

## **Структура и свойства кристаллов**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Курс “Структура и свойства кристаллов” включает следующие основные разделы:

- связь структуры и морфологии; При этом подчеркивается, что влияние на огранку условий кристаллизации во многом обусловлено структурными особенностями кристалла;
- современное представление о природе окраски и люминесценции кристаллов интерпретируется в рамках трех физических теорий – зонной, теории кристаллического поля и теории молекулярных орбиталей;
- показана привязка оптических констант к структурным элементам кристалла и тем самым выявляется корреляция оптических свойств и структуры кристаллов;
- рассмотрены разные типы магнитного упорядочения и с использованием элементов магнитной симметрии дается описание магнитных структур;
- специальный раздел посвящен электрическим свойствам кристаллов диэлектриков, пьезоэлектриков, сегнетоэлектриков, полупроводников, электридов, ионных проводников и высокотемпературных сверхпроводников

### **Сравнительная кристаллохимия новых минералов с гетерополиэдрическими комплексами**

#### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

В курсе " Сравнительная кристаллохимия новых минералов с гетерополиэдрическими комплексами " излагаются следующие проблемы:

- понятие «*фундаментальный строительный блок (FBB)*», основные типы блоков-модулей. Выделение *FBB* в структурах соединений с однородными октаэдрическими каркасами и гетерополиэдрическими комплексами;
- Принципы строения, свойства и фазовые соотношения в группах силикатных минералов с гетерополиэдрическими каркасами
- Сравнительная кристаллохимия новых силикатных минералов со смешанными слоистыми радикалами;

На практических занятиях студенты знакомятся с практическими навыками работы с кристаллической структурой, включая построение проекций и выявление особенностей строения с использованием современных программ

### **Рентгеноструктурный анализ, дополнительные главы**

#### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Дисциплина «Рентгеноструктурный анализ, дополнительные главы» включает следующие основные разделы:

- Модель дифракции на основе концепции обратной решетки.
- Закрепление пройденного материала по расчету структурных амплитуд. Законы погасаний: вывод и применение.
- Проведение предварительных исследований, метод Лауэ и съёмка в камере РКОП.

- Рентгенгонометрические методы. Метод Вейсенберга.

- Современные технологии в структурном анализе на основе монокристалльных данных. Сбор экспериментальных данных и их обработка на дифрактометре XCalibur S CCD. Работа с основными программными комплексами для структурной расшифровки и уточнения. Критерии оценки правильности структурного уточнения

## **История и развитие учения о кристаллографии**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Основные периоды развития кристаллографии: описательный, эмпирический, экспериментальный. Развитие теоретических основ и практики получения синтетических кристаллических материалов. Хронология исторических событий, биографии, идеи, работы и теории великих ученых, внесших вклад в развитие науки, в том числе сотрудников кафедры кристаллографии и кристаллохимии. Современное состояние кристаллографии и ее связь с другими естественными науками и искусством. Новые технологии в методах исследования кристаллического вещества и новые объекты исследования. 2014 год – Международный год кристаллографии: события, люди, значение. Нобелевские лауреаты и их открытия в области кристаллографии и смежных наук

## **Генетическая кристаллохимия**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Целью курса является ознакомление студентов с генетическим направлением в кристаллохимии, его предметом и методами исследования. Определяется место генетической кристаллохимии в ряду других направлений кристаллохимической науки.

В курсе рассматриваются основные закономерности развития геохимических процессов с точки зрения кристаллохимии и физической химии. Анализируется роль экспериментального моделирования в выявлении закономерностей минералообразования. Исследуются причинно-следственные связи структурных преобразований в гомологических и морфотропных рядах минералов. Большое внимание в курсе уделяется кристаллогенетическим исследованиям, основанным на прецизионном анализе электронной плотности как отдельных минералов, так и минеральных групп, объединенных определенным признаком родственности.

На примере минеральных групп фосфатов, боратов, силикатов, ванадатов прослеживаются пути формирования и преобразования кристаллических структур в породах различных геохимических типов

## **Вычислительные методы в кристаллографии**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Дисциплина Вычислительные методы в кристаллографии включает следующие основные разделы:

- принципы работы современных программных комплексов для определения и уточнения кристаллических структур;
- обработка массивов экспериментальных данных, основные принципы выбора пространственной группы (использование законов закономерных погасаний);
- анализ структурной модели, использование синтеза Фурье и разностного синтеза для поиска недостающих фрагментов структуры;
- кристаллохимический анализ структуры, проверка корректности и качества структурной расшивки и уточнения.

### **Электронная плотность в кристаллах**

#### **Краткое содержание дисциплины (аннотация)**

Распределение электронной плотности, то есть полную информацию о кристалле, возможно получить напрямую в теоретическом расчете лишь через приближения, в силу этого возможность знать распределение электронной плотности из эксперимента является чрезвычайно важным независимым способом. В курсе разбираются результаты подобных исследований минералов: силикатов, оксидов группы шпинелей и других минералов методом деформационной плотности и мультипольной. Последняя позволяет точно определять эффективные заряды атомов через установление перетока зарядов в капта-технике в расчете по экспериментальным данным, и дать ответы на фундаментальный вопрос кристаллохимии о степени ионности-ковалентности связи. Установление заселенностей орбиталей 3d-электронов позволяет объяснять свойства кристаллов: аномальную твердость, а также антиферромагнитные свойства

### **Антисимметрия и многоцветная симметрия кристаллов**

#### **Краткое содержание дисциплины (аннотация)**

Антисимметрия включает исследования симметрии кристаллических структур, дополненной новым качеством (цвет, знак, спин):

-Шубниковские группы антисимметрии: точечные, одномерные, двумерные и трехмерные, их вывод, графическое представление, применение при описании симметрии двойников кристаллов и магнитных кристаллов. Атлас шубниковских групп В.Копчика.

-Группы многоцветной симметрии Н.В.Белова, мозаики (двумерные группы) и точечные группы, решения некоторых вопросов кристаллофизики

-Кристаллоструктурные иллюстрации шубниковских групп антисимметрии

-Икосаэдрические точечные группы симметрии и простые формы. Фуллерены, нанотрубки, квазикристаллы.

-Преобразование кристаллографических координатных систем

## **Порядок и беспорядок в структурах и политипия минералов**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация)**

Явления порядка-беспорядка, характерные для природных соединений и синтетических аналогов минералов, разобраны с точки зрения топологии и симметрии строительных единиц. Показано, что симметричные законы ОД-теории позволяют установить причины существования двух типов плотнейших упаковок, модификаций вюрцит-сфалерит и многих других основных структурных типов минералов, определить строение семейств в различных классах, в частности, силикатов, боратов, йодатов и др. и предсказать гипотетические структуры. Дано уточнение распространенного понятия полисоматизма как случая ОД-структур из двух типов слоев. Предлагаемый подход является наиболее «кристаллографичным» анализом в кристаллохимии, в отличие от математических топологических схем, универсален и может быть применен к любым классам минералов и их аналогов. Курс уникален и нигде в мире не читается, хотя результаты ОД-анализа вызывают интерес и находят практическое приложение при анализе структурных семейств, классификации минералов и неорганических соединений и направленного синтеза.

## **Анионоцентрированная кристаллохимия**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация)**

Рассмотрен исторический аспект появления анионо-центрированного представления. Показывается корреляция физических свойств кристаллов и особенностей кристаллической структуры. Разобрана модельная для данной концепции структура георгбокиита. Проводится анализ возможных анионы X в тетраэдрах XA<sub>4</sub>. Оценивается распространенность тетраэдров XA<sub>4</sub> для различных анионов. Показана роль

электроотрицательности аниона X. Привлекается теория валентности связи, ограничивающая число допустимых катионов в анионоцентрированных тетраэдрах. Рассмотрена классификация тетраэдров в комплексах и система основных и дополнительных классификационных параметров. Изучаются различные типы комплексов анионоцентрированных тетраэдров, проводится их систематика. Изучаются топологические и геометрические характеристики комплексов анионоцентрированных тетраэдров. Подробно с многочисленными примерами из мира минералов последовательно рассматриваются структуры с островными анионными комплексами, с цепочечными анионными комплексами, со слоистыми анионными комплексами, с анионными каркасами. Отдельно выделяются структуры, которые нельзя рассмотреть в катионоцентрированном аспекте. Под новым углом зрения рассматривается вторая глава кристаллохимии силикатов

## **Природные и синтетические наноструктуры и нанобъекты**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

В курсе "Природные и синтетические наноструктуры и нанобъекты" излагаются следующие проблемы:

- основы классификации и основные типы структур наноматериалов;
- физические причины специфики свойств наноструктур; структурные, термодинамические и физико-химические свойства;
- технологии получения наноструктур и наноматериалов, самоорганизация и самосборка;
- диагностика и методы исследования наноструктур и нанобъектов;
- объемные наноструктурированные материалы и углеродные наноструктуры

## **Рост кристаллов: малоразмерные монокристаллические материалы**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Предлагаемый курс отражает важнейшие современные достижения в исследовании формирования кристаллических материалов – высокоэффективных малоразмерных монокристаллов, тонких пленок, «усов» и наноструктур, а также роль и место работ минералогического профиля в этой логической цепочке. Структура его определяется

стремлением к последовательному изложению современных взглядов в этой быстроразвивающейся области науки и к оценке перспектив развития отдельных методик. Значительное внимание уделяется получению кристаллических гетероструктур и функциональной стеклокерамики

## **Суперкомпьютерные расчеты в кристаллохимии**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация)**

Симметричные и геометрические ограничения существования кристаллической структуры. Конструирование пробных кристаллических структур заданного состава. Принципы полного и локального валентного и координационного баланса. Современный метод валентности связи (МВС). Возможные методы уточнения пробной структуры кристалла. Компьютерное моделирование с использованием атомистических потенциалов межатомного взаимодействия. Квантовохимические расчеты (ab-initio). Основные способы описания и изображения кристаллических структур минералов, кластеров и поверхности кристалла. Особенности программы AtoMS. Взаимодействие программ визуализаторов и кристаллографических баз данных. Основные базы данных - ICSD (Findit), American Mineralogist Crystal structure database, Минкрисст. Особенности работы в них. Программы DLS, BondVal, GULP, Metadise, QE- особенности и границы применимости

## **Физическая и теоретическая кристаллохимия**

### **Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками. Центральная проблема кристаллохимии – предсказание структуры кристалла для заданного химического состава. Иерархия методов предсказания и уточнения пробной структуры.

Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам. Принцип минимальной диссимметризации. Конструирование топологических моделей кристаллов. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле,

параллелоэдры и сфеноиды Федорова. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов. Анионоцентрированные полиэдры и соответствующие структурные типы. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах.

Вторичные структурные единицы и структуры каркасных силикатов, в частности, цеолитов. Конструирование островных кремнекислородных радикалов из  $\text{SiO}_4$ -тетраэдров. Принципы топологического конструирования слоистых силикатов из тетраэдрических и октаэдрических сеток. Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс. Изотипизм и пространственные группы симметрии. Структурные деформации и псевдосимметрия. Принцип толерантности и структурные дескрипторы. Представления о структурной гомологии кристаллов. Производные и вырожденные структуры. Упорядочение атомов и сверхструктуры. Основные структурные прототипы ( $\text{NaCl-MgO-PbS}$ , сфалерит, флюорит и др.) и их гомологические ряды. Понятие о полисоматических сериях минералов и неорганических веществ. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними. Зависимость величин радиусов от валентности, координационных чисел и спинового состояния переходных элементов. Современные представления о переменных радиусов ионов. Структурные сортировочные диаграммы. Принципы их построения и возможности практического использования. Правила строения ионных кристаллов. Критерий Магнуса-Гольдшмидта и его ограничения. Понятия о втором, третьем и четвертом правилах Полинга. Современное понимание общего значения пятого правила Полинга (правила экономичности). Правила строения ковалентных и существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Понятие электронных концентраций. Направленные связи и гибридизация. Правила Грима-Зоммерфельда, правила Пирсона, Партэ и др. для кристаллов с неполновалентными элементами (неподеленными парами электронов). Современное состояние второго правила Полинга. Локальный баланс валентностей в варианте Полинга и его современная форма. Значение отклонений от локального баланса для кристаллохимического анализа. Качество баланса. Минералогически вероятные структуры. Метод валентности связи. Правило сумм валентности связей, контуры связей. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей. Программа BONDVAL и тестовые задачи. «Закон» частности координационных чисел (КЧ). Простые и составные КЧ и соответствующие координационные полиэдры. Автодуальное многообразие Платоновых тел. Автодуальные многообразия  $F=V$  (число граней равно числу вершин). Теоремы дисторсии координационных полиэдров. Геометрический и аналитический выводы теоремы

дисторсии. Экспериментальная проверка теорем дисторсии. Конструирование вероятных кристаллических структур из тетраэдров  $T^{n+}O_4$  на примере модификаций кремнезема.

Конструирование вероятных кристаллических структур из октаэдров  $M^{n+}O_6$  : случаи  $M^{2+}O$ ,  $M_2^{3+}O_3$ ,  $M^{4+}O_2$ ,  $M^{6+}O_3$ . Конструирование вероятных кристаллических структур из полиэдрических кластеров (тетраэдры и октаэдры). Применение правил минимальной дисторсии при сравнении топологических моделей структур. Теорема Шубникова и правила заселения точечных конфигураций. Шубниковские кристаллохимические формулы. Методы уточнения топологических моделей. Методы DLS, VLS, DVLS. Связь свойств кристаллов с характеристиками химических связей. Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов методами минимизации энергии межатомного взаимодействия.