

СТРУКТУРНАЯ СЛОЖНОСТЬ МИНЕРАЛОВ МЕДИ: НОВЫЕ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ**Кривовичев С.В.**

Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский Государственный Университет

STRUCTURAL COMPLEXITY OF COPPER MINERALS: NEW
EXPERIMENTAL AND THEORETICAL RESULTS**Krivovichev S.V.**

Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

Минералы меди отличаются большим химическим и структурным разнообразием и сложностью, что вызвано, с одной стороны, тем, что катионы Cu^+ и Cu^{2+} находятся на границе между мягкими и жесткими катионами (и, следовательно, могут проявлять как халько-, так и литофильные свойства), и, с другой стороны, гибкостью координационной геометрии, что определяется Ян-Теллеровской дестабилизацией идеальной октаэдрической координации. Интересно отметить, что с 2010 года открыто более 80 новых минералов меди и их количество постоянно пополняется.

В докладе будут представлены результаты исследования кристаллических структур ряда минералов меди методами рентгеноструктурного анализа и квантово-химических расчетов с использованием теории функционала электронной плотности: медь-сульфидные стержни в кристаллических структурах бетехтинита (Кривовичев, Яковенчук, 2016); медные гидроксокластеры в авдонините (Пеков и др., 2015); слои из оксоцентрированных тетраэдров в аверьевите (Кривовичев и др., 2015); системы водородных связей в эвхроите, псевдомалахите, луджибаите и рейхенбахите по экспериментальным и теоретическим данным (Krivovichev et al., 2016a,b); структурная сложность и фазовые превращения в минералах группы атакамита (Krivovichev et al., 2016c); а также данные по новым минералам, находящимся в работе.

Отличительными особенностями кислородсодержащих минералов меди являются: обширное проявление комбинаторного полиморфизма (Krivovichev et al., 2016b), вследствие чего возникают близкие по энергии структурные постройки одного состава; склонность катионов Cu^{2+} к образованию оксо- и гидроксокластеров, включая структурные топологии на основе тетраэдров $(\text{OCu}_4)^{6+}$ (Krivovichev, 2016); взаимосвязь между структурной сложностью и кристаллизацией полиморфов, и др.

Работа поддержана Российским научным фондом (проект 14-17-00071). Исследования проведены с использованием оборудования РЦ РДМИ Научного парка СПбГУ.

Кривовичев С.В., Яковенчук В.Н. Новые данные о бетехтините: уточнение кристаллической структуры и химической формулы // Геология и геофизика. 2016. Принято к печати.

Кривовичев С.В., Филатов С.К., Вергасова Л.П. Уточнение кристаллической структуры аверьевита $\text{Cu}_5\text{O}_2(\text{VO}_4)_2 \cdot n\text{MCl}_x$ (M = Cu, Cs, Rb, K) // Записки РМО. 2015. Т. 144. Вып. 4. С. 101-109.

Пеков И.В., Кривовичев С.В., Чуканов Н.В., Янаскурт В.О., Сидоров Е.Г. Авдонинит: новые данные, кристаллическая структура и уточненная формула $\text{K}_2\text{Cu}_5\text{Cl}_8(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ // Записки РМО. 2015. Т. 144. Вып. 3. С. 55-69.

Krivovichev S.V. Structure description, interpretation and classification in mineralogical crystallography // Crystallography Reviews. 2016. Accepted.

Krivovichev S.V., Zolotarev A.A., Pekov I.V. Hydrogen bonding system in euchroite, $\text{Cu}_2(\text{AsO}_4)(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_3$: low-temperature crystal-structure refinement and solid-state density functional theory modeling // Mineralogy and Petrology. 2016a. In press. doi:10.1007/s00710-016-0450-6.

Krivovichev S.V., Zolotarev A.A., Popova V.I. Hydrogen bonding and structural complexity in the $\text{Cu}_5(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_4$ polymorphs (pseudomalachite, ludjibaite, reichenbachite): combined experimental and theoretical study // Structural Chemistry. 2016b. Submitted.

Krivovichev S.V., Hawthorne F.C., Williams P.A. Structural complexity and crystallization: the Ostwald sequence of phases in the $\text{Cu}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ system (botallackite – atacamite – clinoatacamite) // Structural Chemistry. 2016. In press. doi: 10.1007/s11224-016-0792-z.