



## МЕЖФАКУЛЬТЕТСКИЙ НАУЧНЫЙ СЕМИНАР

7 апреля в 15:30



621 ауд. (вход через библиотеку) Главного здания МГУ

Доклад проф. Юрия Леонидовича Словохотова, ИПУ РАН

### "Кристаллохимия и структурные исследования: не вполне реализованные идеи"

*Краткий анонс:*

В связи с переходом в «математическое обществоведение» автор хотел бы познакомить коллег со списком кристаллохимических и структурно-химических идей, возникших в разное время. Некоторые из них еще не реализованы, другие реализованы частично. Организовать их проработку «с нуля» я вряд ли смогу, но при возникновении интереса буду рад поделиться имеющейся информацией и рабочими контактами.

Список включает закономерности строения конденсированных фаз, не имеющие общепринятой интерпретации (изменения  $T_{пл}$  и  $T_{кип}$  молекулярных фаз, отражающие разную симметрию среднего поля в кристалле и жидкости, как материал для построения теории растворимости; «микро»-разупорядоченность атомных позиций, определяющая устойчивость кристаллических структур за счет конфигурационной энтропии; *проблема многих минимумов* в расчетах кристаллических структур; систематическое укорочение «рентгеновских» длин связей; квази-полимодалные распределения структурных параметров в выборках из банков данных как следствие сильной корреляции результатов исследований и некоторые другие не вполне решенные вопросы). Будут обсуждаться гипотетический механизм действия анестетиков («замерзание» приповерхностного микрослоя воды с растворенными гостевыми молекулами в физиологических условиях), расчет разупорядоченности высокосимметричных фрагментов в кристалле на основе модели *резиновой полости*, симметричные причины неравномерного распределения кристаллических структур по пространственным группам, классификация структур и структурных типов на основе нечетких множеств.