

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

**Утверждено:
на заседании Ученого Совета
(протокол №3 от 24.04.2014 г.)**

декан, академик

Д.Ю. Пуцаровский

ПРОГРАММА

**вступительного экзамена в аспирантуру
по специальности 25.00.05**

МИНЕРАЛОГИЯ И КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

МОСКВА – 2014

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. Параллелоэдры 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-Габера. 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.

Полиитипизм. Отличие полиитипии от полиморфизма. Способы описания полиитипных 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 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 1000С).* 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 АШВV 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 порошкограмм 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-марганцевых 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. Pn к Pс, 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, Филиппса 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 диопсида; 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 центросимметричных кристаллов и кристаллов с пр. гр. $P2$. 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. Ψ -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.

I. Общая часть

Определение содержания минералогии. Понятие о минерале и минеральном веществе. Основные этапы истории минералогии. Развитие минералогии в последние десятилетия и особенности ее современного состояния. Связь минералогии с развитием физики и химии твердого тела, материаловедения, приборостроения. Фундаментальное значение минералогии для цикла геологических наук. Техническая и технологическая минералогия, их роль в современной технологии материалов и металлургии. Минералогическая кристаллохимия. Физика минералов. Парагенетический анализ и физико-химическая минералогия. Типоморфизм минералов. Онтогенез минералов. Синтез минералов. Минералогия и геммология. Поисково-разведочная минералогия. Петрография, геофизика, инженерная геология.

Химический состав минералов и его особенности. Минералы как многокомпонентные системы переменного состава. Связь состава с кристаллической структурой. Изоморфные замещения, распределение катионов по структурным позициям, структурное упорядочение. Твердые растворы и распад твердых растворов. Интерметаллиды. Полиморфизм. Политипия. Смешанослойные структуры, Метамиктные минералы. Аморфное, стеклообразное и коллоидное состояние вещества. Расчет химических формул минералов. Типы химической связи в минералах и современные представления о теориях химической связи. Значение изотопного состава минералов.

Изображение структур минералов: типы координационных многогранников и типы структурных мотивов. Типы плотнейших упаковок атомов в кристаллах. Атомные и ионные радиусы.

Морфология минералов и минеральных агрегатов. Формы кристаллов, двойники, скрытокристаллические агрегаты, конкреции и др. Неоднородность минералов, микровключения в минералах, зональность, секториальное строение кристаллов. Понятие о структурах и текстурах пород и руд. Размеры минеральных индивидов. Псевдоморфозы. Понятие об онтогении минералов (зарождении и росте индивидов минералов, генезисе минеральных агрегатов, перекристаллизации и т.д.). Газово-жидкие включения в минералах; понятия о термобарогеохимии.

Диагностические свойства минералов: цвет, блеск, прозрачность, черта, твердость, спайность, удельный вес, магнитность, люминесценция, Физические свойства минералов: механические, оптические, магнитные, электрические и др. Их связь с составом и структурой и практическое значение. Природа окраски минералов, Направленное изменение свойств минералов при обогащении руд. Физико-химические свойства минералов.

Распространенность химических элементов в земной коре и мантии. Распространенность минералов. Главнейшие породо- и рудообразующие минералы, акцессорные и характерныередкие минералы.

Происхождение и изменение минералов. Понятие о процессах минералообразования: магматическом, пегматитовом и пневматолитовом, гидротермальном, метаморфическом и метасоматическом, гипергенном (выветривание горных пород, окисление и переотложение рудных минералов, образование и преобразование осадков). Парагенетический анализ минералов. Типоморфизм минералов. Генетические типы минералов и их эволюция в истории земной коры.

Главнейшие методы исследования минералов. Диагностические методы (по внешним признакам, микрохимическим методом с помощью паяльной трубки, микроскопия в проходящем и отраженном свете, рентгенография, термический анализ, инфракрасная спектроскопия, электронная микроскопия и микродифракция и др.). Фазовый анализ минеральных смесей. Современные методы анализа, исследования состава и структуры минералов, реального строения минералов: методы спектроскопии твердого тела, рентгеноструктурного анализа, электронной микроскопии высокого разрешения и др. Полевые методы диагностики минералов.

Принципы современной классификации минералов. Кристаллохимическая систематика минеральных видов. Минеральные виды и разновидности.

II. Описание минералов

Даются общие характеристики классов в отношении химического состава и структуры минералов, связи химического состава и структуры минералов с общими свойствами минералов класса, особенности генезиса и распределение в природе. Освещается роль русских и зарубежных ученых в изучении минералов класса, практическое и научное значение минералов данного класса. Приводится общая схема классификации минералов: внутри класса, даются принципы выделения подклассов и групп на основе имеющихся кристаллохимических данных о структурных типах и особенностях химической конституции отдельных минеральных групп.

При описании отдельных минералов указываются: химический состав (формула, важнейшие примеси), особенности структуры (в наиболее изученных случаях), сингония и характерные кристаллографические формы, физические свойства, типоморфные признаки, условия нахождения в природе, парагенетические закономерности, важнейшие спутники и продукты изменения, главные типы месторождений, практическое значение минералов.

Самородные элементы. Общая характеристика. Металлы, полуметаллы, твердые растворы, интерметаллиды, неметаллы.

Группа меди: медь, серебро, кюстелит, электрум, золото. Группа платиноидов (металлы и интерметаллиды): платина, палладий, родий, иридий, осмирид, осмий, иридоосмин, рутений, изоферроплатина, тетраферроплатина. Группа железа-никеля: железо, камасит, тэнит, никель, аварунит. Самородная ртуть и амальгамы золота и серебра.

Группа мышьяка: мышьяк, стибарсен (аллемонтит), сурьма, висмут.

Минералы группы углерода: алмаз, графит, лонсдейлит, шунгит.

Группа серы: альфа-сера, бета-сера.

Халькогениды - сернистые соединения (сульфиды) и их аналоги (арсениды, селениды, теллуриды и др.). Общая характеристика, особенности состава и кристаллохимия этого типа соединений. Характерные ассоциации элементов в сульфидах, арсенидах, теллуридах. Принципы систематики. Аргентит, акантит. Халькозин. Галенит, клаусталит, алтаит, алабандин. Сфалерит, вюртцит, гринокит. Троилит, пирротин, никелин. Куперит, бреггит, висоцкит. Пентландит, кобальтпентландит. Халькопирит, талнахит, станин.

Борнит. Кубанит. Киноварь, метациннобарит. Антимонит, висмутин. Аурипигмент, реальгар. Молибденит, тунгстенит. Ковеллин. Тетрадимит, теллуrowисмутин. Пирит, сперрилит, герсдорфит. Марказит, арсенопирит, глаукодот, лелленгит, саффорит, раммельсбергит. Скуттерудит, шмальтин, хлоантит, никельскуттерудит. Сложные сульфиды и их аналоги. Понятие о сложных сульфидах и сульфосолях. Особенности их структуры и состава. Пираргирит, прустит. Буланжерит, джемсонит. Козалит. Блеклые руды: тетраэдрит, теннантит.

Галогениды. Общая характеристика класса. Геохимические особенности соединений этого типа и принципиальные отличия геохимии фтора и хлора. Принципы систематики. Виллиомит. Флюорит. Криолит. Галит, сильвин, кераргирит. Нашатырь. Карналлит, бишофит.

Оксиды и гидроксиды. Общая характеристика окисных соединений. Химические и структурные особенности минералов класса. Принципы систематики класса.

Периклаз. Корунд, гематит. Уранинит. Рутил, брукит, анатаз, касситерит. Пиролозит. Куприт. Семейство кремнезема: альфа- и бетакварц, тридимит, кристобалит, коэсит, стишовит, лешательерит, опал. Хризоберилл. Группа шпинели: шпинель, герценит, ганит, магнетит, магнезиоферрит, франклинит, яacobсид, хромит. Ильменит, гейкилит, пирофанит. Колумбит, танталит. Самарскит. Эшинит. Пирохлор. Перовскит, лопарит. Гетит, диаспор. Манганит. Романешит, тодорокит. Лепидокрокит, бёмит. Гидраргиллит. Брусит. Сложные минеральные смеси - лимониты, бокситы, вады.

Силикаты и алюмосиликаты. Общая характеристика класса и распространенность силикатов в земной коре. Геохимические особенности класса силикатов. Развитие представлений о химической конституции силикатов. Современное учение о структурных типах силикатов. Представление об алюмосиликатах, боро- и боратосиликатах, бериллосиликатах, титано- и цирконосиликатах. Современная классификация силикатов.

- Островные силикаты с изолированными тетраэдрами $[\text{SiO}_4]^{4-}$ без добавочных (дополнительных) анионов (ортосиликаты). Фенакит, виллемит. Форстерит, (хризолит, оливин), фаялит. Кнебелит, тефроит. Пиральспиты: пироп, альмандин, спессартин. Уграндиты: гроссуляр (гидрогроссуляр, гибшит), андрадит (демантоид, меланит, шорломит), уваровит. Циркон (малакон, циртолит, гиацинт), торит, коффинит.

- Островные силикаты с изолированными тетраэдрами $[\text{SiO}_4]^{4-}$ и с добавочными анионами (ортосиликаты). Дистена(кианит), андалузит, силлиманит; топаз. Ставролит. Хлоритоид. Топаз. Сфен (титанит) и его разновидности.

- Островные силикаты со сдвоенными тетраэдрами и с добавочными анионами (диортосиликаты). Ильваит. Ринколит (ловчоррит). Лампрофиллит. Гемиморфит (каламин).

- Островные силикаты с изолированными и сдвоенными тетраэдрами. Везувиан (идокраз, вилуит). Цоизит (тулит, танзанит). Клиноцоизит, эпидот, пьмонтит, ортит.

- Островные силикаты кольцевого типа. Берилл и его разновидности (гелиодор, аквамарин, изумруд, воробьевит). Кордиерит. Диоптаз. Турмалин и его разновидности (шерл, дравит, эльбаит, рубеллит, индиголит, верделит).Аксинит. Эвдиалит, эвколит.

- Цепочечные силикаты. Пироксены: энстатит (бастит), бронзит, гиперстен, ферросилит; клиноэнстатит, клиноферросилит; диопсид (хромдиопсид, виолан, лавровит), геденбергит, йохансенит, авгит (титан-авгит, эгирин-авгит, омфацит); Эгирин, жадеит. Сподумен (гидденит, кунцит).

- Цепочечные силикаты. Пироксеноиды: волластонит, родонит (орлец).

- Ленточные силикаты. Общая характеристика и классификация амфиболов. Роль алюминия и щелочей в амфиболах. Магнезиально-железистые амфиболы: антофиллит (антофиллит-асбест), жедрит, куммингтонит, грюнерит. Кальциевые амфиболы: тремолит (тремолит-асбест), актинолит (нефрит, уралит), роговая обманка. Натриевые амфиболы: арфведсонит, глаукофан (родусит), рибекит (крокидолит).

- Ленточные силикаты (неамфиболового типа).Астрофиллит.

- Слоистые силикаты и алюмосиликаты. Общая характеристика слоистых силикатов. Типы сеток в структуре слоистых силикатов. Смешанослойные силикаты. Структурная роль алюминия. Минералы с двуслойными пакетами: кандиты (каолинит, диккит, накрит, галлуазит); аллофан, гизингерит; серпентины (антигорит, лизардит, хризотил и их разновидности – хризотил-асбест, серпофит, керолит, гарниерит, ревденскит). Минералы с трехслойными пакетами: тальк, пирофиллит; собственно слюды – мусковит (серицит, фуксит), парагонит, флогопит, биотит, лепидомелан, лепидолит, циннвальдит; хрупкие слюды – маргарит; гидрослюды – гидромусковит, вермикулит, глауконит; смектиты –

монтмориллонит (Fe-монтмориллонит, Ni-монтмориллонит, Cr-монтмориллонит = волконскоит), бейделлит (Fe-бейделлит, Cr-бейделлит), нонтронит (Ni-нонтронит); хризоколла. Минералы с четырехслойными пакетами: хлориты (пеннин, клинохлор, прохлорит, тюрингит, шамозит, кеммерерит, кочубеит). Пренит. Апофиллит. Датолит.

- Каркасные алюмо-, боро- и бериллосиликаты.

Полевые шпаты калиевые: санидин, ортоклаз (адуляр), микроклин (амазонит, письменный гранит). Полевые шпаты бариевые: цельзиан, гиалофан. Полевые шпаты натрий-кальциевые (плагиоклазы): ряд альбит-анортит (альбит, олигоклаз, андезин, лабрадор, битовнит, анортит). Боросиликатные аналоги полевых шпатов: данбурит. Фельдшпатоиды: лейцит, поллуцит; нефелин; скаполиты (мейонит, мицзонит, дипир, мариолит); канкринит, вишневит; содалит, лазурит; гельвин, даналит, гентгельвин. Цеолиты: натролит, ломонтит, анальцим, шабазит, стильбит (десмин), гейландит, клиноптилолит, морденит.

Бораты. Общая характеристика химических и структурных особенностей минералов. Типы анионных групп в боратах. Классификация. Островные бораты: котоит, ашарит, людвигит, иньонит, бура, тинкалконит, кернит. Цепочечные бораты: колеманит, гидроборатит, пандермит, боронатрокальцит (улексит). Слоистые бораты: сассолин. Каркасные бораты: боратит.

Карбонаты. Общая характеристика класса, особенности химического состава и структуры минералов. Принципы систематики. Кальцит, магнезит, смитсонит, родохрозит, сидерит. Арагонит, стронцианит, витерит, церуссыт. Доломит, анкерит. Малахит, азурит. Давсонит. Паризит, бастнезит. Термонатрит, сода, трона.

Нитраты. Общая характеристика минералов класса. Особенности химизма. Распространенность в природе. Селитры: нитронатрит, нитрокалит.

Фосфаты, арсенаты, ванадаты. Общая характеристика, структурные и химические особенности минералов. Принципы систематики. Монацит, ксенотим. Апатит, фосфориты. Пироморфит, миметизит, ванадинит. Вивианит, эритрин, аннабергит. Урановые слюдки: торбернит, отенит, карнотит, тюямунит, цейнерит. Скородит. Бирюза.

Сульфаты. Общая характеристика и особенности минералов класса. Принципы систематики. Барит, целестин, англезит. Ангидрит. Тенардит. Алуниит, ярозит. Брошантит. Гипс. Мирабилит. Кизерит. Эпсомит. Купоросы: моренозит, мелантерит, биберит, халькантит

Хроматы, молибдаты, вольфраматы. Общая характеристика класса. Различия в геохимии хрома, молибдена, вольфрама в земной коре. Распространенность минералов в процессах минераллообразования. Шеелит, повеллит, вульфенит. Вольфрамит, гюбнерит, ферберит. Крокоит.

III. Природные генетические ассоциации минералов

Методы установления генезиса минералов. Изучение состава и взаимоотношений минералов в минеральных ассоциациях как один из этих методов. Роль физико-химических факторов в процессе минералообразования. Развитие учения о генезисе минералов в геохимии природных процессов в трудах российских и зарубежных ученых.

Современные представления о генезисе минералов. Содержание термина "генезис минералов". Главные генетические типы минералообразующих процессов - эндогенные, экзогенные, метаморфические; их краткая характеристика и связь с различными геохимическими зонами земной коры. Краткая характеристика главных геохимических отличий поверхностных и глубинных зон земной коры. Связь эндогенных процессов минералообразования с магматической деятельностью. Понятие о стабильности и метастабильности минералов, об их изменениях при переходе из глубинных в поверхностные зоны коры и обратно. Биосфера. Роль живого вещества в процессах минералообразования. Количество минеральных видов и причины ограниченности минеральных видов, существующих стабильно в природных ассоциациях. Понятия о стабильности образования минералов в минеральных ассоциациях и генерациях минералов в минеральных месторождениях. Генетические признаки минералов. Типоморфизм минералов, типоморфные минеральные ассоциации.

Магматические минеральные ассоциации. Понятие о магме, состав магмы (химический и Фазовый). Характеристика особенностей кристаллизации магматических минералов и общие закономерности в изменении минеральных ассоциаций с понижением температуры. Дифференциация магмы при ее остывании. Отделение летучих от магматического расплава. Ликвация и кристаллизационная дифференциация. Последовательность выделения главных силикатных минералов. Общие схемы отделения и концентрации рудных минералов при магматическом процессе. Геохимическая роль главнейших химических элементов магмы в образовании магматогенных минералов.

Типичные минеральные ассоциации, связанные с основным и ультраосновным типами магмы. Минеральные ассоциации в месторождениях алмаза, хромита, титаномагнетита,

платиноидов, апатита. Минеральные ассоциации магматических сульфидных месторождений.

Минеральные ассоциации в пегматитах. Понятие "пегматит" и общая характеристика пегматитового процесса. Развитие учения о генезисе пегматитов в работах А.Е.Ферсмана, А.Н.Заварицкого и др. Характер изменения фазового состояния пегматитового расплава при его кристаллизации. Роль летучих при образовании пегматитов. Температурная градуировка пегматитового процесса; понятие о "геофазах" А.В.Ферсмана. Главнейшие летучие. Геохимические изменения состава последовательно кристаллизующихся минералов в пегматитовых образованиях. Роль метасоматических процессов.

Минеральный состав гранитных пегматитов. Типы структур и текстур, характерные для пегматитов и их генетическая характеристика главных зон. Общая схема классификации гранитных пегматитов так называемой "чистой линии" по А.Е.Ферсману. Парагенетическая характеристика и характерные минеральные ассоциации, структурно-текстурные особенности и т.д. отдельных типов гранитных пегматитов "чистой линии". Процессы замещения минералов в пегматитах. Их геохимическая и минералогическая характеристика. Щелочные пегматиты - сиенитовые и нефелин-сиенитовые.

Минеральные ассоциации карбонатитов. Понятие «карбонатит» и различные представления о генезисе карбонатитов. Минеральный состав, геохимические особенности и полезные ископаемые карбонатитов.

Минеральные ассоциации в скарнах. Общая характеристика контактово-метасоматических процессов минералообразования. Роль геологических факторов при образовании скарновых зон. Роль летучих, надкритических растворов и гидротермальных процессов в формировании метасоматических образований. Значение геологической среды для формирования различных типов минеральных образований при метасоматических процессах. Стадийность контактово-метасоматического процесса образования скарнов (по П.П.Пилипенко). Зональность контактово-метасоматических минеральных ассоциаций и связь зональности с подвижностью компонентов (по Д.С.Коржинскому). Образование минералов и минеральных ассоциаций в скарнах и роговиках. Гидротермальные изменения скарновых минералов. Типичные для скарнов ассоциации рудных минералов.

Минеральные ассоциации альбититов и грейzenов. Понятия "альбитит" и "грейзен". Физико-химические условия образования. Геохимическая и минералогическая

характеристика их. Зональность грейзеновых образований и связь их с гидротермальными ассоциациями. Главнейшие полезные ископаемые в альбититах и грейзенах.

Гидротермальные минеральные ассоциации. Связь гидротермальных растворов с магматическими очагами. Возможные способы отделения гидротермальных растворов в ходе развития и дифференциации магматических очагов. Химический характер гидротермальных растворов; возможные способы переноса вещества в гидротермальных растворах. Общие закономерности последовательного выделения главных элементов из растворов и зональность в размещении разных типов гидротермальных месторождений. Возможные способы отложения вещества в гидротермальных образованиях. Роль коллоидов в отложении минералов гидротермальных ассоциаций; признаки, указывающие на отложение минералов из коллоидных систем. Геохимические особенности гидротермальных растворов. Типичные минеральные ассоциации в гидротермальных образованиях. Минеральные ассоциации так называемых безрудных гидротермальных образований (цеолитный процесс). "Альпийские жилы", месторождения асбеста, талька и других, их генетическая характеристика. Главнейшие минеральные ассоциации в сульфидных рудных жилах. Типы минеральных ассоциаций и их связь с глубиной образования. Главнейшие полезные ископаемые гидротермального генезиса.

Минеральные ассоциации гипергенного генезиса. Общие условия и факторы, определяющие характер гипергенных процессов. Стадийность в образовании гипергенных минеральных комплексов. Полезные ископаемые при гипергенных процессах.

Условия и закономерности образования минералов при выветривании сульфидных минеральных ассоциаций. Зональность зоны окисления и ее причины. Влияние боковых пород на парагенетические ассоциации минералов в зоне гипергенеза сульфидных месторождений. Минеральный парагенезис окисленных руд свинцово-цинковых и медных месторождений.

Условия и закономерности образования минералов в коре выветривания пород. Стадийное гидрохимическое выветривание минералов; новообразования и остаточные минералы. Профиль коры выветривания и характеристика минеральных ассоциаций в главных зонах на примере коры выветривания ультраосновных и глиноземистых пород. Минералы, образующиеся в коре выветривания. Латеритный тип выветривания (бокситизация).

Механическая и гидрохимическая дифференциация вещества при минералообразовании в осадках. Россыпи и их главнейшие минеральные ассоциации. Условия и порядок выделения минералов.

Минералы, образующиеся при биогенных процессах осадконакопления.

Минеральные ассоциации метаморфических образований. Краткая физико-химическая характеристика процессов образования минералов при региональном метаморфизме. Понятие о зонах глубинности и минеральной ассоциации различных зон глубинности. Метаморфогенные фации. Особенности структур и минеральных агрегатов при метаморфизме. Типичные минеральные ассоциации в различных по исходному составу метаморфических породах. Примеры минеральных ассоциаций в метаморфических месторождениях некоторых полезных ископаемых; железистые кварциты, силлиманит-дистеновые породы, месторождения наждака, корунда, графита, окисно-силикатных марганцевых руд. Минералы импактитов. Минералы высоких давлений.

Узловые проблемы изложенного курса. Основные достижения и пути дальнейшего развития минералогии в России и за рубежом. Главнейшие проблемы теоретической и практической минералогии.

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.Веровочкин, Л.А.Горяинов и др. М: Металлургия, 1971.
 3. Journal of Crystal Growth (периодическое издание).

Рентгеноструктурный анализ

1. Пущаровский 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. Пущаровский 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

Минералогия

1. Бетехтин А.Г. Курс минералогии. М., КДУ, 2008.
2. Булах А.Г., Кривовичев В.Г., Золотарёв А.А. Общая минералогия. М., Академия, 2008.
3. Годовиков А.А, Минералогия. М., Недра, 1983.
4. Костов И, Минералогия. М., Мир, 1971.
5. Лазаренко Е.К. Курс минералогии. М., Высшая школа, 1971.
6. Марфунин А.С. Введение в физику минералов. М., Недра, 1974.
7. Миловский А.В, Кононов О.В. Минералогия. М., 1982.
8. Смирнов В.И. Геология полезных ископаемых. М., Недра, 1976.
9. Смольянинов Н.А. Практическое руководство по минералогии. М., Недра, 1972.
10. Яхонтова Л.К., Грудев А.И. Зона гипергенеза рудных месторождений. М., МГУ, 1978.