

ОБЗОРЫ

УДК 548.1

СИМВОЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ УПАКОВОК МОДУЛЕЙ
И КОДЫ СТРУКТУР КРИСТАЛЛОВ

В.В. Иванов, В.М. Таланов

Южно-Российский государственный технический университет, Новочеркасск

E-mail: valtalanov@mail.ru

*Статья поступила 8 февраля 2012 г.**С доработки — 31 марта 2012 г.*

Представлен краткий обзор работ по кристаллохимическим особенностям строения и способам описания структурных типов кристаллов. Предложен вариант универсальной системы символьного описания структурных типов кристаллов и модулярных структур с помощью структурных кодов. В основу структурного кода заложено описание геометрии и топологии базового модуля структуры. Структурные коды предназначены для идентификации и систематизации структурных типов веществ, формализации топологических преобразований структур, определения структурных модулей и выявления генетических взаимосвязей между структурами.

Ключевые слова: базовый структурный модуль, структурный тип кристаллов, модулярные структуры, структурные коды кристаллов.

ВВЕДЕНИЕ

Систематизация, описание и классификация структурных типов кристаллов, а также установление генетической взаимосвязи между ними — одна из основных задач теоретической кристаллохимии. Отметим, что не все существующие подходы к описанию кристаллических структур веществ и способы их представления (символьные описания, геометрические изображения и др.) полностью раскрывают генетические связи между структурными типами кристаллов. Символьное описание структур кристаллов в основном ограничивается описанием законов упаковки структурных модулей в кристаллическом пространстве, представленным, в частности, в виде упаковочного кода. Этот код достаточен для проведения сравнительного кристаллохимического анализа и классификации, однако для определения генетических связей анализируемой структуры с другими родственными ей структурами необходима дополнительная структурная информация.

Представление о модулярном строении существенно расширяет систему структурной систематики и классификации кристаллических веществ, в особенности для неорганических кристаллов, а также позволяет описать целое множество классов модулярных структур.

Для описания модулярных структур предлагается введение системы структурных кодов. Символика кода должна отражать в латентном виде не только способ упаковки и основные геометрические и топологические характеристики модулей в структуре, но и возможные кристаллохимические соотношения и особенности формирования вероятных модулярных структур. В дополнение к описанию структурного модуля символическое описание модульных структур позволит существенно раскрыть эвристические возможности метода комбинаторного модулярного дизайна. Анализ известных описаний структур кристаллов, обсуждение способа символично-