

**Роль анионных вакансий в структурах тетраэдритов: обзор существующих концепций и направления дальнейших изысканий.**

**Научный руководитель – Марченко Екатерина Игоревна**

**Кобелева Елена Алексеевна**

*Аспирант*

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

*E-mail: kobeleva.elena.2001@gmail.com*

Тетраэдриты представляют собой уникальный класс соединений, кристаллохимия которых на протяжении десятилетий остается в фокусе внимания исследователей [1, 2]. Группа тетраэдрита – это группа минералов со сложной кристаллохимией, имеющие общую формулу  $A_6B_4C_2D_4Y_{12}Z$ , где  $A = Cu^+, Ag^+, \square$  (вакансия) и  $(Ag_6)^{4+}$ ;  $B = Cu^+, Ag^+$ ;  $C = Zn^{2+}, Fe^{2+}, Hg^{2+}, Cd^{2+}, Mn^{2+}, Cu^{2+}, Cu^+$  и  $Fe^{3+}$ ;  $D = Sb^{3+}, As^{3+}, Bi^{3+}$  и  $Te^{4+}$ ;  $Y = S^{2-}$  и  $Se^{2-}$ ;  $Z = S^{2-}, Se^{2-}$  и  $\square$  (вакансия) [4]. Интерес к ним обусловлен как сложным изоморфизмом, охватывающим практически все катионные позиции, так и перспективами практического использования в качестве термоэлектрических материалов [3]. При этом подавляющее большинство работ традиционно фокусируется на катионных замещениях [3, 5], тогда как роль анионной подрешетки, и в особенности — возможных вакансий в позициях серы, изучена в значительно меньшей степени.

На основании проведенного анализа можно выделить несколько ключевых направлений для дальнейших исследований. Прежде всего, будут пересмотрены методы обработки экспериментальных дифракционных данных, уточнены заселенности анионных позиций в свободном режиме, исключив априорные ограничения на суммарное содержание серы [2]. Кроме того, будут использованы современные методы топологического анализа кристаллических структур, такие как метод полиэдров Вороного-Дирихле [1, 2]. Расчет эффективных объемов атомов серы в различных кристаллографических позициях предоставит объективный критерий для оценки «стесненности» структуры и поможет определить пороговые значения объемов полиэдров Вороного-Дирихле, указывающие на значительный дефицит анионов [2].

#### **Источники и литература**

- 1) Кривовичев С.В., Филатов С.К. Состав, строение, систематика и геометрические характеристики комплексов анионоцентрированных тетраэдров // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия: Физика твердого тела. 2001. № 1. С. 49-56.
- 2) Марченко Е.И., Еремин Н.Н. Кристаллохимический анализ анионной нестехиометрии в минералах группы тетраэдрита методом полиэдров Вороного-Дирихле // Журнал структурной химии. 2023. Т. 64. № 5. С. 1-10.
- 3) Kharbish S., Giester G., Beran A. Contribution to the crystal structures of tennantite and bournonite // Neues Jahrbuch für Mineralogie - Abhandlungen. 2010. Vol. 187. No. 1. P. 1-10.
- 4) Yavuz F. WinTtrclas, A Windows program for tetrahedrite-group minerals // Periodico di Mineralogia. 2024. Vol. 93. No. 2. P. 127-145.
- 5) Kostov-Kytin V. Review of tetrahedrites from Bulgarian deposits in the light of changes in nomenclature and classification of these minerals taken in 2019 // Review of the Bulgarian Geological Society. 2020. Vol. 81. No. 1. P. 3-15.