

Составители:
член-корр.РАН В.С. Урусов
д.г.-м.н. Н.Р. Хисина

1. Кристаллическая решетка. Элементарный параллелепипед. Элементы симметрии в микрокристаллографии. 14 решеток Браве. 230 пространственных групп симметрии. Правильные системы точек.

2. Физика рентгеновских лучей. Взаимодействие рентгеновских лучей с веществом. Диффракция рентгеновских лучей в кристалле. Закон Брегга-Вульфа. Обратная решетка. Применение обратной решетки к решению дифракционных задач.

3. Экспериментальные методы рентгеноструктурного анализа. Способы получения и расчета рентгенограмм монокристалла и порошка. Определение симметрии, размеров и содержания элементарной ячейки. Способы представления кристаллических структур на плоскости и в пространстве.

4. Четыре основных типа межатомной связи в кристаллах и их структурные, физические и химические характеристики. Молекулярный, цепочечный, слоистый, координационный (каркасный) и смешанный классы кристаллических структур. Их конкретные представители.

5. Плотнейшие шаровые упаковки, их теория и описание на их основе простейших структур с формулами AB , AB_2 , AB_3 , A_2B_3 . Координационное число. Координационные полиэдры. Закономерности строения координационных структур (5 правил Полинга) для ионных соединений. Структурный тип. Изотипные структуры. Морфотропия. Полиморфизм. Политипия.

6. Кристаллические структуры минералов из классов оксидов, галоидных соединений, карбонатов, сульфатов, фосфатов, вольфраматов, боратов, силикатов. Особенности кристаллической структуры силикатов. Основные принципы классификации силикатов по кристаллохимическим данным. Первая и вторая главы кристаллохимии силикатов по Н.В.Белову.

7. Ионные, ковалентные и металлические радиусы атомов. Энергия кристаллической решетки. Энергия атомизации кристалла. Энергия атомизации и свойства кристалла: плавление, твердость, сжимаемость, растворимость. Электроотрицательность и степень ионности связи. Эффективные заряды атомов и современные физические методы их оценок.

8. Характеристика основных методов современной физики минералов: ЯГР, ЯМР, ЭПР, инфракрасная спектроскопия, электроно-зондовый микроанализ, просвечивающая электронная микроскопия и микродифракция и др.

9. Изоморфизм. Эмпирические правила изоморфизма (изоморфные ряды, закон диагоналей Ферсмана, правила полярности Гольдшмидта и др.). Изовалентный и гетеровалентный изоморфизм.

10. Распределение химических элементов между кристаллическими фазами. Геотермометры и геобарометры на основе межфазовых равновесий. Термодинамика минералов. Распределение изоморфной примеси в кристалле. Геотермометры, геобарометры и геоспидометры на основе внутрикристаллических равновесий.

11. Термодинамические модели твердых растворов. Компонент и его химический потенциал. Свободная энергия Гиббса. Идеальные и регулярные твердые растворы. Диаграммы состояния.

12. Дефектная структура реального кристалла. Типы дефектов. Тепловые и примесные точечные дефекты. Точечные дефекты, дислокации и плоские дефекты. Нестехиометрия. Роль дефектов в процессах окисления и гидратации минералов. Эффект улавливания микропримеси.

13. Основы количественной теории изоморфизма. Энергия (энтальпия) смешения. Расчет пределов изоморфной смесимости. Ограниченные и непрерывные твердые растворы. Зависимость пределов изоморфной смесимости от температуры и давления. Фазовые диаграммы твердых растворов. Химический сольвус, когерентный сольвус, когерентная спинодаль.

14. Концепция вынужденных равновесий. Примеры смещения равновесий за счет вклада энергии упругих напряжений, фазового размерного эффекта, стресса.

15. Поведение твердых растворов при изменении температуры и давления. Виды твердофазовых превращений (распад твердого раствора, упорядочение изоморфных атомов, полиморфные превращения).

16. Распад твердых растворов. Механизмы распада (спинодальный распад, гомогенное зарождение и рост, гетерогенное зарождение и рост). Ориентационные соотношения и типы границ (когерентные, полуккогерентные, некогерентные) при образовании структур распада. Упругая и поверхностная энергия внутренних границ в кристалле при образовании структур распада. Зоны Гинье-Престона. Распад твердых растворов и особенности фазовых диаграмм минералов на примере клинопироксенов, щелочных полевых шпатов, титаномагнетитов.

17. Упорядочение твердых растворов. Механизмы упорядочения. Антифазные домены. Типы внутренних границ в кристалле, образующихся при упорядочении. Ближний и дальний порядок. Степень порядка. Коэффициент внутрикристаллического межпозиционного распределения изоморфных атомов. Энергия упорядочения, энергия позиционного предпочтения. Свойства ионов (размер, валентность, электроотрицательность) и свойства занимаемых ионами позиций в кристалле (размер, дисторсия, электростатический потенциал) как

кристаллохимические факторы упорядочения. Упорядочение Fe и Mg в структурах оливинов и пироксенов.

18. Кинетика твердофазовых превращений. Энергия активации. Константа скорости превращения. Т-Т-Т-диаграммы превращения (диаграммы время-температура-степень превращения) для процессов распада и упорядочения твердых растворов. Геоспидометрия.

19. Полиморфные превращения твердых растворов. Механизмы полиморфных превращений. Зависимость Р-Т параметров полиморфных переходов от состава. Полиморфные переходы в системе рутил-касситерит, MgSiO_3 - FeSiO_3 , KAlSi_3O_8 - $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$.

Рекомендуемая литература

- Г.Б.Бокий. Введение в кристаллохимию. МГУ, 1954
Н.В.Белов. Очерки по структурной минералогии. "Недра", 1976
У.Л.Брегг, Г.Ф.Кларинбулл. Структура минералов. М., "Мир", 1967
В.С.Урусов. Энергетическая кристаллохимия. М., "Наука", 1975
В.С.Урусов. Теория изоморфной смесимости. М., "Наука", 1977
В.С.Урусов. Теоретическая кристаллохимия. МГУ, 1987
В.С.Урусов, В.Л.Таусон, В.А.Акимов. Геохимия твердого тела. М., "ГЕОС", 1997
А.Патнис, Дж.Мак-Коннелл. Основы поведения минералов.
Н.Р.Хисина. Субсолидусные превращения твердых растворов породообразующих минералов. М., "Наука", 1987