

Кристаллохимический анализ кислородных позиций в природных неорганических кислородных соединениях, содержащих свинец.

Научный руководитель – Ерёмин Николай Николаевич

Подображных Андрей Дмитриевич

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: andrew.podobrazhnykh123@gmail.com

Связи центрального атома с ближайшим окружением варьируются по своим физико-химическим характеристикам [1]. Поэтому задача однозначного определения координационного числа (КЧ) и координационного полиэдра (КП) атомов в неорганических соединениях, а также выделения структурных единиц, определяющих физические свойства соединения, требует комплексного кристаллохимического подхода. В работе рассматриваются структуры кислородных минералов, содержащих свинец, при помощи двух независимых кристаллохимических подходов: метода валентности связи [3] и геометрического анализа характеристик кислородных позиций. В структурах таких соединений свинец характеризуется $KЧ > 5$ и крупными деформированными КП, содержащими дополнительные к кислороду координирующие анионы; с другой стороны, ионы O^{2-} являются малополяризуемыми, жёсткими [2], и могут координироваться катионами в компактные анион-центрированные полиэдры с $KЧ < 5$. Проведен сравнительный анализ эмпирических параметров b и $R1$ стандартного уравнения валентного усилия межатомной связи. Для расчетов использовались как стандартные параметры [3], так и уточнённые в серии последующих работ на большом массиве межатомных связей. Проведен анализ 243 структур минералов из открытых баз данных. Статистически уточнены суммы валентных усилий и геометрические характеристики кислородных позиций ($V_{пвд}$, R и Sa контактов $O-Pb$). Данные параметры могут использоваться в качестве диагностического признака для выделения кристаллохимически-оправданных оксо-центрированных комплексов. Выборка охватывает все общепринятые минералогические классы и соединения со всеми типами устойчивых катион-центрированных группировок, гидроксильными ионами и молекулами воды. Проанализировано более 1500 связей кислорода с окружающими катионами, в том числе 915 контактов $O-Pb$. Дополнительно определены $V_{кп}$ анион-центрированных и устойчивых катион-центрированных полиэдров в рассматриваемых структурах.

Источники и литература

- 1) 1. Ерёмин Н. Н., Еремина Т. А., Подображных А. Д. Теоретические приемы выделения координационных полиэдров в катион-и анион-центрированных аспектах //XII Всероссийская молодежная научная конференция «Минералы: строение, свойства, методы исследования». – Екатеринбург, 2021. – Институт геологии и геохимии УрО РАН, 2021. – С. 44-44.
- 2) 2. Еремина Т. А. и др. Кристаллохимический подход к выделению оксоцентрированных комплексов в силикатах двухвалентного свинца //Кристаллография. – 2021. – Т. 66. – №. 1. – С. 34-46.
- 3) 3. Brown I. D., Altermatt D. Bond-valence parameters obtained from a systematic analysis of the inorganic crystal structure database //Acta Crystallographica Section B: Structural Science. – 1985. – Т. 41. – №. 4. – С. 244-247.