

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ И СВОЙСТВА МОДУЛЯРНЫХ МИНЕРАЛОВ

Аксенов С.М.

ФИЦ Кольский научный центр РАН, Анатиты, Россия, aks.crys@gmail.com

Явление модулярности достаточно распространено в кристаллических структурах природных и синтетических неорганических соединений [Ferraris et al., 2008; Аксенов и др., 2023; Krivovichev et al., 2021]. 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 Krivovichev et al., 2021]. 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 [Ferraris et al., 2008; Аксенов и др., 2023; Belokoneva, 2005].

В настоящее время модулярный подход является мощным инструментом современной минералогической кристаллографии и неорганической кристаллохимии, который позволяет не только более детально анализировать известные структуры и находить между ними структурное родство, но также и предсказывать потенциально новые структуры. Большое число примеров соединений с модулярными структурами позволяет говорить о том, что данное явление широко распространено среди природных и синтетических соединений.

Модулярное строение существенным образом влияет на 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 биопиритов (поскольку связь между соседними модулями слабее связей внутри самого

модуля), а различные отношения модулей в минералах группы гумита определяют их оптические константы. Кроме того, различные сдвиги слоев будут определять наличие или отсутствие центра симметрии для нелинейно-оптических материалов – бериллоборатов структурного семейства KBBF, производных от минерала берборита –  $\text{Be}_2(\text{BO}_3)(\text{OH})\cdot\text{H}_2\text{O}$  [Aksenov et al., 2024].

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ №20-77-10065-П.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Аксенов С.М., Чаркин Д.О., Банару А.М., Банару Д.А., Волков С.Н., Дейнеко Д.В., Кузнецов А.Н., Расцветаева Р.К., Чуканов Н.В., Шкурский Б.Б., Ямнова Н.А. Модулярность, политипия, топология и сложности кристаллических структур неорганических соединений: обзор // ЖСХ. 2023. Т. 64. № 10. Статья 117102 (С. 1–238).
2. Aksenov S.M., Chukanov N.V., Tarasov V.P., Banaru D.A., Mackley S.A., Banaru A.M., Krivovichev S.V., Burns P.C. The local state of hydrogen atoms and proton transfer in the crystal structure of natural berborite,  $\text{Be}_2(\text{BO}_3)(\text{OH})\cdot\text{H}_2\text{O}$ : Low-temperature single crystal X-ray analysis, IR and  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy, and crystal chemistry and structural complexity of beryllium borates // Phys. Chem. Solids. 2024. V. 189. P. 111944
3. Belokoneva E.L. Borate crystal chemistry in terms of the extended OD theory: Topology and symmetry analysis // Crystallogr. Rev. 2005. V. 11. № 3. P. 151–198.
4. Ferraris G., Makovicky E., Merlino S. Crystallography of Modular Materials. OUP. 2008.
5. Krivovichev S.V. The principle of maximal simplicity for modular inorganic crystal structures // Crystals. 2021. V. 11. P. 1472.