

© 1990 г.

КРИСТАЛЛОХИМИЯ НА СОВРЕМЕННОМ ЭТАПЕ

Зоркий П. М.

Информация о пространственном расположении атомов в молекулах и кристаллах, о расположении молекул в различных конденсированных фазах в настоящее время используется столь активно, так что не будет большим преувеличением назвать современную химию структурной. Действительно, на структурных представлениях базируются очень многие ее разделы. Источником наиболее полных, достоверных и точных сведений о структуре веществ ныне стала кристаллохимия, опирающаяся главным образом на рентгеноструктурный анализ. Уже в 50—60 гг. на основе этого метода началось накопление систематических данных о строении самых разнообразных химических соединений. Эти данные нашли широкое применение для обсуждения свойств не только кристаллов, но и жидкостей, растворов, аморфных веществ, мезофаз.

В последние два десятилетия благодаря широкому распространению автоматических дифрактометров, развитию вычислительной техники и программного обеспечения, значительному увеличению числа исследователей, использующих рентгеноструктурные данные, кристаллохимия переживает качественно новый этап своего развития. Достаточно полное представление о нем дают статьи, составляющие содержание настоящего выпуска «Успехов химии». Основные черты этого этапа заключаются в следующем.

Во-первых, в настоящее время стало возможным быстрое накопление значительного объема структурной информации по широкому кругу представителей исследуемого класса химических соединений (в том числе и достаточно сложных). Это привело к быстрому развитию систематической кристаллохимии, которая выявляет закономерности и специфические особенности строения веществ, относящихся к данному химическому классу. Пример такого исследования дает статья Л. М. Школьниковой и М. А. Порай-Кошица об аминокалкилкарбоновых и аминокалкилфосфоновых комплексах. Существенно, что в рамках систематической кристаллохимии часто удается успешно интерпретировать и прогнозировать практически важные свойства веществ, например фотохимические свойства спиропиранов (работа С. М. Алдошина), электропроводность дитиолатных комплексов (работа В. Е. Шкловера, С. С. Нагапетяна, Ю. Т. Стручкова), фазообразование в оксидных системах (работа В. А. Ефремова).

Во-вторых, благодаря развитию прецизионных низкотемпературных исследований оказалось возможным изучать вещества, при комнатной температуре находящиеся в жидком состоянии, и получать при этом ра-

нее недоступную информацию, например сведения о среднеквадратичных смещениях атомов в процессе тепловых колебаний (статья М. Ю. Антипина).

В-третьих, прецизионный рентгеноструктурный анализ привел к возможности обстоятельного изучения деталей распределения электронной плотности в химических соединениях, что открывает новые перспективы развития теории химической связи (статья П. М. Зоркого и А. Э. Масунова).

Благодаря развитию двух последних направлений рентгеноструктурных исследований, существенно трансформировалось понятие модели кристаллической структуры, которая теперь может быть представлена как динамическая (атомы в виде тепловых эллипсоидов, а в некоторых случаях и с учетом ангармонизма) и как континуальное распределение электронной плотности с вкрапленными в него атомными ядрами. Эти достижения знаменуют собой важный успех не только кристаллохимии, но и химии в целом.