemical data (more than 8750 records for 3700 unique phases: 3400 minerals and 300 synthetic phases, volume of database increases on 300 – 350 records per year), supplied with a complex of tools for search and information choice, sophisticated complex of means for multimedia submission of information (interactive polyhedral and spherical crystal structures, interactive spectra and their combination, etc.), opportunities of processing of spectral information. The ICS is available without any restrictions at <http://database.iem.ac.ru/mincryst> or <http://mincryst.iem.ac.ru>.

В докладе описывается созданная в 1997 году и непрерывно развиваемая информационно-вычислительная система (ИВС) WWW-MINCRYST по кристаллохимии минералов и их структурных аналогов. Цель создания ИВС WWW-MINCRYST с ее инструментарием – обеспечить достоверной и актуальной информацией в области кристаллохимии/кристаллографии минералов и их синтетических аналогов для максимально широкого круга пользователей во всех областях науки, оперирующих с кристаллическим веществом (геология, геохимия, кристаллография, физика твердого тела), а также дать дополнительный толчок в развитии методов обработки и визуализации кристаллоструктурных данных. ИВС WWW-MINCRYST (<http://database.iem.ac.ru/mincryst>, <http://mincryst.iem.ac.ru>) в качестве Интернет-ориентированной базы данных возникла достаточно давно и стала одним из пионерских интерактивных научных Интернет-ресурсов как в России, так и (в области наук о Земле) в мире. Инициатором и основным идеологом работ стал зав. группой рентгеноспектрального анализа ИЭМ РАН выдающийся кристаллограф А.В. Чичагов (увы, безвременно ушедший в 2010 году). Первый полностью работоспособный вариант WWW интерфейса был создан в рамках гранта РФФИ № 96-07-89162 и представлен пользователям в декабре 1997 года [1]. На старте проекта ресурс был призван обеспечить интерактивный Интернет-доступ пользователям к накапливавшимся с 1985 года в рамках локальной БД МИНКРИСТ литературным и авторским аналитическим данным по кристаллическим структурам (около 3500 минералов и аналогов на момент старта проекта). В процессе развития в состав ИВС добавлен ряд программных разработок по вычислительной обработке кристаллохимических данных, их анализу и мультимедийной визуализации. Основные

технологии реализации ИВС WWW-MINCRYST описаны здесь [2].

За 17 лет развития ИВС WWW-MINCRYST нарастил свой информационный фонд почти в 2,5 раза (более чем на 5000 объектов).

В теоретической основе ИВС WWW-MINCRYST лежит ряд принципиальных "идеологических" моментов, разработанных А.В.Чичаговым [1, 3]. Синтез информации о кристаллической фазе, рассматриваемой как "монокристалл" и/или как "поликристалл" с заменой экспериментальных поликристалл-стандартов расчетными – базовая идея WWW-MINCRYST, что позволяет существенно расширить информационную базу сравнительно с аналитической. На базе введенной информации программный пакет эксперта-разработчика формирует вторую, производную от первой (аналитической), базу расчетных поликристалл-стандартов, проводя синтез двух типов информации о кристаллической фазе. Связка «Кристаллическая структура фазы и ее расчетная поликристалл-рентгенограмма» является информационной основой ИВС WWW-MINCRYST и служит эффективным инструментом для реализации принципиально нового подхода к формированию всей кристаллоструктурной информации о веществе и организации доступа к ней.

ИВС WWW-MINCRYST представляет многоуровневую двуязычную (rus/eng – как содержание, так и интерфейсы) дружелюбную пользователю систему, в которую входит следующее.

(а) Собственно база данных или Информационный фонд ИВС, содержащий на июль 2014 года около 8750 записей для более чем 3700 уникальных фаз. Информационный фонд ИВС WWW-MINCRYST содержит информацию о большинстве известных минеральных видов (около 3400 из ~4900 официально признанных Международной Минералогической

Ассоциацией, март 2014, <http://www.ima-mineralogy.org/Minlist.htm>) с расшифрованными кристаллическими структурами. Помимо природных объектов в базе данных представлены синтетические минералы и неорганические соединения (силикаты, фосфаты, бораты и др.), близкие по свойствам к природным веществам. Основным источником информации для ИВС служат журнальные статьи из более чем 140 иностранных и отечественных журналов за период от 30-х годов XX века вплоть до 2014 года. Ежегодный прирост новых или заново переопределенных/уточненных кристаллических структур – до 300–400 структур в год. В ИВС реализован импорт проверенной экспертами информации через web-интерфейс в виде единичных записей и пакетов записей (до нескольких сот) с автоматическим входным контролем данных. Реализована возможность редактирования записей, их удаления, архивации и восстановления базы данных через web-интерфейс.

Информационная запись для индивидуального кристаллического вещества содержит информацию о названии (в соответствии с классификацией ИМА или рекомендациями по наименованию неорганических веществ 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, Р-Т условиям синтеза, принадлежности к условным минеральным группам и т.п. Каждая запись содержит "монокристалльные" и "поликристалльные" характеристики кристаллической фазы. Минералы классифицированы в соответствии с таксонами структурно-химической систематики минералов А.А. Годовикова, кристаллохимической классификации М. Чириотти, в настоящее время вводится классификация по структурным типам минералов по Г.Б. Бокию. Для 2400 фаз сделаны экспресс-оценки потенциальной энергии кристаллической решетки.

(б) Средства поиска фаз по отдельным наборам или комплексу параметров: название минерала (полное или частичное, по спецификации, алфавитные списки); химический или элементный состав в различных комбинациях (присутствие/отсутствие элементов и их комбинации); кристаллоструктурные характеристики (симметрия, пространственные группы, параметры элементарной ячейки, межплоскостные расстояния $d(hkl)$); литературные источники; поиск по классификационным параметрам нескольких кристаллохимических и структурных

классификаций (Годовиков, Чириотти, Бокий). Сочетание поиска по нескольким $d(hkl)$ с химическим (элементным) составом дает возможность прямого интерактивного качественного рентгенофазового анализа.

По ряду параметров поиска ИВС WWW-MINCRYST до сих пор не имеет аналогов среди минералого-кристаллографических баз данных. По результатам поиска пользователь получает ссылку на список фаз, отвечающих поисковым критериям с указанием номера записи, названия фазы, формулы и пространственной группы с возможностью последующего перехода по гиперссылке. В случае единичного ответа пользователь автоматически переводится на найденную запись.

В «карте» найденного объекта представлены основные данные (как хранимые в ИВС, так и динамически рассчитываемые при формировании «карты») – название, формула, параметры ячейки, кристаллографические данные (кол-во рефлексов, рентгеновские плотности, коэффициенты поглощения); CPDS карта – 20 максимальных рефлексов, их hkl позиции и интенсивности; базовые атомные позиции и их заселенности; полная информационно-расчетная карта (рентгеновские плотности, все рефлексы и т.п.); рассчитанные энергии решетки; принадлежность к различным классификационным схемам; источники данных (ссылки на публикации, поправки и т.п.); автоматически формируемые ссылки на внешние ресурсы, ссылки на динамически создаваемые интерактивные изображения моделей кристаллических структур и моделей спектров.

(в) Мультимедийные интерактивные формы визуализации структур и спектров [4]. 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 "экранных" осей X, Y, Z, ориентацию по кристаллографическим осям, hkl-фрагментацию структуры (на hkl-ориентированные фрагменты толщиной $d(hkl)$), размножение элементарных ячеек вдоль любых выбранных направлений для формирования "сверхструктур" и мотивов, а также прямой "ручной" и/или 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 и уплощенные «вырожденные» полиэдры.

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 содержания компонентов смеси.

Реализованы упрощенные варианты представления информации в виде традиционных шаровых структур и линейчатых спектров с возможностью манипулирования ими.

(г) Классификационные схемы (Годовиков, Боксий, Chirioti);

(д) Системы динамически формируемых перекрестных WWW-ссылок на внешние информационные ресурсы (Mindat, Webmineral и др., поисковые системы).

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

Наличие большого количества структур и средств визуализации позволяет ИВС проводить весьма нестандартные статистические выборки по структурным данным, а также развивать принципиально новые подходы к представлению кристаллических структур благодаря возможности формирования различных вариантов структурных моделей.

Востребованность ИВС подтверждается статистикой – до 50 – 60 Гб скачиваемой информации в год, 4 – 4.5 млн. единичных запросов, до 35000 уникальных клиентов.

Таким образом, развиваемая 17 лет ИВС WWW-MINCRYST стала общедоступным, дружелюбным пользователю интерфейсом к большому объему кристаллоструктурной и кристаллохимической информации с развитыми средствами поиска, представления и обработки и может служить мощным научным инструментарием в минералогии, кристаллографии, физике твердого тела, материаловедении и смежных областях науки.

Работы по ИВС WWW-MINCRYST в течение 1997 – 2013 гг. были поддержаны 5 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., Кристаллография 46 (2001), 5, 950-954
2. Варламов Д.А., Докина Т.Н., Дрожжина Н.А., Самохвалова О.Л., Вестник ЮУрГУ, серия «Вычислительная математика и информатика» 2 (2013), 1, 26-32
3. Чичагов А.В., Шилова З.В., Лопатин А.Л., Кристаллография, 37 (1992), 4, 942-953
4. Чичагов А.В., Варламов Д.А., Ершов Е.В. и др., Записки РМО 136 (2007), 3, 135-141