

# КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКАЯ И КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ БАЗА ДАННЫХ ДЛЯ МИНЕРАЛОВ И ИХ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ (WWW-МИНКРИСТ)

А. В. Чичагов, Д. А. Варламов

Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка

МИНКРИСТ (MinCryst) — Кристаллографическая и Кристаллохимическая База данных, развивающаяся в двух вариантах: **локальном** (отдельный ПК) — с 1985 г., и, с 1997 г., в **сетевом (WWW)**: <http://database.iem.ac.ru/mincryst>. Сетевой вариант (WWW-МИНКРИСТ), в свою очередь, также развивается в двух вариантах: русскоязычном и англоязычном с соответствующими интерфейсами. Информационный Фонд локального и сетевого вариантов МИНКРИСТА идентичен и к настоящему времени насчитывает **6330 записей** по природным и синтетическим минералам, структурным аналогам минералов, избранным неорганическим веществам (силикатам), простым веществам и простым окислам (всего 2800 кристаллических фаз с уникальными названиями).

Стержневая идея МИНКРИСТА — **синтез** информации о кристаллической фазе, рассматриваемой как “монокристалл” (фундаментальная характеристика — координаты атомов в элементарной ячейке) и как “поликристалл” (фундаментальная характеристика — межплоскостные расстояния) и **замена** экспериментальных поликристалл-стандартов расчетными делает МИНКРИСТ универсальной, комплексной и оригинальной разработкой, не имеющей аналогов ни в России, ни за рубежом.

Ядро МИНКРИСТА — База данных по кристаллическим структурам минералов и их структурных аналогов. Именно только эта составляющая извлекается из материалов, опубликованных в открытой печати. Специально разработанный Программный Пакет позволяет автоматически сформировать вторую, производную от первой, Базу расчетных поликристалл-стандартов, и таким образом реализовать стержневую идею МИНКРИСТА о двух типах информации о кристаллической фазе.

БАЗОВАЯ ЗАПИСЬ по индивидуальному кристаллическому веществу содержит информацию о химическом составе, симметрии, параметрах элементарной ячейки, координатах атомных позиций с изотропными температурными факторами и заселенностями, информацию о межплоскостных расстояниях, *HKL*-индексах и интенсивностях сильнейших рефлексов рентгенодифракционной картины поликристалл-стандарта, а также ссылки на соответствующие публикации по расшифровке или уточнению кристаллической структуры. Запись специфицируется по полезному свойству, особенностям химического состава и структуры, а также по РТ-условиям синтеза. Минералы классифицированы по низшим таксонам Структурно-химической систематики А. А. Годовикова [1]. В 2004 г. в МИНКРИСТ были введены новые разделы. Первый касается оценки потенциальной энергии кристаллической решетки минералов и их структурных аналогов экспресс-расчетом по уравнению, предложенному Глэссером и Дженкинсом [2, 3]. Расчет дает значения с точностью до 7 % для кристаллических фаз,

имеющих энергию более 5000 kJ/mol. И такая оценка выполнена для 2000 кристаллических фаз, входящих в Фонд МИНКРИСТА.

Второй новый раздел связан с систематикой минералов в соответствии с новейшей кристаллохимической классификацией М. Чириотти [4]. Структура минерала, отражаемая **формулой его структурного типа** [5] в сочетании с кристаллографическими параметрами и характеристиками, доминирует в основах этой чисто кристаллохимической классификации. Таксон по Чириотти характеризует совокупность минералов, для которых может быть написана общая формула структурного типа. И если МИНКРИСТ включает информацию о неорганических кристаллических фазах — **структурных аналогах минералов**, то классификация по М. Чириотти дает Пользователю МИНКРИСТА информацию об **изоструктурных группах** среди минералов. Таким образом, эта классификация прекрасно дополняет кристаллохимический аспект МИНКРИСТА.

WWW-МИНКРИСТ интегрирован через систему ссылок с сетью международных минералогических Баз данных, и, таким образом, через МИНКРИСТ можно выйти на любой тип информации о минералах. В свою очередь, данные из WWW-МИНКРИСТА могут быть вызваны во внешние Базы данных через механизм генерального запроса.

В 2005 г. разработана новая программа графического анимированного изображения моделей кристаллических структур как в шарах-сферах, так и в **полиэдрах**. Программа **WWW-CrystPic** формирует трехмерное изображение модели кристаллической структуры и реализована в виде Java-3D-апплета.

К WWW-МИНКРИСТу обеспечен свободный и постоянный доступ любому Пользователю сети ИНТЕРНЕТ. Клиентская часть может быть представлена любым графическим WWW-браузером, реализованным на любой платформе с поддержкой языков Java и JavaScript.

*Работа выполняется при финансовой поддержке РФФИ (грант 04-07-90196).*

## Литература

1. Годовиков А. А. Структурно-химическая классификация минералов // 1997, Москва, 248 с.
2. Glasser L., Jenkins H. D. B. Lattice Energies and Unit Cell Volumes of Complex Ionic Solids // J. Amer. Chem. Soc., 2000, 122(4), pp. 632—638.
3. Jenkins H. D. B., Glasser L. Ionic Hydrates,  $M_pX_q \cdot nH_2O$ : Lattice Energy and Standard Enthalpy of Formation Estimation // Inorg. Chem., 2002, 41, pp. 4378—4388.
4. Ciriotti M. E. xS-mineral classification // Torino, Italy, 2003, 330 p.
5. Smith Deane K., Roberts Andrew C., Bayliss Peter, and Liebau Friedrich A systematic approach to general and structure-type formulas for minerals and other inorganic phases // Am. Miner., 1998, Vol. 83, pp. 126—132.