Российская академия наук,
Научный совет РАН по химической физике,
Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

Институт проблем химической физики РАН,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

ТЕЗИСЫ

X Национальной кристаллохимической конференции

Приэльбрусье, 5 - 9 июля 2021 г

Российская академия наук,
Научный совет РАН по химической физике,
Научный совет РАН по материалам и наноматериалам

Институт проблем химической физики РАН,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

ТЕЗИСЫ

X Национальной кристаллохимической конференции

Приэльбрусье, 5 - 9 июля 2021 г

Тезисы докладов X Национальной кристаллохимической конференции

В сборнике представлены тезисы пленарных лекций, устных и стендовых докладов X Национальной кристаллохимической конференции (Приэльбрусье 5 – 9 июля 2021 г).

Доклады посвящены современному состоянию исследований в области кристаллохимии - фундаментальным вопросам строения и реакционной способности, взаимосвязи «структура-свойство», созданию новых многофункциональных материалов с заранее заданными свойствами, структурным аспектам твердофазных реакций, вопросам динамической кристаллохимии и химической связи, представлены работы по общим вопросам кристаллохимии, методам рентгеноструктурного анализа и возможностям дифракционных методов исследования наноматериалов.

Сборник издан в авторской редакции

Технический редактор – к.х.н. И.А. Шилова

Организаторы конференции:

Институт проблем химической физики, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Конференция проводится при поддержке Российской академии наук, Научного совета РАН по химической физике, Научного совета РАН по материалам и наноматериалам

ISBN 978-5-6044508-3-3

ISBN 978-5-6044508-3-3

9 785604 450833

КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНО НОВОГО МИНЕРАЛА ГРУППЫ ЭВДИАЛИТА С ЗАМЕЩЕНИЕМ $Cl^- – S^{2-}$

Расцветаева Р. К. [1], Чуканов Н. В.[2], Пеков И. В.[3], Варламов Д. А.[2,4]
[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва*
E-mail: rast@crys.ras.ru
[2]*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*
[3]*Московский государственный университет, Геологический факультет, 119991, Москва*
[4]*Институт экспериментальной минералогии РАН; 142432, Черноголовка*

Двести лет назад был открыт один из главных цирконосиликатных минералов – эвдиалит. Он оказался эффективной моделью, на которой установлены многие кристаллохимические, геохимические и генетические закономерности. Прошло еще около 150 лет, когда под руководством академика Н.В. Белова удалось получить модель полиэдрического каркаса эвдиалита, которая представляет собой сложную постройку из колец Si_9O_{27}, Si_3O_9 и Ca_6O_{24}, объединенных изолированными ZrO_6-октаэдрами. С развитием техники эксперимента и компьютерных программ появилась возможность получать детальную информацию о распределении элементов в структурах минералов группы эвдиалита. Особенностью кристаллохимии этих минералов является расщепление позиций – *M* (для мелких и средних по размеру катионов) и *N* (для крупных катионов) и *X* (для дополнительных анионов) на подпозиции, находящиеся на коротких расстояниях друг от друга и заполненных статистически. Уникальное кристаллохимическое разнообразие минералов группы эвдиалита определяется различными схемами гомовалентного, гетеровалентного и блочного изоморфизма в этих позициях. В настоящее время группа эвдиалита насчитывает 29 минеральных видов [*Расцветаева Р.К.* и др. Минералы группы эвдиалита: кристаллохимия, свойства, генезис. 2012. 229 с.]. В данной работе представлен потенциально новый минерал, который отличается от известных минералов группы эвдиалита рядом химических и структурных особенностей. Он найден на горе Кедыквергпахк в Ловозерском щелочном массиве и изучен методами рентгеноструктурного анализа, электронно-зондового микроанализа и

ИК-спектроскопии. Параметры тригональной ячейки: a = 14.2156(3), c = 30.405(1) Å, V =5321.16 (3) Å^3, пр. гр. $R3m$, R = 3.9%, 2158 $F > 3\sigma(F)$. Эмпирическая формула с учетом неоднородности зерен: $Na_{12.81-14.02}K_{0-0.11}Sr_{0.24-1.45}(Ce_{0.20-0.43}La_{0.11-0.27}Nd_{0.10-0.24}Pr_{0-0.09}Sm_{0-0.06})Ca_{4.94-5.29}Mn_{1.26-1.53}Fe_{0.24-0.52}Zr_{2.59-3.04}Hf_{0-0.05}Nb_{0.14-0.39}Ti_{0.11-.38}Si_{25.5}S_{0.37-0.66}Cl_{0.11-0.32}O_x{\cdot}n(H_3O, H_2O)$. Все расчеты выполнены с использованием AREN-системы. Кристаллохимическая формула (Z = 3): $[Na_{9.7}(Na,H_3O)_2(H_3O)Sr_{0.7}Ln_{0.3}K_{0.02}][Ca_{5.4}Ln_{0.6}][^{V}(Mn,Fe)_{1.05})^{V}Mn_{0.66}\ ^{VI}Na_{1.29}][Zr_{2.95}Hf_{0.05}][Si_{0.78}Nb_{0.22}][Si_{0.75}Ti_{0.25}][Si_{24}O_{72}](OH,O)_{2.94}(S^{2-}{}_{0.48}Cl_{0.22}).1.98H_2O$, где квадратными скобками выделены составы ключевых позиций структуры, а римскими цифрами даны координационные числа. ИК-спектр подтверждает присутствие H_2O и H_3O, отсутствие сульфатной серы и относительно низкое содержание Mn+Fe в позиции $M2$.

Марганец занимает одну из ключевых позиций структуры между соседними шестичленными кольцами Ca-октаэдров, образующих своими ребрами O–O плоский квадрат. По обе стороны квадрата находятся две позиции на расстоянии 0.74 Å друг от друга, одна из которых занята Mn, а другая – Mn совместно с Fe со средними расстояниями $M2$a–O = 2.176 и $M2$b–O = 2.145 Å соответственно. Третья позиция в этой микрообласти ($M2$c) отстоит от $M2$b на 0.99 Å и занята атомом Na (Na–O = 2.66 Å). Другая видообразующая позиция $M3$, располагающаяся на оси третьего порядка вблизи центра девятичленного кремнекислородного кольца Si_9O_{27}, расщеплена на три подпозиции, находящиеся на коротких расстояниях друг от друга: $M3$a–$M3$b = 1.01(1) и $M3$b–$M3$c = 0.54(1) Å. Они заняты атомами Si, (Si,Al) и Nb соответственно при доминировании Si. Позиция $M4$ вблизи центра второго девятичленного кольца расщеплена на три подпозиции с расстояниями $M4$a–$M4$b = 0.53(2) и $M4$b–$M4$c = 0.98(2) Å, занятые атомами Ti, Si и Si соответственно, также при доминировании Si. $N1$- $N5$ позиции расщепляются на две или три подпозиции, отстоящие друг от друга на расстояниях в пределах 0.5Å и более и статистически занятых Na, Sr, Ce и H_3O. Важной особенностью минерала, новой для группы эвдиалита, является присутствие в нем серы в сульфидной форме S^{2-}, которая совместно с Cl^- и H_2O занимает одну из расщепленных X-позиций.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части рентгеноструктурного анализа и Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-29-12007) в части ИК-спектроскопии и анализа химического состава).