

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМ. М.В. ЛОМОНОСОВА**

**Геологический факультет  
Кафедра кристаллографии и кристаллохимии**

**Кобелева Елена Алексеевна**

# **Курсовая работа**

**«Модулярная кристаллохимия группы ловозерита: поиск новых  
каркасов и их топологические особенности»**

«Modular crystal chemistry of lovozerite group: The search of the new derivatives of the frameworks and  
their topologies »

Заведующий кафедрой:

член-корреспондент РАН, д.х.н.

Н.Н. Еремин

Научные руководители:

Зав. лаб. ФИЦ КНЦ РАН, к.г.-м.н.

С.М. Аксенов

Старший преподаватель, к.х.н.

Т.А. Еремина

Москва 2022

## Оглавление

1. Введение .....	3
2. Переход в псевдокубическую ячейку ловозерита.....	4
3. Локальные свойства и вывод ловозеритовых разбиений. ....	5
4. Рассмотрение структур, выходящих за рамки правила 1. ....	9
5. Методы получения структур группы ловозерита. ....	11
6. Группа ловозерита и ее особенности. ....	12
7. Подсчет путей миграции катионов. ....	15
8. Заключение. ....	15
9. Список литературы. ....	16

## 1. Введение

Кристаллические структуры природных и синтетических циркосиликатов с общей формулой  $\{Zr_m[Si_nO_{3m+2n}]\}^{-2m}$  характеризуются преимущественно изолированными  $ZrO_6$ -октаэдрами, объединенными тетраэдрическими силикатными анионами островного, кольцевого, цепочечного, ленточного, слоистого и каркасного типов [1]. При этом, цирконосиликаты зачастую обладают микропористым строением, что делает их перспективными материалами в качестве катализаторов, сорбентов и ионообменников [1–3]. В частности, ионообменные свойства, а также структурные превращения при дегидратации экспериментально изучались для терскита  $Na_4[Zr[Si_6O_{15}]](OH)_2 \cdot H_2O$  [4], эльпидита  $Na_2\{Zr[Si_6O_{15}]\} \cdot 3H_2O$  [5] и др. Теоретический анализ путей миграции катионов на основе топологических методов был также выполнен для структур келдышита  $NaH\{Zr[Si_2O_7]\}$  и паракелдышита  $Na_2\{Zr[Si_2O_7]\}$  [6].

Группа ловозерита объединяет природные и синтетические представители с общей формулой  $A_3B_3C_2M[Si_6O_{18}]$ , где  $A = Na, Ca$ ;  $B = Na, Ca$ ;  $C = Mn, Ca, Fe, Na$ ;  $M = Zr, Ti, Ca$ . Первым соединением с ловозеритовой структурой был непосредственно минерал ловозерит, открытый советским минералогом В.И. Герасимовским в Ловозерском щелочном массиве незадолго до начала Великой Отечественной войны [7]. Первая расшифровка кристаллической структуры ловозерита была проведена В.В. Илюхиным и Н.В. Беловым в 1960 г. [8]. Впервые описание структур ловозеритового семейства в терминах кубических блоков было предложено в работе Черницовой и др. [9] — одной из жемчужин отечественной кристаллохимической литературы. Позднее Малиновский и др. [10] проанализировали особенности симметрии ловозеритовых структур.

Недавние находки новых минералов с ловозеритовой структурой [11–13] реанимировали интерес к этой группе со стороны минералогов и геохимиков. Краткий обзор комбинаторики ловозеритовых структур был представлен в работе [14].

Целью работы являлось:

- Поиск координат всех возможных каркасов ловозеритовых разбиений
- Изучение ионообменных свойств семейства ловозерита
- Поиск в базе данных новых соединений, которые реализуются в подобных каркасах

Автор выражает благодарность своим научным руководителям, а также старшему научному сотруднику лаборатории арктической минералогии и материаловедения к.г.-м.н. Степенщикову Д.Г. и генеральному директору ФИЦ КНЦ РАН член-корреспонденту РАН д.г.-м.н. Кривовичеву С.В. за помощь и плодотворную дискуссию на разных этапах выполнения работы.

## 2. Переход в псевдокубическую ячейку ловозерита.

Структура природного ловозерита  $\text{Na}_2\text{Zr}[\text{Si}_6\text{O}_{12}(\text{OH})_6]$  формируется из кремниевых  $\text{SiO}_4$ -тетраэдров и циркониевых  $\text{ZrO}_6$ -октаэдров таким образом, что часть атомов кислорода в структурном типе ловозерита оказывается «немостиковой» или «апикальной» (т.е. связанной лишь с одним атомом кремния), что существенным образом отличает данный структурный тип от других цирконосиликатов с преимущественно «классическими» каркасами, у которых все кислороды являются двухсвязными [15].

Поскольку структура ловозерита была найдена только в моноклинной сингонии и до сих пор не было найдено триклинного аналога, то мы продолжаем работать с идеализированной моделью структуры. В таблице 1 приведены данные о реальной структуре ловозерита – моноклинного, а также его высокосимметричного аналога – триклинной структуры ловозерита. Моноклинную ячейку ловозерита обозначим – ловозерит М, триклинную же – ловозерит Т.

Таблица 1. Характеристика простейшей (псевдокубической) ячейки [9].

Минерал	Отношение к реальной ячейке	Параметры ячейки						V, Å <sup>3</sup>	Матрица перехода от реальной к простейшей ячейке
		a(Å)	b(Å)	c(Å)	$\alpha,^\circ$	$\beta,^\circ$	$\gamma,^\circ$		
Ловозерит М	Псевдоячейка	7.31	7.31	7.33	88.2	88.2	88.4	391.3	$\begin{matrix} 1/2 & -1/2 & 0 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix}$
Ловозерит Т	Истинная	7.31	7.31	7.31	88.2	88.2	88.2	390.2	-

По сколько до сих пор также не было расшифровано тригональных структур минералов, то поэтому мы также исходили из идеализированной структурной модели с симметрией  $R\text{-}3m$  и идеальных координат атомов, отнесенных к ребрам простейшей ячейки. Также мы идеализированную модель структуры рассматриваем с точки зрения ромбоэдрической ячейки и искусственно доводим параметры ячейки до кубической, чтобы была возможность рассматривать структуру как блок, представляющий собой куб, шесть октантов которого заселены кремнекислородными тетраэдрами  $\text{SiO}_4$  — тетраэдрами, в центре которых расположены атомы кремния, а по вершинам — атомы кислорода (Рис. 1, а). Блоки устроены таким образом, что “пустые” октанты (не занятые тетраэдрами, мы

будем называть их пустыми октантами) расположены вдоль телесной диагонали куба (Рис. 1, б). Тетраэдры  $\text{SiO}_4$ , занимающие остальные шесть октантов, образуют шестичленное кремнекислородное кольцо  $\text{Si}_6\text{O}_{18}$ .

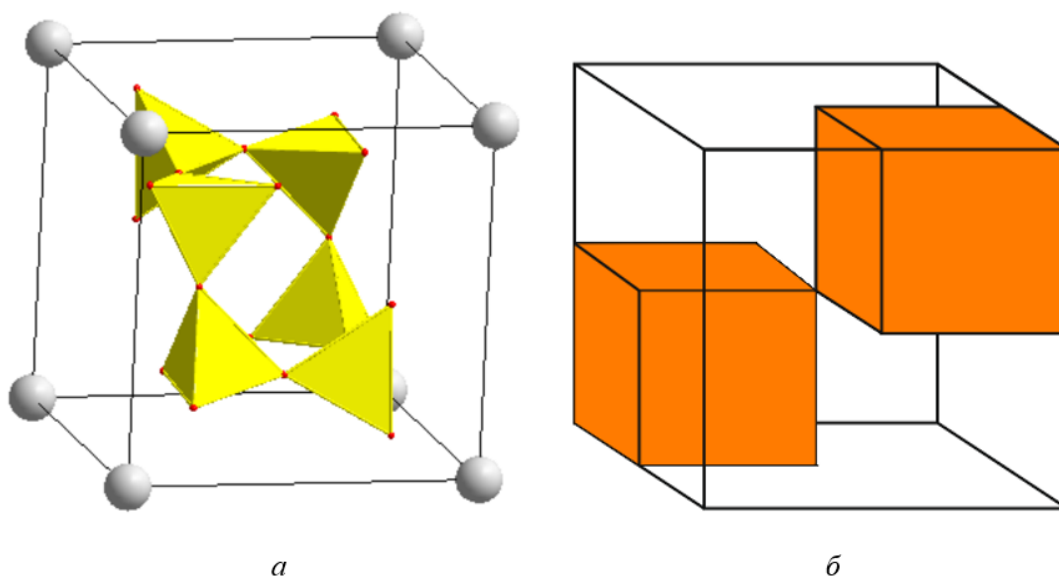


Рис. 1. Кристаллическая структура ловозерита: а — отдельный блок; б — его схематическое изображение (рыжие октанты не заняты кремнекислородными тетраэдрами).

### 3. Локальные свойства и вывод ловозеритовых разбиений.

В ловозеритовых соединениях кубические блоки укладываются без промежутков и наложений, образуя тем самым разбиения пространства на равные кубы.

Анализ экспериментальных данных показывает, что ловозеритовые разбиения обладают следующими свойствами [16]:

1°. Разбиения изоэдральны, т.е. все блоки являются симметрично эквивалентными относительно пространственных групп соответствующих кристаллических структур.

2°. Соседние блоки могут объединяться как целыми гранями, так и прямоугольными половинами граней (Рис. 2). Иными словами, ловозеритовые разбиения в общем случае не являются нормальными разбиениями, или разбиениями «грань к грани».

3°. При любом объединении блоков октанты соседних блоков объединяются общими вершинами, но никогда общими ребрами или гранями. Из этого следует, что тип объединения блоков однозначно определяет расположение в них октантов. При объединении по граням ориентировка соседних блоков одинакова (Рис. 2, б), тогда как при объединении блоков половинами граней ориентировка меняется, причем строго однозначно (Рис. 2, в).

Максимальной группой симметрии блока является точечная группа  $\bar{3}m$  (Рис.1). Первые обклейки можно предварительно ограничить первыми субобклейками, которые мы

определим как совокупность блоков, имеющих с центральным блоком общую грань или половину грани, как показано на Рис. 2 [16].

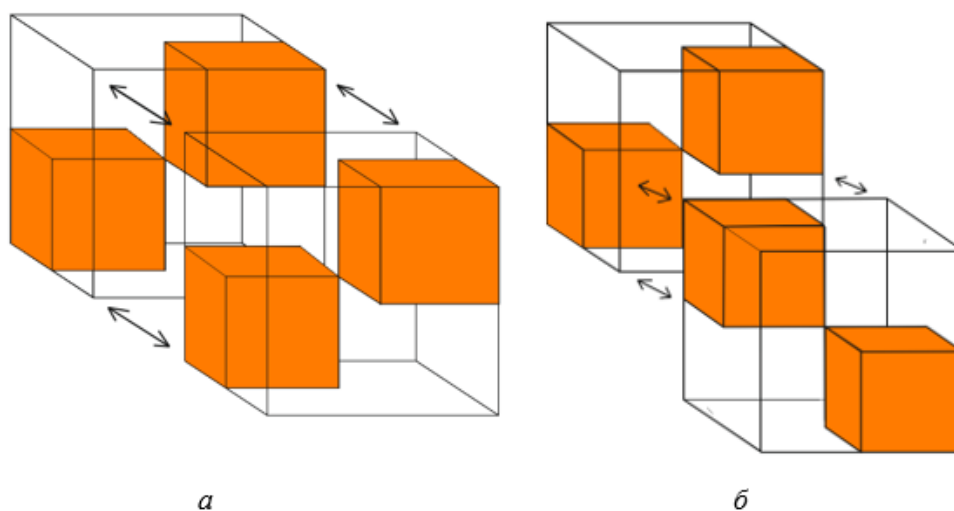


Рис. 2. Схематические изображения «разрешенных» способов объединения блоков в кристаллических структурах. Рыжие октанты являются занятыми кремнекислородными тетраэдрами.

В работе [16] путем перебора было получено семь типов диаграмм Шлегеля, которые соответствуют семи возможным типам первых обклеек (Рис. 3). Символ 0, обозначаем грань, которая соединена с целой гранью. Грань, соединённую с половиной грани – 1. Для блока с четырьмя гранями, которые соединены с другими целыми гранями, и двумя, соединенными с половиной грани, существуют 2 варианта: линии разреза параллельны (вариант 0101) и линии разреза перекрещиваются (вариант 0102).

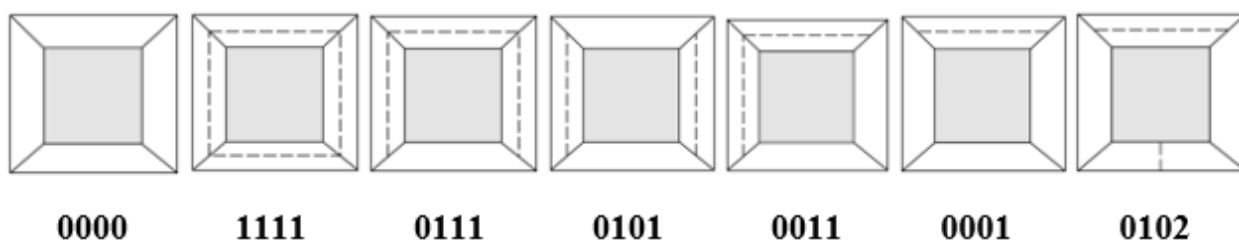
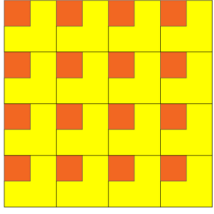
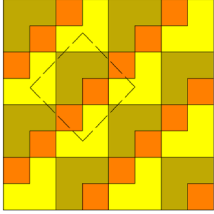
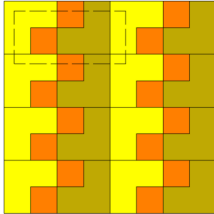
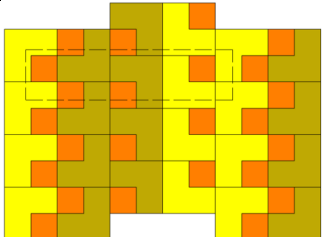
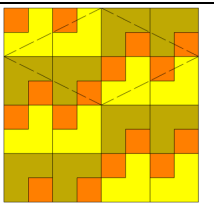
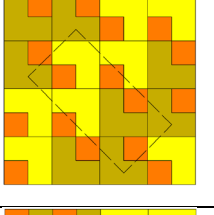
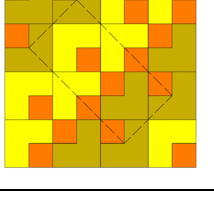


Рис. 3. Возможные типы диаграмм Шлегеля кубических блоков в ловозеритовых разбиениях.

Для каждого типа структур укажем пространственную группу  $G$ , параметры элементарной ячейки (как функцию от длины  $a$  ребра кубического блока), число блоков на элементарную ячейку ( $n_{total}$ ), а также рисунок разбиения первых субобклеек с учетом свойства  $3^\circ$ . Параметры всех возможных ловозеритовых структур приведены в табл. 1

Таблица 2. Характеристики ловозеритовых разбиений и структур (ДШ — тип диаграммы Шлегеля;  $\tau$  — тип разбиения;  $\tau'$  — тип разбиения с учетом свойства  $3^\circ$ ,  $G$  — пространственная группа,  $n_{total}$  — число блоков на элементарную ячейку).

ДШ	$\tau$	$\tau'$	$G$	Размеры элем. яч.	$n_{total}$	Рисунок
0000	-	-	$R\bar{3}m$	$a \times a \times a$	1	
1111	-	-	$Pmnn$	$a\sqrt{2} \times a\sqrt{2} \times a$	2	
0101	-	-	$P2_1/c$	$a \times a \times 2a, \beta=90^\circ$	2	
0102	-	-	$P4_12_12$	$a \times a \times 4a$	4	
0111	-	-	$P1c1$	$a\sqrt{5} \times a\sqrt{5} \times a$	4	
0011	$0011_1$	$0011_{1a}$	$Pbnn$	$a\sqrt{2} \times 2a\sqrt{2} \times a$	4	
		$0011_{1b}$	$Pmnb$	$a\sqrt{2} \times 2a\sqrt{2} \times a$	4	

	0011 <sub>2</sub>	-	<i>Pnmn</i>	$2a\sqrt{2} \times 2a\sqrt{2} \times a$	8	
0001	0001 <sub>1</sub>	-	<i>P2<sub>1</sub>/c</i>	$a \times a \times 4a,$ $\beta=90^\circ$	4	
	0001 <sub>2</sub>	-	<i>P4<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2</i>	$a \times a \times 8a$	8	



#### 4. Рассмотрение структур, выходящих за рамки правила 1.

При сохранении всех свойств 1–3°, всего существует десять возможных типов разбиений. Вместе с тем остается интересным вопрос – какими принципиально могут быть разбиения пространства при несоблюдении первого свойства, т. е. отсутствие однозначности определения трехмерной периодической структуры первой субобклейкой. Анализ показывает, что многообразие таких разбиений хотя и более обширно, но тем не менее подчиняется ограниченному набору принципов построения.

Отойдем от метода построения первой обклейки отдельного блока (далее просто блоки) и будем рассматривать разбиения послойно. Как и на иллюстрациях в [16] будем различать светло-жёлтые блоки, стыкуемые на одном уровне и тёмно-жёлтые блоки, находящиеся выше слоя светло-жёлтых блоков на половину длины ребра блока.

Рассмотрим отдельный слой, в котором отсутствуют темно-желтые блоки. Если блоки стыкуются только по полным граням, то возможен единственный тип слоя (Рис. 4, *a*). Если же в таком слое хотя бы одна пара блоков стыкуется по половине грани, то каждый блок из этой пары порождает бесконечные параллельные цепочки блоков (Рис. 4, *б*). К этим цепочкам могут примыкать другие бесконечные цепочки, стыкуемые с данными по целым или по половине граней. В результате, из белых блоков можно создать только один обобщенный тип слоя, а именно набор бесконечных лент из блоков, каждая из которых стыкуется с соседней по половинам граней. Такие слои можно кодировать последовательностью чисел, каждое из которых указывает толщину в блоках соответствующей ленты. Например, последовательность (2, 2, 1, 3) соответствует слою, показанному на рис. 4, *в*. В рамках данной нотации слой на рис. 1, *a* соответствует единственной ленте бесконечной ширины, т. е. последовательности ( $\infty$ ).

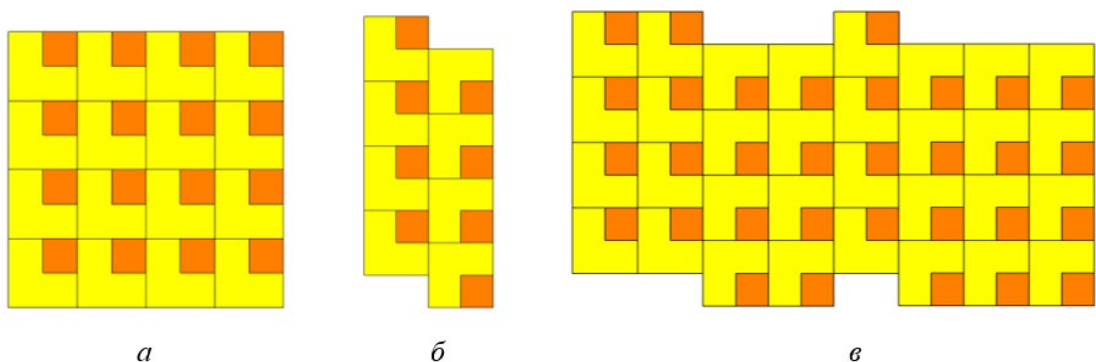


Рис. 4. *a* – слой из блоков, стыкуемых только по целым граням, *б* – две бесконечные цепочки блоков, состыкованные по половинам граней, *в* – частный случай обобщенной структуры слоя, соответствующий последовательности (2, 2, 1, 3)

Теперь рассмотрим место тёмно-желтых блоков на слое. Очевидно, что при виде на слой сверху, тёмно-жёлтые блоки могут стыковаться с светло-жёлтыми только по целым сторонам (2-е правило), что возможно только во внутренних цепочках каждой ленты. При этом число и порядок расположения серых блоков абсолютно произволен (рис. 5, *а*), а их ориентировка задается 3-м правилом однозначно. Для крайних цепочек лент замена хотя бы одного светло-жёлтого блока на серый влечет замену всех светло-жёлтых блоков данной, а также смежной с ней цепочки соседней ленты на темно-жёлтые блоки (рис. 5, *б*). При этом, если соседняя лента состоит только из одной цепочки, то замене на тёмно-жёлтые блоки подлежат и светло-жёлтые блоки смежной с ней крайней цепочки третьей ленты (рис. 5, *в*).

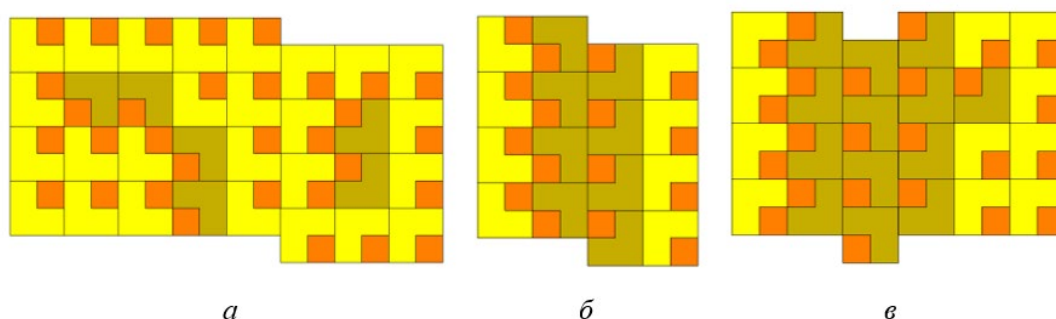


Рис. 5. *а* – произвольная замена светло-жёлтых блоков на тёмно-жёлтые внутри каждой ленты для слоя (5, 3), *б* – замена белых блоков на серые у крайних цепочек слоя (2, 2), *в* – замена белых блоков на серые у крайних цепочек слоя (2, 1, 3), при этом также на третьей ленте во внутренней цепочке один белый блок заменен на серый.

Рассмотренные принципы демонстрируют все потенциальное разнообразие строения отдельного слоя разбиения пространства на блоки. Главной особенностью такого строения является ленточная структура слоя. Хотя в отдельных случаях это не так очевидно. В рамках данного подхода рассмотрим примеры из [16]. В таблице 2 [16] разбиения для диаграмм 0000, 1111, 0101 и 0111 являются случаями ленты ( $\infty$ ) без замены светло-жёлтых блоков, с шахматной, чередующейся полосчатой и прямоугольно-шахматной заменой светло-жёлтых блоков на тёмно-жёлтых соответственно, а для диаграммы 0102 – случаем замены светло-жёлтых блоков на тёмно-жёлтых в крайних цепочках чередующихся лент ширины 2. На рис. 5 [16] для ленты ( $\infty$ ) показаны три случая упорядоченной замены светло-жёлтых блоков на тёмно-жёлтые. Отметим здесь, что шахматный порядок замены допускает «клетки» любого размера. Наконец, на рис. 6 показан еще один способ чередующейся полосчатой замены белых блоков ленты ( $\infty$ ) на

тёмно-жёлтых. Здесь также допустима любая ширина как светло-жёлтых, так и тёмно-жёлтых полос. Нижнее же разбиение на рис. 6 указано неверно (нарушено 2-е правило).

Структура второго и всех последующих слоев разбиения пространства также подчиняется вполне определенным принципам. Самый главный из них заключается в том, что последующие слои не допускают произвольного расположения тёмно-жёлтых блоков – их позиции всецело задаются структурой первого слоя. Разделим цепочки всех лент первого слоя на две группы: первая содержит цепочки, включающие в себя хотя бы один тёмно-светло-жёлтый блок, а также цепочки смежные с такими цепочками, вторая группа содержит цепочки из светло-жёлтых блоков, не смежных с тёмно-жёлтыми блоками (рис 6). Тогда в следующем слое над цепочками первой группы будут располагаться точно такие же цепочки. Цепочки же второй группы допускают два способа пристыковки к ним светло-жёлтых блоков – по целой или по половине грани, причем первый случай означает по сути полное копирование первого слоя. Если во второй группе число цепочек условно равно  $m$ , то без учета симметрии, второй слой допускает  $2^m$  вариантов структуры (рис. 6). Если  $m=0$ , то второй и все последующие слои полностью копируют первый, т. е. разбиение пространства в данном вырожденном случае задается полностью структурой первого слоя.

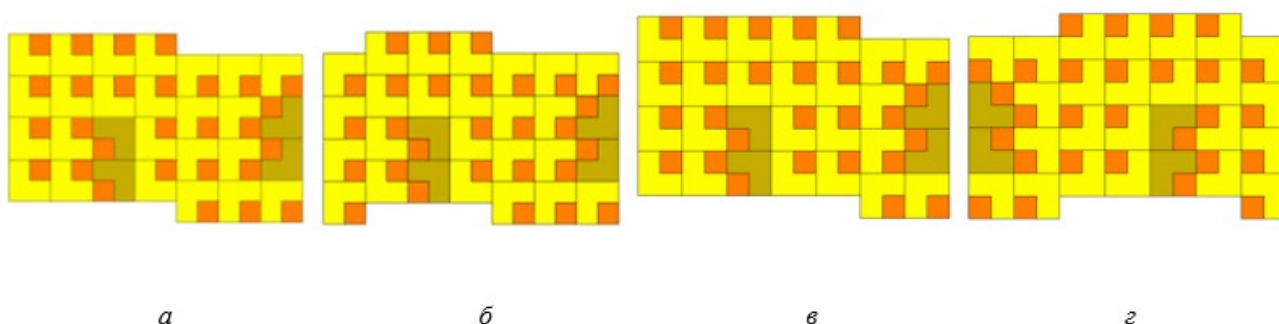


Рис. 6. *a* – пример 1-го слоя и соответствующий вариант 2-го слоя; *б, в, з* – остальные варианты 2-го слоя, полученные смещением цепочек второй группы (1-я и 5-я цепочки слева). Таким образом, всего существует  $2^2=4$  варианта структуры 2-го слоя для данного на рис. 3, *a* 1-го слоя.

### 5. Методы получения структур группы ловозерита.

С помощью программы Vesta (Visualisation for Electronic and Structural Analysis) мы параметры псевдокубической ячейки ловозерита путем преобразования доводим до кубической, при этом искусственным образом мы понижаем симметрию до P1. Там же мы добавляем новые фазы, обладающие нужными нам позициями.

Также, использовали полученную ячейку и преобразовали ее в соответствии с правилами 1-3°. Наделили полученные ячейки новыми параметрами и также симметрией P1 программе Diamond.

После этого мы выбрали наименьшую примитивную ячейку и нашли её максимальную симметрию. Это легко осуществимо с помощью сайта Materials Project. Что было проверено нашими теоретическими расчётами.

В базе данных ICSD мы провели поиск совпадений полученных структур с реальными соединениями. Не смотря на привнесение в [16]. новых данных, мы не смогли найти принципиально новые данные по соединениям.

### 6. Группа ловозерита и ее особенности.

Рассмотрим группу ловозерита по типам разбиений.

0000 (Табл. 1), (Рис. 7, а). Самый простой вариант обклейки тот, при котором все блоки прилегают друг к другу целыми гранями. Такой простейший принцип строения субобклейки является наиболее распространенным среди ловозеритовых структур. Из минералов в нем кристаллизуются тисиналит, ловозерит, цирциналит, казаковит, комбеит, капустинит, тонендит илитвинскит [11, 17]. Из синтетических веществ этому типу принадлежат трехмерный ионный проводник  $\text{Na}_{8-x}\text{HxZrSi}_6\text{O}_{18}$  [18],  $\text{Na}_5(\text{Mn}, \text{Na})_3\text{Mn}[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  [19],  $\text{Na}_6\text{Sr}_3[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  [20] и др.

1111 (Табл. 1), (Рис. 7, б). Этот тип упаковки может быть представлен как структура, состоящая из одномерных стержней связанных гранями блоков и сдвинутых друг относительно друга на половину грани. Полное разбиение определяется первой субобклейкой однозначно. Такой характер имеет структура имандрита  $\text{Na}_{12}\text{Ca}_3\text{Fe}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]_2$  [21],  $\text{Na}_6\text{Cd}_3[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  [22],  $\text{Na}_5(\text{Mn}, \text{Na})_3\text{MnSi}_6\text{O}_{18}$  [23] и др.

0111 (Табл. 1), (Рис. 7, в). В данном случае структура также определяется однозначно. Разбиение может быть представлено как состоящее из двойных стержней связанных целыми гранями блоков. Стержни смещены друг относительно друга на половину грани. В реальных веществах такой тип разбиения пока не найден.

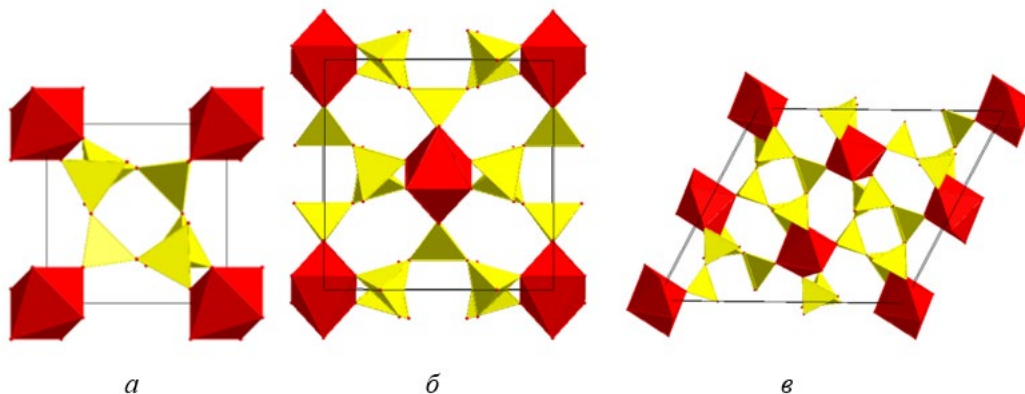


Рис. 7. Структуры группы ловозерита с типами разбиений Шлегеля:

а – 0000, б – 1111, в – 0111.

0101 и 0102 (табл. 2). В данных типах субобклейки центральный блок имеет зону из четырех граней, по которым объединение блоков происходит по целым граням. Это определяет существование двумерных сплошных слоев с гранным объединением кубических блоков.

Структуры, порождаемые субобклейками 0101 и 0102, отличаются только последовательностью слоев. Разбиение, генерируемое обклейкой 0101, является двухслойным (расположение третьего слоя в точности повторяет расположение первого), тогда как разбиение, производное от обклейки 0102, является четырехслойным (только пятый слой повторяет первый). Таким образом, полученные структуры можно назвать политипными с тем условием, что политипы однозначно определяются первыми субобклейками модулей (образование неупорядоченных политипов невозможно). Двухслойное разбиение, производное от обклейки 0101, соответствует расположению блоков в структуре  $\text{Na}_5(\text{Na}_{0.5+x}\text{Ca}_{0.5-x})_2(\text{Nd}_x\text{Ca}_{1-x})_2(\text{Si}_6\text{O}_{18})$  [24].

Структура, соответствующая четырехслойному разбиению (субобклейка 0102), пока не обнаружена. Можно предположить, что причиной этому является большая сложность разбиения (число слоев равно 4) по сравнению с двухслойным разбиением. Это разбиение интересно тем, что оно обладает винтовой осью симметрии четвертого порядка (рис. 9, а).

0001 (рис. 8, в-г). Первая субобклейка этого типа — единственная субобклейка, допускающая неупорядоченные структуры. Из шести граней кубического блока только одна участвует в “половинном” объединении блоков. Этот факт отражается в том, что разбиения с субобклейкой 0001 состоят из двойных слоев, в которых блоки связаны целыми гранями. Соседние двойные слои смещены друг относительно друга на половину грани. При этом возможны два типа взаимно перпендикулярных смещений. Отметим принципиальное различие субобклеек  $0001_1$  и  $0001_2$ . При условии равенства первых субобклеек первая позволяет два разбиения, вторая — бесконечное множество. При этом для  $0011$  путь развития системы определяется сразу в момент построения первой обклейки, тогда как в случае 0001 система не детерминирована условием равенства первых обклеек.

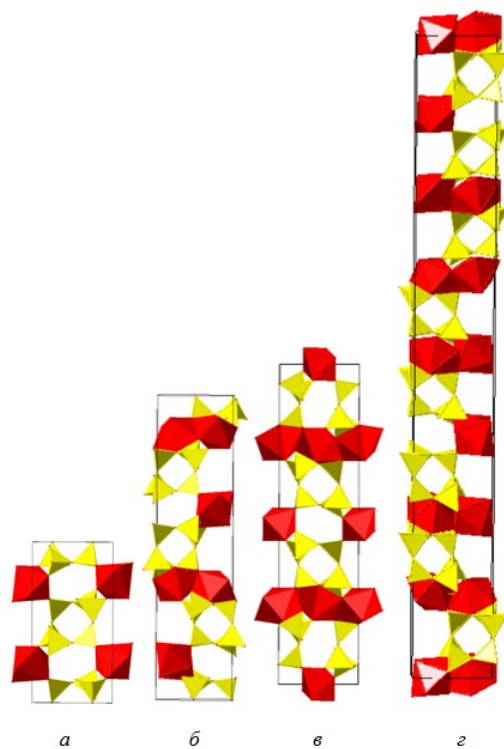


Рис. 8. Структуры группы ловозерита с типами разбиений Шлегеля:  
 а – 0101, б – 0102, в – 0001<sub>1</sub>, г – 0001<sub>2</sub>.

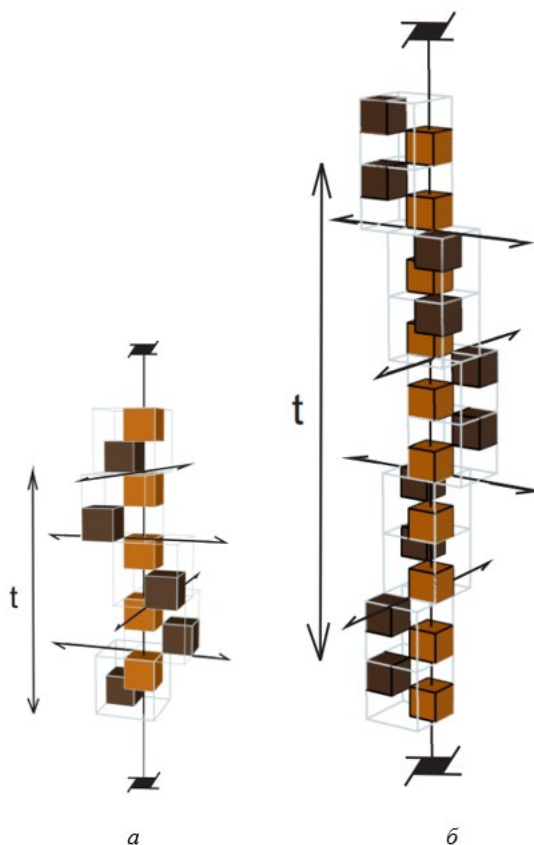


Рис. 9. Взаимное расположение блоков в ловозеритовом разбиении с диаграммой Шлегеля вдоль винтовой оси симметрии  $4_1(t$  – трансляция вдоль оси), для разбиений типа

$a$ -0102,  $b$ -0001<sub>2</sub>. Для каждого блока верхние октанты показаны темно-коричневым, а нижние – светло-коричневым.

0011 (рис. 5). Субобклейка имеет две смежные грани с разрезами. Анализ показывает, что такая субобклейка может генерировать два разных типа разбиения, 00111 и 00112, различающихся топологией первых обклеек. Первое разбиение состоит из тенек с зигзагообразным сечением, внутри которых блоки связаны гранями, тогда как второе разбиение образовано четверными стержнями из связанных целыми гранями блоков.

Важно отметить, что выбор того или иного разбиения происходит на стадии формирования первой обклейки (или второй субобклейки) — именно в этот момент определяется развитие системы, т.е. та глобальная структура, которая будет результатом роста. Отметим, что вариант 0011<sub>1b</sub> был обнаружен в реальном мире неорганических веществ — именно он соответствует структуре коашвита  $\text{Na}_6(\text{Ca}, \text{Mn})_{1+0.5x}(\text{Fe}_{3+x}\text{Ti}_{1-x})[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  [41]. Второй тип разбиения в реальных структурах пока не наблюдался.

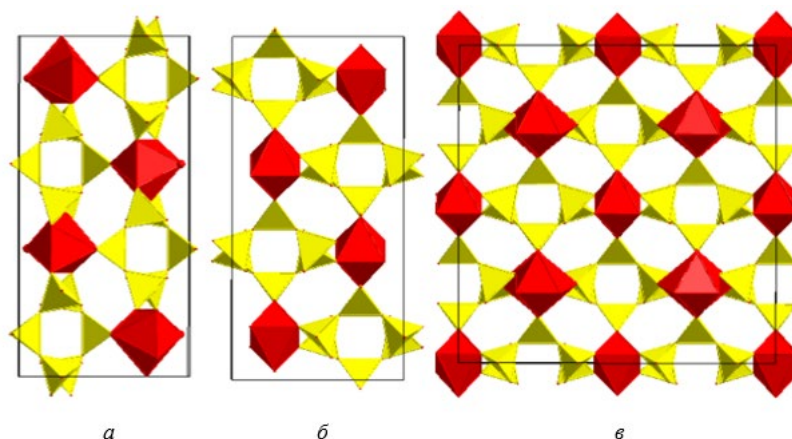


Рис. 10. Структуры группы ловозерита с типами разбиений Шлегеля:  
 $a$  – 0011<sub>1a</sub>,  $b$  – 0011<sub>1b</sub>,  $v$  – 0011<sub>2</sub>.

### 7. Подсчет путей миграции катионов.

Были посчитаны пути миграции для  $\text{Li}^+$  и более тяжелых катионов, однако только для лития получились разные каналы проводимости. (Таблица 3).

Таблица 3. Расчёт путей миграции для  $\text{Li}^+$ , где ДШ- диаграмма Шлегеля.

ДШ	0000	1111	0101	0102	0111	0011(1a)	0011(1b)	0011(2)	0001(1)	0001(2)
$\text{Li}^+$	3D	0D	2D	2D	3D	2D	2D	1D	2D	2D

Результат показывает, что некоторые структуры для группы ловозерита являются перспективными материалами для литиевых аккумуляторов.

### 8. Заключение.

Локальный анализ ловозеритовых разбиений, построенных с учетом свойств 1–3°, позволил вывести десять возможных типов структур на основе кубических блоков. Из них

в природе реализуются только четыре. Мы смогли дополнить данные о группе ловозерита, построив модели структур с помощью различных программ, также посчитав каналы проводимости.

По нашему мнению данная тема является весьма перспективной для понимания процессов образования кристаллов и других упорядоченных атомных структур в природных и лабораторных условиях.

### 9. Список литературы.

1. Zubkova N.V., Pushcharovsky D.Yu. // *Z. Kristallogr.* 2008. V. 223. P. 98.
2. Чуканов Н.В., Пеков И.В., Расцветаева Р.К. // *Успехи химии.* 2004. Т. 73. № 3. С. 227.
3. Rocha J., Lin Z. // *Rev. Mineral. Geochem.* 2005. V. 57. P. 173.
4. Чуканов Н.В., Казаков А.И., Пеков И.В., Григорьева А.А. // *Журнал физической химии.* 2010. Т. 84. № 12. С. 2353.
5. Зубкова Н.В., Ксенофонтов Д.А., Кабалов Ю.К. и др. // *Неорганические материалы.* 2011. Т. 47. № 5. С. 575.
6. Kabanova N.A., Panikorovskii T.L., Shilovskikh V.V. et al. // *Crystals.* 2020. V. 10. Art. 1016.
7. Герасимовский В.И. Ловозерит — новый минерал // *ДАН СССР.* 1939. Т. 25, № 9. С. 751–754.
8. Илюхин В.В., Белов Н.В. Кристаллическая структура ловозерита // *ДАН СССР.* 1960. Т. 131, № 1. С. 176–179.
9. Черницова Н.М., Пудовкина З.В., Воронков А.А., Капустин Ю.Л., Пятенко Ю.А. О новом кристаллохимическом семействе ловозерита. // *Зап. Всесоюз. минерал. о-ва.* 1975. № 1. С. 18–27.
10. Malinovsky Yu.A., Burzlaff H., Rothammel W. Structures of the lovozerite type—a quantitative investigation// *Acta crystallogr. B.* 1993. V. 49. P. 158–164.
11. Grey I.E., Macrae C.M., Mumme W.G., Pring A. Townendite,  $\text{Na}_8\text{ZrSi}_6\text{O}_{18}$ , a new uranium-bearing lovozerite group mineral from the Il'imaussaq alkaline complex, Southern Greenland // *Amer. Mineral.* 2010. V. 95. P. 646–650.
12. Пеков И.В., Екименкова И.А., Чуканов Н.В., Задов А.Е., Ямнова Н.А., Егоров-Тисменко Ю.К. Литвинскит  $(\text{Na}, \text{Mn})\text{Zr}[\text{Si}_6\text{O}_{12}(\text{OH}, \text{O})_6]$  — новый минерал из группы ловозерита // *Зап. Рос. минерал. о-ва.* 2000. № 1. С. 45–53.
13. Пеков И.В., Чуканов Н.В., Ямнова Н.А., Егоров-Тисменко Ю.К., Задов А.Е. Новый минерал капустинит,  $\text{Na}_{5.5}\text{Mn}_{0.25}\text{ZrSi}_6\text{O}_{16}(\text{OH})_2$ , из Ловозерского массива (Кольский полуостров) и новые данные по генетической кристаллохимии группы ловозерита // *Зап. Рос. минерал. о-ва.* 2003. № 6. С. 1–14.
14. Shevchenko V.Ya., Krivovichev S.V., Mackay A.L. Cellular automata and local order in the structural chemistry of the lovozerite group minerals // *Glass Phys. Chem.* 2010. V. 36. P. 1–9.



15. Pyushin GD, Blatov VA. // Acta Crystallogr B. 2002, V. 58. P. 198-218.
16. Кривовичев С.В. Локальный подход и теория ловозеритовых структур. // Труды математического института им. В.А. Стеклова. 2015. т. 288. с. 120–132.
17. Zolotarev A.A., Krivovichev S.V., Yakovenchuk V.N., Armbruster T., Pakhomovsky Ya.A. Trigonal members of the lovozerite group: A re-investigation // Minerals as advanced materials. I / Ed. by S.V. Krivovichev. Berlin: Springer, 2008. P. 79–86.
18. Илюшин Г.Д., Демьянец Л.Н. Ионные проводники в классе Na, Zr-силикатов. Новое семейство трехмерных проводников — кристаллы типа ловозерита  $\text{Na}_{8-x}\text{HxZrSi}_6\text{O}_{18}$  // Кристаллография. 1986. Т. 31, № 1. С. 76–81.
19. Отрощенко Л.П., Симонов В.И., Белов Н.В. Кристаллическая структура натрий-марганцевого синтетического метасиликата  $\text{Na}_5(\text{Mn}, \text{Na})_3\text{Mn}[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  // ДАН СССР. 1973. Т. 208, № 4. С. 845–848.
20. Kahlenberg V. Preparation and crystal structure of  $\text{Na}_2\text{SrSi}_2\text{O}_6$ —a cyclosilicate with perovskite-type features. // J. Alloys Compd. 2004. V. 366. P. 132–135
21. Черницова Н.М., Пудовкина З.В., Воронков А.А., Илюхин В.В., Пятенко Ю.А. Имандрит  $\text{Na}_{12}\text{Ca}_3\text{Fe}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]_2$  — представитель новой ветви в структурном семействе ловозерита // ДАН СССР. 1980. Т. 252, № 3. С. 618–621.
22. Симонов М.А., Егоров-Тисменко Ю.К., Белов Н.В. Кристаллическая структура Na, Cd-силиката  $\text{Na}_2\text{CdSi}_2\text{O}_6 = \text{Na}_6\text{Cd}_3[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  // ДАН СССР. 1967. Т. 175, № 1. С. 80–83.
23. Отрощенко Л.П., Симонов В.И., Белов Н.В. Уточнение кристаллических структур двух Mn-силикатов  $\text{Na}_2\text{Mn}_2\text{Si}_2\text{O}_7$  и  $\text{Na}_5(\text{Mn}, \text{Na})_3\text{MnSi}_6\text{O}_{18}$  // ДАН СССР. 1982. Т. 265, № 1. С. 76–79.
24. Тамазян Р.А., Малиновский Ю.А. Кристаллическая структура и микродвойникование  $\text{Na}_5(\text{Na}_{0.5+x}\text{Ca}_{0.5-x})_2(\text{Nd}_x\text{Ca}_{1-x})_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$  // Кристаллография. 1989. Т. 34, № 2. С. 310–315.