

Р. Є. Гладішевський

Кристалохімія

КРИСТАЛОХІМІЯ – наука про взаємозв'язок між хімічним складом, кристалічною структурою та властивостями речовин. К. тісно пов'язана із [кристалографією](#). На підставі хім. складу речовини, із застосуванням дифракц. методів аналізу (рентгеноструктур., нейтрон-, електроннограф.) чи за результатами спектроскопіч. досліджень К. дозволяє визначити кристалічну структуру, пов'язати її з електрон. будовою атомів і на цій основі пояснити фіз. та хім. властивості матеріалу. Як наслідок, К. уможливорює створення наук. засад вибору речовин для розробки нових матеріалів із необхідними для практич. застосування властивостями. Серед осн. завдань – визначення кристаліч. структури сполук, типу хім. зв'язку між структур. одиницями; створення наук. підґрунтя для ідентифікації фаз у природ. і синтет. матеріалах, встановлення їхнього хім. складу; систематизація кристаліч. речовин, що є передумовою передбачення нових структур; виведення взаємозв'язків між кристаліч. структурою, мікроструктурою і фіз. та хім. властивостями. Предметом вивчення К. є елементи симетрії, сингонії, точк. та простор. групи, типи ґраток Браве (осн. поняття кристалографії); радіуси атомів та іонів, довжини зв'язків, тип хім. зв'язку; прогнозування кристаліч. та аморф. будови (правила Полінґа, Захаріасена); фазові переходи, діаграми стану; взаємозв'язок структура–властивості (принципи Неймана та Кюрі); неідеал. структури (дефектні, модульов., композитні; квазікристали).

Осн. поняттям К. є кристалічна структура (реальне розташування структур. одиниць у просторі), яка складається з мотиву та ґратки, і їй притаманні дальній порядок і симетрія. Просторова ґратка – сукупність вузлів (матем. точок), які у кристалі в будь-якому напрямі утворюють ряди з однак. проміжками. Найменший паралелепіпед, за допомогою якого побудована просторова ґратка та повністю без порожнин заповнений простір, називають елементар. коміркою. Вузлами просторової ґратки обирають атоми, іони або молекули (структурні одиниці кристала). Для опису кристаліч. структури вказують її симетрію (просторову групу симетрії), параметри елементар. комірки (довжину ребер a , b , c та кути α , β , γ) і координати атомів у комірці (x , y , z), що дозволяє розрахувати міжатомні відстані та валентні кути. Таку модель кристаліч. структури називають статичною. Для повнішої інформації необхідні відомості про амплітуди коливань атомів (динамічна модель), а також про розподіл електрон. густини у між'ядер. просторі. Осн. експерим. методи К. –

дифракційні: рентгенів. структур. аналіз, нейтронографія, електроннографія. Рентгенів. структур. аналіз – найпоширеніший та найрозвиненіший інструмент К., завдяки якому отримують розподіл електрон. густини у кристалі. У нейтронографії аналогічно на основі амплітуд ядер. розсіювання визначають розподіл ядер. густини у комірці. В електроннографії визначають розподіл електростатич. потенціалу (сумарного – ядер і електронів). Цими методами досліджують метали і сплави, тверді прості речовини–неметали, мінерали, неорган. та орган. сполуки, білки, нуклеїнові кислоти, віруси, а також полімери, аморфні матеріали, рідини, гази.

Зародженню К. як науки передував розвиток кристалографії: встановлено закономірності внутр. будови кристалів (Р.-Ж. Аюї, О. Браве). 1883 В. Барлоу на основі уявлень про найщільніші упаковки атомів передбачив 3 найпростіші кристалічні структури – NaCl, CsCl, ZnS (сфалерит). Найважливішим досягненням кін. 19 ст. стало виведення просторових груп симетрії, здійснене 1891 Є. Федоровим та А.-М. Шенфлісом. Як наука К. сформувалася невдовзі після відкриття М.-Т.-Ф. фон Лауе (1912) дифракції рентгенів. проміння, яка швидко стала потуж. методом вивчення внутр. будови твердих речовин – рентгенів. структур. аналізом. 1913 В.-Г. (батько) та В.-Л. (син) Бреґґи вивчали кристалічні структури багатьох металів, галогенідів, оксидів, сульфідів, алмазу. Перше значне досягнення теор. К. – розрахунок енергії іонних кристалів, проведений 1918 М. Борном і А. Ланде. 1926–27 створ. системи кристалохім. іонних та атом. радіусів (В.-М. Гольдшмідт, Л. Полінґ).

На основі концепції іонних радіусів В.-М. Гольдшмідт пояснив явища ізоморфізму, морфотропії та поліморфізму. 1939 Л. Полінґ сформулював осн. принципи будови іонних кристалів, поняття атом. орбіталей і гібридизації, розвинув теорію найщільнішої упаковки атомів у кристалах. У подальші роки К. окремих класів сполук розвивали видатні вчені В. Юм-Розері, Ф. Лавес, Е. Цинтль, Е. Парте, В.-Г. Захаріазен, які є засновниками різних напрямів неорган. К., а також Ф. Крік і Дж. Ватсон (К. білків та нуклеїнових кислот), М. Белов (К. силікатів, заг. К.), Г. Бокий та М. Порай-Кошиць (заг. К.), О. Китайгородський, Ю. Стручков (орган. К.). В Україні знач. внесок у розвиток К. комплекс. сполук зробили київ. вчені [А. Голуб](#) та [В. Скопенко](#). Світ. визнання має львів. кристалохім. наук. школа, основою досягнень якої є К. інтерметаліч. сполук, а засновниками – [Є. Гладішевський](#) та [П. Крип'якевич](#). Окрім Львів. університету, К. вивчають на каф. неорган. хімії Запоріз., Харків., Черкас. та Чернів. університетів.

Рекомендована література

1. Бокий Г. Б. Кристаллохимия. Москва, 1971;
2. Шевченко Л. Л. Кристаллохимия. К., 1993;
3. Павлишин В. І. Основи кристаллохімії мінералів. К., 1998;

4. Савин В. В. Кристаллохимия промежуточных фаз и аморфных сплавов на основе переходных металлов. З., 2005;
5. Мазуркевич Я. С. Кристаллохімія: Навч. посіб. Чг., 2006;
6. Бойко В. І. Кристаллохімія: Навч. посіб. Чк., 2009.

Покликання на статтю:

Кристаллохімія / Р. Є. Гладишевський // Енциклопедія Сучасної України [Електронний ресурс] / Редкол.: І. М. Дзюба, А. І. Жуковський, М. Г. Железняк [та ін.]; НАН України, НТШ. – К. : Інститут енциклопедичних досліджень НАН України, 2014. – Режим доступу:

<https://esu.com.ua/article-1606>

2001-2023 © Ця енциклопедична стаття захищена авторським правом згідно з чинним законодавством України ([докладніше](#)).