

КРИСТАЛЛОХИМИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ МИНЕРАЛОВ МЕДИ: НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Кривовичев С.В.

Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский государственный университет

CRYSTAL CHEMISTRY AND CRYSTALLIZATION OF COPPER MINERALS: NEW RESULTS

Krivovichev S.V.

Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University

Благодаря своей относительной дешевизне и уникальным свойствам, медь остается одним из наиболее важных промышленных металлов. Согласно одному сравнению, если электроны являются кровью современной экономики, то медь составляет основной материал ее кровяных сосудов. Физические свойства меди и материалов на ее основе продолжают вызывать повышенный интерес со стороны технологов и материаловедов. Достаточно указать, что именно кислородные соединения меди составляют основу сверхпроводящих материалов. В связи с этим получение новых соединений меди и исследование их структуры и свойств представляет большой интерес с точки зрения создания новых материалов для высокотехнологичных производств. За последние годы интерес к неорганическим соединениям меди весьма возрос и в поисках новых структурных архитектур ученые обратили свое внимание на минералы как соединения природного происхождения. Так, в минералах группы атакамита (паратакамит, гербертсмитит, капелласит) было открыто уникальное с точки зрения магнитных свойств явление образования "спиновых жидкостей".

Минералы меди широко распространены в природе. В настоящее время известно около 400 минеральных видов, содержащих медь и кислород в качестве минералообразующих элементов, что составляет примерно 8% всех известных минералов. Такое разнообразие связано, в первую очередь, со структурно-химическими особенностями катиона Cu^{2+} , который обладает способностью к образованию разнообразных координационных геометрий и приспособлению к составу минералообразующей среды, что приводит к широким вариациям состава и свойств медь-содержащих минералов. Большинство минералов меди образуются в приповерхностных условиях - как правило, в связи с процессами окисления первичных сульфидных рудных минералов. Большинство из этих минералов гидратированы и содержат молекулы воды или гидроксил-ионы, что зачастую затрудняет их исследование. Нередко в оригинальных расшифровках кристаллических структур не удается определить позиции атомов водорода и понять систему водородных взаимодействий, оказывающих непосредственное влияние как на

стабильность кристаллической структуры, так и на особенности кристаллизации.

В докладе будут освещены последние результаты по кристаллохимии минералов меди, полученные с использованием теории функционала электронной плотности (расчет систем водородных связей с помощью программного комплекса CRYSTAL14 (Dovesi et al. 2014)) и теории сложности кристаллических структур (Krivovichev, 2013, 2014). В частности, будут рассмотрены системы $\text{Cu}_4(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_n\text{H}_2\text{O}$ (лангит, роуволфит, познякит, политипы брошантита) и $\text{Cu}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ (боталлакит, атакамит, анатакамит), и др.

Исследования проводились при поддержке гранта РФФ 14-17-00071.

*R. Dovesi, R. Orlando, A. Erba, C. M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, S. Casassa, L. Maschio, M. Ferrabone, M. De La Pierre, P. D'Arco, Y. Noel, M. Causa, M. Rerat, B. Kirtman. CRYSTAL14: A program for the *ab initio* investigation of crystalline solids. *Int. J. Quantum Chem.* 114, pp. 1287-1317 (2014).*

*S. Krivovichev. Structural complexity of minerals: information storage and processing in the mineral world. *Mineral. Mag.*, 77, pp. 275-326 (2013).*

*S. Krivovichev. Which inorganic structures are the most complex? *Angew. Chem. Int. Ed.*, 53, pp. 654-661 (2014).*