

## ЛЕСТНИЦЫ ИНФОРМАЦИИ: ЧТО ОПРЕДЕЛЯЕТ СТРУКТУРНУЮ СЛОЖНОСТЬ МИНЕРАЛОВ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

**Кривовичев С.В. (skrivovi@mail.ru)**

Кольское отделение. Геологический институт Кольского научного центра РАН. Апатиты  
Санкт-Петербургское отделение. Санкт-Петербургский Государственный Университет.

## THE LADDERS OF INFORMATION: WHAT CONTRIBUTES TO THE STRUCTURAL COMPLEXITY OF MINERALS AND INORGANIC COMPOUNDS

**Krivovichev S.V.**

Kola branch. Geological Institute, Kola Science Centre of RAS. Apatity, Russia  
Saint Petersburg branch. Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

Структурная и химическая сложность являются одним из существенных параметров, определяющих особенности поведения минералов и неорганических соединений. Несмотря на то, что структурная сложность напрямую связана с конфигурационно-энтропийными характеристиками, до последнего времени не существовало однозначной универсальной численной характеристики сложности кристаллических структур. В ряде работ нами были развиты методы оценки структурной сложности на основе теоретико-информационных параметров, использование которых в минералогии и геохимии было впервые предложено в работах советских ученых 1970-1980-х гг. (Петров, 1970; Юшкин, 1982). Использование этих оценок позволило соотнести каждому минералу и его структуре конкретные численные характеристики, отражающие сложность его состава и строения (Krivovichev 2012, 2013, 2014, 2017). На этой основе удалось, в частности, показать увеличение химической и структурной сложности минерального мира в процессе его эволюции (Krivovichev et al. 2017).

Интересной проблемой является выявление факторов, определяющих сложность той или иной структуры. Для изучения этой проблемы (и сравнения кристаллических структур, имеющих близкие структурные характеристики) предлагается использовать лестничные информационные диаграммы, показывающие вклад того или иного фактора в сложность общей кристаллической структуры. Одними из ведущих факторов, определяющих сложность, являются: топологическая сложность структурного фрагмента; структурная сложность фрагмента, которая в случае его пониженной симметрии может отличаться от идеальной топологической; коэффициент упаковки, отражающий количество структурных фрагментов в элементарной ячейке; сложность межфрагментарных элементов (например, межслоевого компонента в слоистых структурах); сложность системы водородных связей, определяемая количеством атомов водорода в структуре.

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда 14-17-00071.*

*Петров Т.Г.* О мере сложности геохимических систем с позиций теории информации // ДАН СССР. 1970. Т. 191. № 4. С. 924-926.

*Юшкин Н.П.* Теория и методы минералогии (избранные проблемы). Л.:Наука, 1980.

*Krivovichev S.V.* Topological complexity of crystal structures: quantitative approach // Acta Crystallogr. 2012. Vol. A68. P. 393-398.

*Krivovichev S.V.* Structural complexity of minerals: information storage and processing in the mineral world // Mineral. Mag. 2013. Vol. 77. P. 275-326.

*Krivovichev S.V.* Which inorganic structures are the most complex? // Angew. Chem. Int. Ed. 2014. Vol. 53. P. 654–661.

*Krivovichev S.V.* Structure description, interpretation and classification in mineralogical crystallography // Crystallogr.Rev. 2017. Vol. 23. P. 2–71.

*Krivovichev S.V., Krivovichev V.G., Hazen R.M.* Structural and chemical complexity of minerals: correlations and time evolution // Eur. J. Mineral. 2017. Accepted.