

ПРОГРАММА ПО КРИСТАЛЛОХИМИИ
для 415 группы (специализация «Функциональные наноматериалы»)
Осенний семестр 2011 года

Внешняя форма кристаллов. Основные этапы развития представлений о внутреннем строении кристаллов. Идеальные кристаллы: периодичность, элементарная ячейка. Реальные кристаллы: домены, дефекты. Конденсированные фазы с некристаллическим строением. Связь кристаллохимии с другими разделами химии и физики.

Закрытые и открытые операции симметрии: определение, описание с помощью матриц. Конечные и бесконечные группы. Циклические группы. Закрытые и открытые элементы симметрии: международные символы, графические изображения, системы эквивалентных позиций. Собственные и несобственные вращения.

Взаимодействия открытых и закрытых элементов симметрии между собой, с перпендикулярными и наклонными трансляциями: геометрический и матричный способы нахождения порождённых элементов симметрии. Правила выбора кристаллографических осей координат. Примитивные и непримитивные элементарные ячейки, узел ячейки. Точечные и пространственные группы симметрии: правила построения символов групп (символики Германа–Могена и Шёнфлиса) и графиков групп. Стереографическая проекция. Общие и частные системы эквивалентных позиций (орбиты), их обозначения и кратности. Порядок группы. Подгруппы. Симметрия элементарной ячейки: сингония, голоэдрическая группа, кристаллографическая группа. Ячейки Бравэ.

Операции черно-белой симметрии (антисимметрии). Точечные и пространственные группы антисимметрии. Понятие о цветной симметрии.

Связь физических свойств молекул и кристаллов с их симметрией.

Способы описания кристаллических структур. Плотнейшие и плотные упаковки атомов одного сорта, коэффициент плотности упаковок. Форма, размер и количество пустот в таких упаковках. Принципы определения металлических, ионных, ковалентных и ван-дер-ваальсовых радиусов атомов. Описание бинарных и тернарных соединений в терминах ПШУ. Координационные числа и координационные полиэдры атомов. Структурный тип. Полиэдрическое описание структур. Мотивы в кристаллических структурах: по кратчайшим расстояниям, по способу заполнения пустот, объединение полиэдров определенного типа.

Характерные черты кристаллического строения металлов и неметаллов. Наиболее простые и распространенные типы бинарных неорганических соединений. Описание более сложных структур по аналогии с простыми структурными типами (тернарные соединения, интерметаллиды, соли кислородных кислот). Основные черты кристаллического строения силикатов. Особенности строения кристаллов низкомолекулярных органических соединений, полимеров и биоорганических соединений. Наиболее распространенные пространственные группы неорганических, органических и биоорганических кристаллов. Специфические межмолекулярные контакты в органических кристаллах: водородные связи, характерные расположения ароматических фрагментов, контакты галоген...галоген.

Возможности создания кристаллов с заданными параметрами структуры. Металло-органические каркасы, гетеромолекулярные органические кристаллы на основе хорошо воспроизводимых синтонов. Химические реакции в кристаллах.

Варианты строения гетеромолекулярных кристаллов. Соединения включения разного типа (интеркаляты графита и фторированного графита, слоистые двойные гидроксиды, клатратные гидраты, цеолиты, клатраты гидрохинона и мочевины): структура, свойства и возможности использования.

Некристаллографическая и приближенная симметрия в кристаллах. Соразмерно и несоразмерно модулированные структуры. Варианты неупорядоченного расположения атомов в кристаллах. Ротационно-кристаллические фазы.

Влияние условий (температуры, давления) на кристаллическое строение элементов и соединений. Аллотропия, полиморфизм, политипия.

Возможности предсказания кристаллической структуры органических соединений. Метод атом-атомных потенциалов.

Основные задачи исследования кристаллов с помощью дифракционных методов. Источники излучения, их достоинства и недостатки. Способы получения дифракционной картины. Требования к образцам в зависимости от цели исследования, используемого источника излучения и способа регистрации данных.

Рентгеноструктурный анализ, его основные этапы. Индексы узлов, направлений и плоскостей в кристаллах (индексы Миллера). Межплоскостные расстояния. Формула Вульфа–Брэггов. Определение параметров элементарной ячейки. Симметрия дифракционной картины. Систематические погасания рефлексов. Определение пространственной группы. Независимая часть элементарной ячейки: координаты атомов и параметры их атомных смещений. Интенсивности дифрагированных лучей. Атомный фактор рассеяния. Комплексные структурные амплитуды. Методы определения начальных фаз. Критерии правильности определения структуры по дифракционным данным. Особенности определения кристаллического строения белков. Банки кристаллографических данных (ICSD, CSD, PDB): их содержание и использование.

Прецизионный рентгеноструктурный анализ. Исследование деформационной электронной плотности. Топологический анализ электронной плотности (по Бейдеру).

Качественный рентгенофазовый анализ. Способы количественного рентгенофазового анализа. Корундовое число. Содержание и использование банка ICDD.