

**Московский Государственный Университет  
им. М.В. Ломоносова  
Геологический факультет**

**ПРОГРАММА-МИНИМУМ**

**кандидатского экзамена по специальности  
по специальности 25.00.05  
МИНЕРАЛОГИЯ И КРИСТАЛЛОГРАФИЯ**

**(по кафедре кристаллографии и кристаллохимии)**

## Геометрическая кристаллография

*Пространственная решетка* как фундамент геометрической теории строения кристаллов. Основные законы кристаллографии в свете решетчатого строения кристаллов.

*Операции и элементы симметрии I и II-родов.* Осевая теорема Эйлера, ее обобщенное представление и частные случаи, использование при выводе групп симметрии. Различные способы представления симметрических операций – модельный, координатный, матричный. Кристаллографические группы симметрии как пример математических замкнутых групп. Основные положения теории групп. Алгоритм вывода 32 точечных групп симметрии с использованием символики Шенфлиса.

*Кристаллографические координатные системы, категории, сингонии.* Распределение 32-х кристаллографических классов по трем категориям и шести сингониям - шести кристаллографическим координатным системам, отражающим основные особенности кристаллов: симметрию и анизотропию. Международные обозначения точечных классов (групп) симметрии - символика Германна-Могена. Методы графического проектирования кристаллов: сферические, стереографические и гномостереографические проекции. Их использование при проектировании классов симметрии и граней кристаллов. Сетка Вульфа. Способы определения символов граней. Индексы Вейсса и Миллера. Символы ребер кристаллов, их определение.

*Морфология кристаллов.* Понятие “простая форма”. Вывод простых форм кристаллов в классах разных сингоний. Роль символов граней при определении названия простых форм кристаллов кубической сингонии. Простые формы икосаэдрических групп. Морфология квазикристаллов.

*Физические свойства кристаллов:* скалярные, векторные, тензорные. Структурно-чувствительные свойства кристаллов.

*Типы решеток Браве, их вывод.* Понятие «элементарная ячейка». Симметрия решеток Браве. Трансляционные элементы симметрии.

*Одномерные и двухмерные трансляционные группы симметрии* (группы симметрии бордюров и обоев), их вывод.

*Пространственные (федоровские) группы симметрии, их обозначения.* Принципы построения графиков пространственных групп. Группы симморфные, асимморфные, гемисимморфные. Генетическая связь между федоровскими группами различных сингоний.

*Правильные системы точек, их основные характеристики.* Преобразование кристаллографических координатных систем, символов граней и координат точек (атомов).

*Группы антисимметрии* – группы черно-белой симметрии, принципы их вывода. 58 точечных групп антисимметрии, их применение при описании двойников кристаллов. Одномерные и двухмерные группы антисимметрии. Пространственные группы антисимметрии (шубниковские группы), приемы их вывода.

Группы многоцветной симметрии (группы Белова). Применение групп антисимметрии и многоцветной симметрии для решения некоторых вопросов кристаллофизики.

## Основные положения теоретической кристаллохимии

Зарождение основных идей (XVI - XVII вв.). Химическая кристаллография (конец XVIII - начало XX вв.). Основные задачи кристаллохимии и ее роль в решении минералогических и геохимических проблем. Конкретные кристаллические структуры в свете микросимметрии. Основные термины кристаллохимии.

Пространственная решетка. 14 типов ячеек Браве, пространственные группы симметрии Е. С. Федорова. Плотнейшие шаровые упаковки. Координационный полиэдр и координационное число. Структурные единицы кристалла, мотив структуры. Полиэдрическое изображение кристаллических структур (метод Полинга-Белова). Структурный тип, понятия изоструктурности, антиизоструктурности, изотипности, гомеотипности, структурный класс. Кристаллохимические формулы. Параллелепипеды Федорова, области и многогранники Дирихле-Вороного.

Свойства атомов, важные для кристаллохимии. Строение электронных оболочек, их форма и протяженность. Электронные конфигурации элементов и Периодическая система элементов Менделеева. Орбитальные радиусы атомов и ионов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Валентное состояние и гибридизация орбиталей. Орбитальные электроотрицательности, Поляризуемость атомов и ионов. Магнитные свойства атомов и ионов. Кислотно-основные свойства атомов и ионов.

Химическая связь в кристаллах. Основные типы химической связи: ионная, ковалентная, металлическая, вандерваальсова, водородная. Потенциальная кривая химической связи. Ионная модель, энергия решетки. Энергия сцепления кристаллов. Энергия ионной решетки. Постоянная Маделунга. Уравнения Борна. Термохимический цикл Борна-Габер. Понятие об энергии атомизации как универсальной характеристике энергии сцепления атомов в кристаллах.

Структуры типичных ионных кристаллов. Основы теории кристаллического поля. Электронная структура переходных элементов. Расщепление энергии d- и f-уровней в кристаллическом поле различной симметрии. Понятие об энергии предпочтения координации. Ковалентная связь и типичные ковалентные структуры. Связи, промежуточные между ионными и ковалентными. Степень ионности связи и ее структурное влияние. Зонная энергетическая структура кристалла: диэлектрики, полупроводники, и металлы.

Металлическая связь и ее структурные свойства. Переход от металлической к ковалентной связи и «переходные» структуры. Остаточная (Ван-дер-ваальсова) связь. Диполь-дипольные и ион-дипольные взаимодействия. Слоистые структуры. Водородная связь. Общий взгляд на природу химической связи в кристаллах.

Размеры и форма атомов в кристаллах. Атомные (металлические и ковалентные) радиусы. Ван-дер-ваальсовы (межмолекулярные) радиусы. Ионные радиусы. Геометрические пределы устойчивости ионных структур. Зависимость ионных радиусов от заряда, координационного числа и спинового состояния. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Понятие об эффективных зарядах атомов в кристаллах и методах их определения. Поляризуемость ионов в кристалле.

Химический состав и структура кристалла. Основные категории теоретической кристаллохимии и соотношения между ними. Критерии устойчивости структурного типа для ионных кристаллов. Правила Полинга для ионных кристаллов. Фактор толерантности и модельные структуры Гольдшмидта. Критерии устойчивости структурного типа для существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Правило Юм-Розери. Правила Партэ. Числовые законы строения сульфидов и сульфосолей Н.В. Белова. Обобщение понятия морфотропии на примере кристаллохимии силикатов. Основной закон кристаллохимии Гольдшмидта.

Понятие о гомологических рядах. Структуры вычитания и внедрения. Псевдосимметрия. Производные и вырожденные структуры. Структурная гомология силикатов, структурная гомология халькогенидов. Гомологические серии некоторых оксидов и фторидов.

Полисоматизм. Концепция полисоматизма и полисоматических серий. Описание модулярных (фрагментарных) кристаллических структур.

Полиморфизм как общее свойство кристаллических веществ. История открытия полиморфизма как явления. Систематика полиморфных переходов. Структурные аспекты явления полиморфизма. Полиморфные переходы первого и второго рода. Изменение симметрии при изменении температуры и давления Координационные правила полиморфизма. Термодинамические основы теории полиморфизма.

Политипизм. Отличие политипии от полиморфизма. Способы описания политипных структур.

Изоморфизм и изоструктурность. Изодиморфизм. Классификация изоморфизма, его соотношение с твердыми растворами. Эмпирические правила изоморфизма и их современная трактовка. Физико-химические основы изоморфизма. Распад изоморфных смесей при понижении температуры и повышении давления. Изоморфизм в процессах кристаллизации. Кристаллохимическая трактовка правил изоморфизма. Изоморфизм как причина ограничения числа минеральных видов.

Порядок-беспорядок в кристаллических структурах. Понятие о ближнем и дальнем порядках. Процессы внутрикристаллического упорядочения как геотермометры и геобарометры.

Кристаллохимическая систематика комплексов анионоцентрированных тетраэдров. Кристаллические структуры соединений с комплексами анионоцентрированных тетраэдров. 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).

## **Рост и морфология кристаллов**

### *Кристаллообразование в гомогенных средах*

Фазовые равновесия и переходы. Кристаллизация как фазовый переход. Диаграммы состояния систем. Поверхностная энергия. Движущая сила кристаллизации и способы ее выражения. Работа, необходимая для формирования кристаллической фазы. Энергия активации. Флуктуационная природа зародышеобразования и его особенности в парах и конденсированных средах. Геометрическая модель образования зародышей.

### *Механизм роста совершенных кристаллов*

Кристаллизация в гетерогенных средах. Двумерные зародыши. Их размер и форма. Эпитаксия. Анизотропия поверхностной энергии. Структура границы раздела фаз. Адсорбционный слой. Нормальный и послыйный рост кристаллов. Условия их реализации. Анизотропия скоростей послыйного роста грани. Особенности послыйного роста кристаллов из расплава, раствора и пара.

### *Тепло- и массоперенос при кристаллизации*

Диффузионные и поверхностные процессы. Кинетический и диффузионный режим кристаллизации. Современные принципы моделирования тепло- и массообмена в подвижных и неподвижных средах. Кристаллизация в условиях микрогравитации. Моделирование роста монокристаллов и эпитаксиальных структур.

### *Внешняя форма и однородность реальных кристаллов*

Кристаллохимически обусловленная форма кристалла. Метод ПЦС Хартмана. Типы граней кристаллов. Современная трактовка равновесной формы: соотношение Гиббса-Томсона-Херринга. Метод средних работ отрыва Странского и Каишева. Формы роста. Корреляция между теоретически возможными, равновесными формами и формами роста кристаллов. Эффект грани. Условия перехода от многогранника к дендриту. Скелетные формы. Нитевидные кристаллы. Расщепление кристаллов. Сферолиты. Ортотропизм. Ритмический рост. Геометрический отбор. Влияние точечных дефектов на рост и морфологию кристаллов. Физическая и химическая адсорбция примесей. Гомогенный и гетерогенный захват. Равновесное и неравновесное распределение примесей  $u_{1087}$  при кристаллизации. Эффективные коэффициенты распределения. Концентрационное переохлаждение. Секториальное и зонарное строение кристаллов. Дислокации как источники слоев роста. Формирование двойников. Дефекты упаковки. Границы блоков. Температурные напряжения. Гетерогенные включения маточной среды и посторонних частиц.

#### *Генезис монокристаллических минералов*

Теоретические и эмпирические подходы к изучению генезиса минералов. Общие представления о моделировании природных поликомпонентных систем. Пространственно-временные факторы. Магматический процесс. Особенности формирования силикатов и родственных им минералов. Физико-химическая и кристаллохимическая трактовка кислотно-основных свойств стеклообразующих расплавов. Первичная магматическая кристаллизация. Рост кристаллов в пегматитах. Пневматолитовые и гидротермальные образования. Метасоматоз. Роль метаморфизма. Кристаллизация в условиях осадконакопления. Примеры месторождений технологических монокристаллов: кварц, исландский шпат, флюорит, корунд, слюда, алмаз, шпинель, берилл, топаз, гранаты, турмалин, оливин, циркон, хризоберилл и другие минералы.

#### *Общая характеристика методов искусственного получения кристаллов*

РТХ-диаграммы состояния систем. Условия управляемой кристаллизации. Критерии выбора и общая классификация методов выращивания кристаллов.

*Выращивание кристаллов из расплава.* Изменение температуры при охлаждении кристаллодержателя (метод Киропулоса). Перемещение кристалла относительно расплава в температурном градиенте (метод Чохральского). Основные варианты технического исполнения метода. Получение профилированных монокристаллов (метод Степанова). Метод Бриджмена-Стокбаргера. Перемещение контейнера через зону плавления. Зонная плавка и перекристаллизация. Вертикальный и горизонтальный, тигельный и бестигельный способы. Метод Вернейля. Автоматизация процесса выращивания кристаллов из расплава.

*Выращивание кристаллов из растворов.* Типы растворителей. Фазовые диаграммы и кривые растворимости. Разновидности методов.

*Раствор-расплавная кристаллизация,* ее возможности и разновидности. Расплавы-растворители. Разбавленные и высококонцентрированные системы. Основные модификации, технические приемы и перспективы развития. *Гидротермальный синтез.* Свойства гидротермальных растворов. Выращивание кристаллов при температурном градиенте. Метод общего охлаждения. Снижение температуры с сохранением постоянного ее перепада. Методы разделенной шихты и разделенных исходных компонентов. Вариант качающегося реактора. *Кристаллизация при обычном давлении и умеренной температуре (до 100°C).* Приемы изменения температуры раствора. Методы температурного перепада. Рост кристаллов при вынужденной конвекции раствора. Испарение растворителя. Кристаллизация при постоянной температуре и постоянном

пересыщении. Использование возможностей химических и электрохимических реакций. Методы со встречной диффузией. Кристаллизация в гелях.

*Выращивание кристаллов из газовой (паровой) среды.* Физическая конденсация. Химические транспортные реакции. Представление о ПЖК-механизме кристаллизации. Особенности получения объемных, нитевидных кристаллов, и эпитаксиальных пленок. Типичные дефекты роста кристаллов и пути их устранения. Сравнительная характеристика методов выращивания кристаллов.

*Практика выращивания технических монокристаллов*

*Классификация* выращиваемых кристаллов: химическая, кристаллохимическая, генетическая, функциональная.

*Основные «традиционные» материалы:* алмаз, кремний, германий, соединения АШВУ и другие полупроводники, кварц, корунд, редкоземельные алюмо-, феррогранаты и алюминаты, галогениды щелочных металлов, флюорит и другие фториды, кальцит, KDP, ADP, ниобаты, слюда, цинкит, орто- и гексаферриты, форстерит, берилл, хризоберилл, редкоземельные оксиортосиликаты и 1088 рутил, шпинели и другие тугоплавкие оксиды. *Некоторые новые кристаллы:* берлинит, манганиты, титанаты, купраты и другие высокотемпературные сверхпроводники, германаты, бораты, апатит, ванадаты, молибдаты, вольфраматы, бориды, карбиды, фосфиды.

Выращивание высокомолекулярных органических кристаллов. Кристаллизация гетеро- и наноструктур.

*Сравнительная морфология минералов и их синтетических аналогов*

Общие и отличительные признаки минералов и искусственных кристаллов. Структурные и механические примеси в минералах и их влияние на внешнюю и внутреннюю морфологию. Включения: твердые, жидкие, однофазные, двухфазные, трехфазные и более сложные. "Минералы-узники". Примеры генетической интерпретации экспериментальных данных.

## **Рентгенография минералов и рентгеноструктурный анализ**

*Физические основы рентгенографии кристаллов.*

Открытие и свойства рентгеновских лучей. Сплошной и характеристический спектры. Рентгеновские трубки. Поглощение рентгеновских лучей и выбор рентгеновского излучения. Применение фильтров для монохроматизации рентгеновских лучей.

Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. Модель дифракции как отражение рентгеновских лучей от атомных плоскостей. Уравнение Брэгга-Вульфа.

Когерентное и некогерентное рассеяние. Изменение длины волны при неупругом рассеянии рентгеновских лучей. Рассеяние электроном поляризованного излучения. Рассеяние электроном неполяризованного излучения. Поляризационный фактор. Рассеяние рентгеновских лучей атомом. Атомный фактор рассеяния. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Структурная амплитуда. Фаза волны, рассеянной элементарной ячейкой. Понятие обратной решетки. Вывод квадратичных формул. Модель дифракции с использованием представлений о сфере Эвальда. Фактор Лоренца. Фактор повторяемости. Рассеяние рентгеновских лучей системой атомов. Закономерные погасания рефлексов. Вывод правил погасаний для разных типов ячеек и элементов симметрии. Определение пространственных групп.

Влияние температуры на интенсивность брэгговских отражений. Сопоставление теоретического и экспериментального рентгендифракционного спектра (на примере флюорита). Программа "LAZY PULVERIX PC" для расчета теоретического рентгендифракционного спектра.

*Подходы к решению задач в процессе рентгенографического исследования минералов.*

Применение рентгенографии для исследования микронапряжений в кристаллах и определения размеров частиц в образце. Интегральная ширина пика, поправка на междублетное расщепление.

Методы рентгеновской съемки кристаллов при высоких температурах и давлениях. Высокотемпературная камера Гинье: оптическая схема, расчет спектра. Порошковая камера сверхвысоких давлений. Проблемы кристаллохимии и рентгенографии высоких давлений и температур.

Прецизионное определение параметров элементарных ячеек. Причины небольших изменений параметров элементарной ячейки. Влияние примесей на изменение параметров. Установление связи параметр - состав. Зависимость изменения параметров ячейки от условий кристаллизации. Линейный регрессионный анализ изменений параметров.

Ошибки метода и способы получения точных значений параметров элементарной ячейки. Рекомендации по выбору максимумов для определения линейных и угловых параметров ячейки различной симметрии. Контроль надежности индирования порошковых диаграмм по Де-Вольфу.

Определение состава и структурных особенностей минералов по рентгенографическим данным (отношение S/As в арсенопирите и его типоморфная роль; оценка содержания различных металлов в пирротине; изоморфизм в кварце и его петрогенетическое значение и др.).

Определение длины волны рентгеновских лучей. Первые структурные расшифровки галита, квасцов и др.

*Аппаратура и методы получения рентгендифракционных спектров*

Дифракционная картина при съемке в камере Дебая-Шеррера и расчет рентгендифракционного спектра. Влияние размера частиц на дифракционную картину в камере Дебая-Шеррера. Получение рентгендифракционного спектра в камере Гондольфи.

Современные рентгеновские аппараты и дифрактометры. Счетно-регистрирующее устройство в дифрактометре ДРОН-УМ1. Выбор режима съемки. Ограничивающие и приемные щели рентгеновского гониометра. Управляющий комплекс дифрактометра ДРОН-УМ-1. Получение рентген-дифракционных спектров (программы "dron", "mid.exe", "spectr") и определение параметров элементарной ячейки в дифрактометре ДРОН-УМ-1.

Основные принципы работы автоматического порошкового дифрактометра STOE STADI-MP с позиционно-чувствительным детектором.

*Применение рентгенографии для решения задач качественного и количественного анализа кристаллов.*

Диагностика мономинеральных фаз и качественный рентгенофазовый анализ смесей химических соединений и минералов. Определители фаз. Базы данных. Индирование рентгеновских спектров (программы "ind" и "krist"). Рассеяние рентгеновских лучей атомом и системой атомов.

Количественный фазовый анализ. Факторы, влияющие на соотношение интенсивностей рефлексов в полифазном образце. Определение соотношения фаз в двухкомпонентной смеси. Методы коэффициентов и внутреннего стандарта в количественном анализе.

Современные методы рентгеновских исследований структурных превращений минералов при высоких давлениях и температурах. Знакомство с рентгеновской камерой высокого давления. Принципы кристаллохимии высоких давлений.

*Применение рентгеновской дифракции для решения современных проблем структурной*

*минералогии:*

- а) кристаллохимической систематики минералов;
- б) изучения структурных перестроек в глубинных геосферах;
- в) исследования важнейших явлений в реальной структуре минералов - изоморфизма, полиморфизма, политипии, модуляции и др.

Структурные типы простых веществ и самородных металлов. Наиболее распространенные структурные типы металлов. Плотнейшие упаковки в структурах металлов. Природные интерметаллиды. Правила валентно-электронной концентрации. Структуры неметаллов и полуметаллов IV-VII групп.

Основные структурные типы галогенидов. Оксиды, гидроксиды и их структурное подобие с галогенидами. Кристаллохимия минералов железо-марганцовых конкреций. Структурные типы, устойчивые в глубинных оболочках Земли. Основные компоненты SYNROC для поглощения радиоактивных отходов.

Кристаллохимическая классификация сульфидов. Сульфиды с тетраэдрическими структурами. Структуры дисульфидов. Кластерные структуры сульфидов. Сульфиды неполновалентных элементов.

Сульфосоли с тетраэдрическими структурами и с сульфосолевыми нитями.

Структурные принципы силикатов. Главная концепция кристаллохимии силикатов. Основные подразделения структурной систематики силикатов. Рентгенографическая диагностика слоистых силикатов. Особенности рентгено-фазового анализа минералов групп каолинита, слюд, хлорита и монтмориллонита. Рентгенографическая диагностика состава щелочных полевых шпатов и плагиоклазов.

Структурное состояние полевых шпатов и рентгеновские методы его определения. Силикаты глубинных геосфер.

Генетическая кристаллохимия фосфатов. Сравнительная кристаллохимия силикатов и фосфатов.

Кристаллохимическая систематика карбонатов и сульфатов. Смешанные комплексы в их структурах.

Кристаллохимия боратов. Структуры с анионными комплексами из В-треугольников, В-тетраэдров и обоими типами  $BO_n$ -полиэдров.

*Основные этапы структурных исследований.*

Получение предварительных экспериментальных данных для структурных определений. Монокристалльная дифрактометрия. Геометрия 4-х кружного дифрактометра. Что такое вектор дифракции и плоскость дифракции? Определение трансляций и их взаимных ориентаций в дифрактометре "Синтекс". Особенности современных монокристалльных дифрактометров (на примере дифрактометра XCalibur S, оснащенного позиционно-чувствительным детектором).

Программы сбора экспериментальных данных. Стандартные отклонения при оценке интенсивностей дифрагированных лучей. Обработка экспериментальных данных, полученных в дифрактометре. Усреднение рефлексов. Особенности усреднения рефлексов в случае аномального рассеяния одним из атомов.

Перестановка осей и пересчет дифракционных индексов в случае неправильно выбранных параметров элементарной ячейки. Матрицы перехода от пр.гр.  $P_n$  к  $P_c$ , от  $I$  к  $C$ -ячейке у моноклинных кристаллов и от  $R$  к  $H$ -ячейке у гексагональных кристаллов. Матрица Ниггли и расчёт объёма элементарной ячейки. Пересчёт координат атомов в "новой" ячейке.

Уточнение пространственной группы. Формулы для расчёта структурных факторов в случае различных погасаний, связанных с: а)  $C$ -трансляцией; б)  $I$ -трансляцией; в) плоскостями скользящего отражения; г) винтовыми осями. Осложнения в определении пространственных групп, связанные с вторичными рефлексами. Применение теории



вероятности для оценки распределения величин нормализованных структурных амплитуд в случае centrosymmetric и acentric кристаллов. Статистика интенсивностей дифракционных рефлексов и её использование для уточнения пространственной группы. Формулы Вилсона. Пример уточнения пространственной группы на основе графиков Хоуэлса, Филипса и Роджерса. Тест на энантиоморфизм и полярность структуры Г.Флака. Тест на выявление псевдосимметрии. Программа "MISSYM".

Метод "тяжелого атома". Ряды Фурье и идея Брэгга об их применении для описания периодической структуры кристаллов. Первые работы по проверке этой идеи: 1) определение структуры квасцов и метод изоморфных замещений; 2) сопоставление теоретического и экспериментального распределения электронной плотности в структуре диоксида; 3) определение структуры  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ .

Функция Патерсона - формализованный метод выявления позиций тяжелых атомов. Ограничения в использовании функции Патерсона. Симметрия функции Патерсона. Пики "связки" и "взаимодействия". Систематический анализ функции Патерсона. Теорема Бутузова-Белова. Метод "ромбов" при расшифровке функции Патерсона. Представления о суперпозиционных методах. Функция минимализации. Критерии оценки целесообразности использования метода "тяжелого атома". Обострение функции Патерсона. Харкеровские сечения на плоскость и линию. Пример расшифровки функции Патерсона в случае структуры  $\text{Nd}[\text{TaO}_3]_3$ . Выявление позиции тяжелого атома на основе эффекта аномального рассеяния.

Трансформанта Фурье и её использование для расчёта электронной плотности. Формулы для расчета электронной плотности в случае centrosymmetric кристаллов и кристаллов с пр. гр.  $P2_1$ . Проекция электронной плотности на плоскость и линию. Осложнения, связанные с обрывом ряда.

Представления о прямых методах структурной расшифровки. История возникновения прямых методов структурной расшифровки. Единичные структурные амплитуды. Иллюстрация применения прямых методов при определении структуры алмаза. Зависимость знаков структурных амплитуд от выбора начала координат в элементарной ячейке. Правила выбора рефлексов для фиксации начала координат. Детерминант Карле-Хауптмана и получение на его основе неравенств Харкера-Каспера. Структурный инвариант. Равенство Сейра. Подход к оценке вероятности выполнения неравенства  $F_{h_1}F_{h_2}F_{h_1-h_2} > 0$ .

Уточнение структуры. Коэффициент приведения к абсолютной шкале. Температурный фактор (общий изотропный и анизотропный для каждого атома). Вывод формулы для расчета коэффициента Дебая-Валлера. Поправки на аномальное рассеяние, поглощение и экстинкцию. Расчет коэффициента поглощения.  $\Psi$ -сканирование. Особенности уточнения позиционных параметров и анизотропных тепловых поправок высокосимметричных кристаллов. Уточнение фактора заселенности.

Вспомогательные программы для расчета межатомных расстояний и углов; программы изображения кристаллических структур.

Расчет баланса валентностей, как критерия достоверности структурной расшифровки. Корреляция структурных особенностей и физических свойств кристаллов. Изучение усложняющих реальную структуру явлений.

Особенности уточнения модулированных структур. Описание дифракционной картины на основе 4-х и более векторов. Вектор модуляции. Волны модуляции. Использование представлений о структурной модуляции для интерпретации фазового перехода гётит-гематит. Подходы к структурной интерпретации микродвойникования и полисоматизма.

Новые возможности рентгеноструктурного анализа минералов. Использование синхротронного излучения. Дифракция при высоких давлениях. Состав верхней мантии. Состав мантии ниже границы 670 км.

Применение метода Ритвельда в рентгеноструктурном анализе.

## Компьютерная кристаллография

Основные способы описания и изображения внешней формы кристалла. Реализация принципа Кюри-Вульфа при построении комбинационного многогранника. Рисование монокристаллов и двойников. Особенности программ Shape, Kristall2000. Их отличия. Способы представления: для вывода на печать с белым фоном, для создания графических файлов, для создания 3D форм.

Основные способы описания и изображения кристаллических структур минералов, кластеров и поверхности кристалла. Особенности программ AtoMS, CaRIne Crystallography. Программа Diamond - самая известная и популярная программа визуализации кристаллических и молекулярных структур. Их отличия. Ввод химических, кристаллографических и библиографических данных. Интерактивное измерение углов и межатомных расстояний. Анимированный режим работы с программами. Построение координационных полиэдров. Инструменты для анализа кристаллической структуры и подготовки материалов. Способы представления: для вывода на печать с белым фоном, для создания графических файлов. Взаимодействие программ визуализаторов и кристаллографических баз данных. Форматы обмена данными между приложениями.

Основные базы данных - ICSD (Findit), American Mineralogist Crystal structure database, Минкрист. Особенности работы в них.

Программные комплексы 3D сред создания творческой мастерской. Особенности комплекса Material Studio - среды программного обеспечения для конструирования и моделирования материалов. Программы, входящие в базовый и расширенный пакет.

Программный продукт AVS/Express (STM4) - универсальный инструмент для визуализации данных. Создание рабочей среды для решения кристаллографических задач. Иерархия современных методов кристаллохимического прогноза. Возможные методы уточнения пробной структуры кристалла. Компьютерное моделирование структур и свойств кристаллов. Программы DLS, BondVal, GULP, Metadise, QE- особенности и границы применимости.

## ЛИТЕРАТУРА

### *Геометрическая кристаллография*

1. Егоров-Тисменко Ю.К. «Кристаллография и кристаллохимия», М, изд-во Книжный дом «Университет», 2005, с.520
2. Егоров-Тисменко Ю.К. «Руководство к практическим занятиям по кристаллографии», М, Изд-во МГУ, 2010, 208 стр.
3. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. «Кристаллография», М., изд-во МГУ, 1992, 288 стр.
4. Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010, 258 стр.
5. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю. К. Геометрическая кристаллография, 2-е изд., М., изд-во МГУ, 1986, 166 стр.
6. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. Руководство к практическим занятиям по кристаллохимии, М. изд-во МГУ, 1983, 167 стр.
7. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов. М. изд-во ГЕОС, 2000, 394 стр.
8. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография, 5-е изд., М., изд-во Высшая школа, 1972, 352 стр.

### *Основные положения теоретической кристаллохимии*

1. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М., МГУ, 1987
2. Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010, 258 стр.
3. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., Наука, 1973.
4. Белов Н.В. Очерки по структурной минералогии. М., Недра, 1976.
5. Ворошилов Ю.В. Павлишин В.И. «Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов» Киев, КНТ, 2011. 568 стр.
6. Урусов В.С. Еремин Н.Н. Атомистическое моделирование кристаллических структур минералов их дефектов и твердых растворов. М, ГЕОС, 2011.
7. Урусов В.С., Дубровинский Л.С. Конструирование вероятных кристаллических структур минералов. МГУ, 1990 г.

### *Рост и морфология кристаллов*

1. Современная кристаллография. Том 3 / А.А.Чернов, Е.И.Гиваргизов, Х.С.Багдасаров и др. Образование кристаллов. М: Наука, 1980.
2. Синтез минералов. В 3-х томах. Александров, ВНИИСИМС, 2000.
1. Handbook of Crystal Growth. Edited by D.T.J Hurlle. Nortn-Holland, 1993-1995: Vol. 1: Fundamentals (Parts A and B); Vol. 2: Bulk Crystal Growth (Parts A and B); Vol. 3: Thin Films and Epitaxy (Parts A and B).
2. Тепло- и массообмен при получении монокристаллов / П.К.Конаков, Г.Е.Веревокин, Л.А.Горяинов и др. М: Металлургия, 1971.
3. Journal of Crystal Growth (периодическое издание).

### *Рентгеноструктурный анализ*

1. Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.-«Геоинформмарк», 2000, 292 с.  
Crystal structure analysis. Principles and practice. 2-nd edition. ed. W. Clegg. Oxford Univ. press, 2009, 387 p.
2. Jenny Pickworth Glusker, Kenneth N. Trueblood. Crystal structure analysis. A Primer. 3-rd edition, 2010, 276 p.
3. «Руководство по рентгеновскому исследованию минералов», под ред. В.А.Франк-Каменецкого. Л., «Недра», 1976.
4. Ковба Л.М., Трунов В.К. «Рентгенофазовый анализ», М., МГУ, 1976.
5. Липсон Г., Стипл Г. «Интерпретация порошковых рентгенограмм», М., Мир, 1972.
6. Васильев Е.К., Нахмансон М.С. «Качественный рентгенофазовый анализ», Новосибирск, «Наука», СО РАН, 1986.
7. Пушаровский Д.Ю., Урусов В.С. «Структурные типы минералов», М., МГУ, 1990.
8. «Рентгенография основных типов породообразующих минералов», под ред. В.А.Франк-Каменецкого. Л., «Недра», 1983.
9. Крутова Г.И., Казаков В.И. «Методические указания по исследованию глинистых минералов методом дифрактометрии», М., УДН, 1984.

### *Компьютерная кристаллография*

1. Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010, 258 стр.
2. Лорд Э.Э., Маккей А.Л., Ранганатан С. «Новая геометрия для новых материалов». М, Физматлит, 2010, 264 стр.
3. Ворошилов Ю.В. Павлишин В.И. «Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов» Киев, КНТ, 2011. 568 стр.

4. Егоров-Тисменко Ю.К. «Кристаллография и кристаллохимия», М, изд-во Книжный дом «Университет», 2005, с.520