

УДК 548.0

ВСЕОБЩНОСТЬ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

С.Ф. Солодовников^{1,2}¹ Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск

E-mail: solod@niic.nsc.ru

² Новосибирский государственный университет

Статья поступила 3 февраля 2014г.

Коротко рассмотрен исторический путь кристаллографии — от "служанки минералогии" до фундамента современных естественных наук, что стало возможным благодаря открытию в 1912 г. дифракции рентгеновских лучей кристаллами и рентгеноструктурного анализа с последующим бурным развитием структурных представлений в химии и других науках.

Ключевые слова: кристаллография, кристаллохимия, история, кристаллическая структура, структурный дизайн, структурная химия.

"...Мы трудились ежедневно до глубокой ночи, изучая новые миры, которые раскрывались перед нами в безмолвной лаборатории".

Уильям Лоуренс Брэгг

Кристаллы можно встретить везде. Снежинки зимой, пляжный песок летом, крупы соли и величественные горы, драгоценные камни и невзрачная накипь, мягкая глина и твердый алмаз, старинная монета и современный полупроводниковый чип — все это кристаллы. Все кристаллы, независимо от их происхождения и свойств, объединены общим главным качеством — правильным, регулярным расположением атомов или молекул в пространстве. Кристаллы, их образование, морфологию, строение, симметрию и физико-химические свойства изучает наука кристаллография. Нынешний 2014 год резолюцией Генеральной Ассамблеи ООН от 3 июля 2012 г. объявлен Международным годом кристаллографии [1]. В резолюции отмечается, что наши представления о материальном мире в существенной степени основаны на кристаллографических знаниях, дающих возможность изучать строение белков и малых молекул, разрабатывать новые лекарства, материалы, нано- и биотехнологии, развивать новые многообещающие исследования. Каким же чудесным образом кристаллография, по словам академика А.В. Шубникова, сказанным в 1930-х годах, "наука скучная, сухая и никому не нужная" [2], добилась такого признания? Какой путь прошла кристаллография и чего она достигла в XXI веке? С чего все начиналось?

Можно уверенно сказать — с красоты кристаллов, хотя так — κρύσταλλος (лед) — древние греки поначалу называли только встречавшиеся в Альпах кристаллы горного хрусталя, считая их навеки застывшим льдом. Многогранная форма кристаллов, их блеск, игра света и цвета давно привлекали людей, которые приписывали кристаллам защитные, лечебные, магические

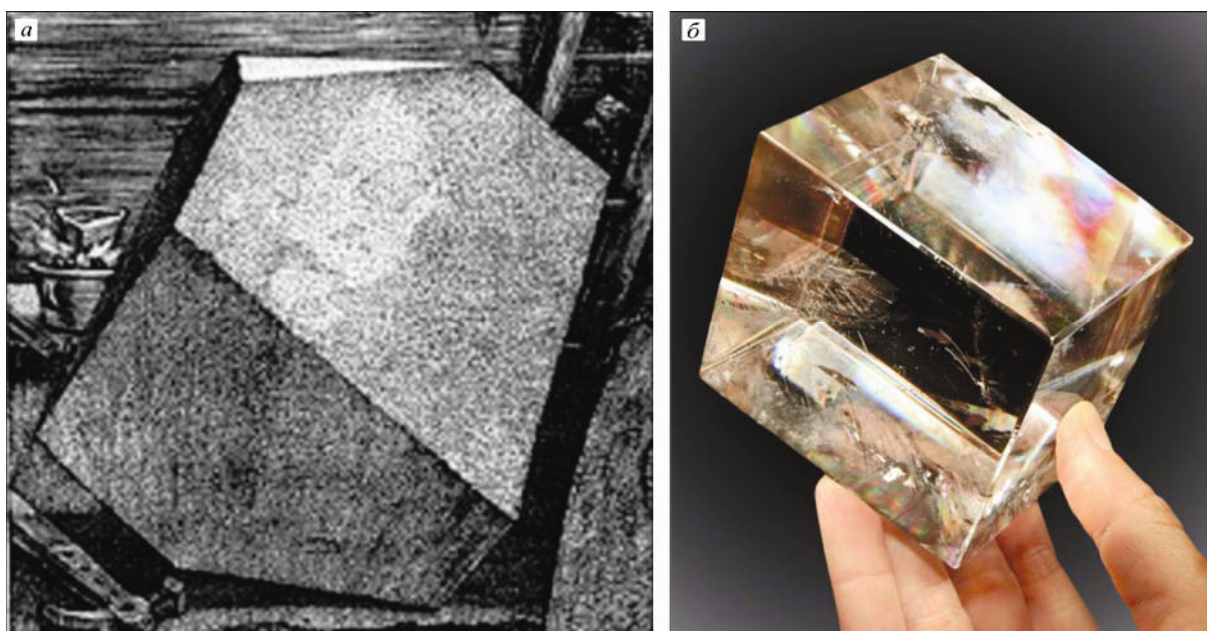


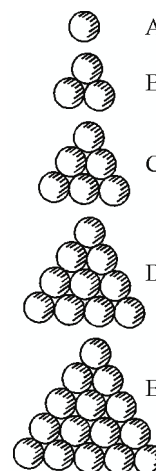
Рис. 1. Фрагмент гравюры А. Дюрера "Меланхолия I" (1514) (а); кристалл исландского шпата CaCO_3 (б)

и другие чудодейственные свойства, но пока мало интересовались научной стороной дела. Вполне возможно, что древние греки, давшие название кристаллам и преуспевшие в геометрии, могли обратить внимание на их многогранность. Может быть, именно кристаллы навели древнегреческим ученым представление о правильных многогранниках — совершенных геометрических телах, форму которых Платон приписывал элементам четырех стихий (земле, воздуху, воде и огню) и самой Вселенной [3].

Думается, что одним из тех, кто усомнился в платоновых телах как идеальных творениях природы и универсальных образцах геометрической правильности, был сын ювелира и великий художник Альбрехт Дюрер (1471—1528). Возможно, в своей самой известной гравюре "Меланхолия I" (1514) он первым поставил вопрос о том, почему кристаллы имеют такую форму (рис. 1), как у исландского шпата — ромбоэдрическую [3, 4].

Следуя традиции Платона и Аристотеля, геометрические формы мировой гармонии искал великий астроном и математик Иоганн Кеплер (1571—1630). В 1609 г. он открыл законы движения планет, но еще раньше обнаружил, что их расстояния от Солнца соответствуют радиусам вписанных и описанных сфер пяти вложенных друг в друга Платоновых тел. Другое замечательное наблюдение Кеплера — гексагональная форма снежинок, которую он объяснил плотнейшей упаковкой сферических частиц (рис. 2). Считается, что его шуточный трактат "Новогодний подарок, или о шестиугольном снеге" (1611) — самая первая серьезная работа по кристаллографии [3]. В ней Кеплер сформулировал гипотезу о том, что наибольшую плотность имеет пирамидальная укладка равных шаров, т.е. кубическая плотнейшая упаковка. Эта гипотеза об известных всем плотнейших шаровых упаковках доказана только в 1998 г. [5]. Объяснения форм кристаллов укладками шаровых и эллипсоидальных частиц высказывали также Р. Гук, Х. Гюйгенс, М.В. Ломоносов и другие ученые. Очень близко к решеточному строению кристаллов подошел гениальный И. Ньютон (1643—1727), который в своей "Оптике" (1704) писал о кристаллах исландского шпата: "Нельзя ли предположить, что при образовании этого кристалла частицы не только установились в строй и ряды, застывая в правильных фигурах, но также посредством некоторой полярной способности повернули свои одинаковые стороны в одинаковом направлении". Сам термин "кристаллография" впервые появился в 1719 г. в работе швейцарского ученого М.А. Капеллера (1685—1769), посвященной изучению кварца и других минералов [3].

Рис. 2. Фрагмент трактата И. Кеплера "Новогодний подарок, или о шестиугольном снеге" (1611)



Однако, несмотря на заслуги предшественников, основоположниками кристаллографии по праву признаны трое ученых — Николай Стенон (1638—1686), Жан Батист Роме-де-Лиль (1736—1790) и Рене Жюст Гаюи (1743—1822), которые, изучая формы природных кристаллов, сформулировали первые эмпирические законы кристаллографии и помогли ввести в химию представления о корпускулярном, дискретном строении кристаллов, молекул и других химических объектов. Удивительно, что только на основании исследований спайности Гаюи в 1784 г. пришел к выводу, что кристаллы складываются из мельчайших одинаковых многогранных "кирпичиков", близко подойдя к пониманию структуры кристаллов и главного их атрибута — пространственной решетки. Влияние химии на кристаллографию проявилось в опытах ряда ученых по кристаллизации различных неорганических веществ из растворов и расплавов, в результате чего блестящий немецкий химик и кристаллограф Эйльгард Митчерлих (1794—1863) открыл в 1819—1823 гг. важнейшие явления — изоморфизм и полиморфизм, которые затем легли в основу кристаллохимии. Изоморфизм (сходство форм кристаллов аналогичного химического состава) очень помог установлению аналогий между элементами и их атомных весов, что способствовало общему прогрессу химии и открытию Периодической системы. Теоретические основы кристаллографии были заложены Огюстом Браве (1811—1863), который в 1848 г. дал отточенные математические формулировки ее центральных понятий — кристаллической решетки и симметрии. Браве ввел названия: центр, ось и плоскость симметрии и первым дал исчерпывающую симметричную классификацию решеток. Именно из кристаллографии идеи симметрии проникли в физику и химию, найдя свое высшее выражение в выводе Евграфом Степановичем Федоровым (1853—1919) и Артуром Шёнфлисом (1853—1928) в 1890—1891 гг. 230 пространственных групп симметрии кристаллов. Иным путем к познанию структуры вещества шли химики XIX столетия, которые, накапливая опыт по синтезу и изучению свойств главным образом органических соединений, приходили к выводам об их строении. Трудом классиков химии — от Луи Пастера до Альфреда Вернера — были заложены основы стереохимии — науки, изучающей пространственное строение молекул и его влияние на свойства веществ. Особое место среди работ этого периода занимают исследования британского ученого Уильяма Барлоу (1845—1934), который рассматривал кристаллические структуры как плотные укладки шаров — как одинаковых, так и различных по размерам. Им в 1883—1898 гг. была выведена неизвестная ранее плотнейшая гексагональная упаковка и предсказаны структуры NaCl, CsCl (рис. 3), алмаза, сфалерита ZnS и других веществ.

Достижения кристаллографии XIX столетия подготовили почву для одного из величайших научных прорывов — открытия в 1912 г. дифракции рентгеновских лучей М. Лауэ,

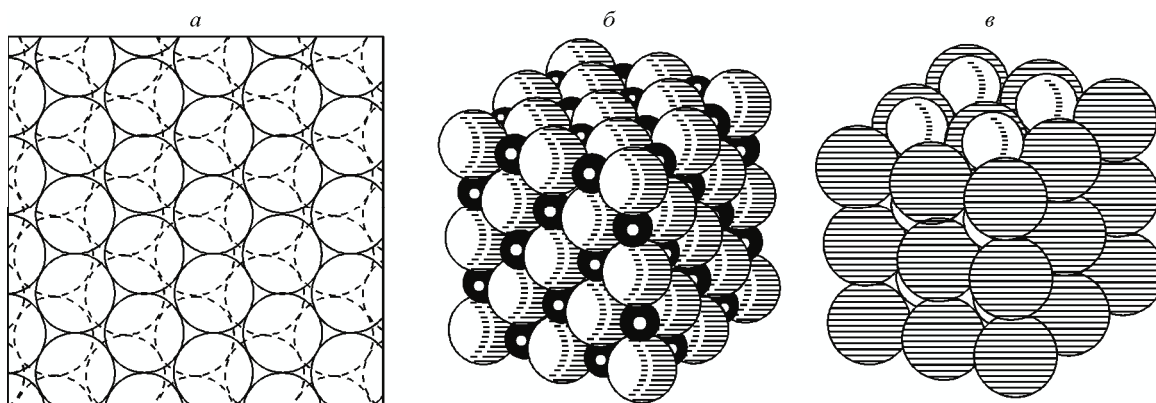


Рис. 3. Рисунки из статьи У. Барлоу [6]: ГПУ (а); структура NaCl (б); структура CsCl (в)

В. Фридрихом и П. Книппингом, которое А. Эйнштейн назвал "самым красивым экспериментом XX века" [7]. За ним в работах У.Л. Брэгга (сына) и У.Г. Брэгга (отца) последовало рождение в 1912—1913 гг. рентгеноструктурного анализа. Первой структурой, расшифрованной Брэггами, стала структура NaCl, модель которой была предложена за 30 лет до этого У. Барлоу. Интересно, что 23-летний Брэгг-младший затруднялся в описании новых структур и в феврале 1914 г. писал Е.С. Федорову: "Я нахожу Ваш метод очень интересным, так как мне очень трудно описывать структуру словесно, когда я ее уже определил. Если уже есть разработанный способ обозначения положений атомов в кристалле, я буду очень рад, если бы Вы сообщили мне о нем" (цит. по [8]). Оценивая тот период с высоты прожитых лет, У.Л. Брэгг в 1958 г. признавался: "Федоров был тогда для меня почти легендарной личностью, разработавшей 230 классов кристаллов. Немногие в то время интересовались кристаллографией. Такой интерес относился к внешним формам кристаллов, а не к их внутренней структуре. Когда я начал анализировать кристаллы с помощью рентгеновских лучей, я почти ничего не знал об их геометрии. Нам было удивительно узнать, что такие великие люди, как Фёдоров и Барлоу..., изучили внутреннюю геометрию кристаллов и обеспечили надежную теоретическую основу для нашей работы" (цит. по [8]).

Открытие рентгеноструктурного анализа доказало существование атомов и привело к переходу от умозрительных кабинетных построений к экспериментальной структурной кристал-

*Лауреаты нобелевских премий в области кристаллографии**

Год, наука	Лауреаты премии	Обоснование награды
1914, физика	Макс фон Лауэ	За открытие дифракции рентгеновских лучей на кристаллах
1915, физика	Уильям Генри Брэгг, Уильям Лоуренс Брэгг	За заслуги в исследовании структуры кристаллов с помощью рентгеновских лучей
1937, физика	Клинтон Джозеф Дэвиссон, Джордж Паджет Томсон	За экспериментальное открытие дифракции электронов на кристаллах
1962, физиология или медицина	Фрэнсис Крик, Джеймс Уотсон, Морис Уилкинс	За открытия, касающиеся молекулярной структуры нуклеиновых кислот и их значения для передачи информации в живых системах
1964, химия	Дороти Кроуфут Ходжкин	За определение с помощью рентгеновских лучей структур биологически активных веществ
1976, химия	Уильям Нанн Липскомб	За исследование структуры боранов, проясняющих проблемы химических связей
1982, химия	Аарон Клуг	За разработку метода кристаллографической электронной микроскопии и прояснение структуры биологически важных комплексов нуклеиновая кислота — белок
1985, химия	Херберт Аарон Хауптман, Джером Карле	За выдающиеся достижения в разработке прямого метода расшифровки структур
1988, химия	Иоганн Дайзенхофер, Хартмут Михель, Роберт Хубер	За установление трёхмерной структуры фотосинтетического реакционного центра
1994, физика	Клиффорд Шалл	За создание метода нейтронной дифракции
2003, химия	Питер Эгр, Родерик Маккинон	За открытия, касающиеся каналов в клеточных мембранах
2009, химия	Венкатраман Рамакришнан, Томас Стейц, Ада Йонат	За исследования структуры и функций рибосомы
2011, химия	Дан Шехтман	За открытие квазикристаллов

* По материалам сайта http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/.

лографии и кристаллохимии, которые теперь могли опираться на данные прямых исследований внутренней структуры кристаллов. Кристаллы оказались идеальными объектами для неразрушающего исследования структуры вещества на атомно-молекулярном уровне благодаря их симметрии и трехмерной периодичности, сводящей математически бесконечный кристалл к конечному содержимому одной элементарной ячейки. Началась, по сути, новая научная эра, и даже сейчас трудно оценить весь масштаб воздействия этого открытия на наш мир. Ученые теперь смогли поистине "заглянуть внутрь" вещества, определять его состав, выяснять взаимное расположение атомов, последовательность химических связей, их длины и углы между ними. За 100 лет развития рентгеновская кристаллография стала ведущим методом исследования кристаллической структуры и связанных с ней свойств веществ и материалов, центром зарождения новых идей и достижений во многих областях науки. Структурной кристаллографией и кристаллохимией занимались такие выдающиеся ученые, как В.И. Вернадский, П. Дебай, Л. Полинг, Дж. Бернал, А.Е. Ферсман, А.Ф. Иоффе, В.М. Гольдшмидт, Дж. Уотсон и Ф. Крик, М. Перутц, Д.К. Ходжкин и другие, многие из них стали впоследствии лауреатами Нобелевской и других научных премий. Признанием заслуг кристаллографии стали 23 нобелевских лауреата (см. таблицу) и примерно столько же получили эту премию за достижения, где также использовалась кристаллография. Самая последняя из них (по химии!) присуждена в 2011 г. израильскому ученому Дану Шехтману за открытие в 1984 г. квазикристаллов, которые, казалось бы, противоречат самим устоям кристаллографии, "запрещающей" в кристаллах оси симметрии 5, 7, 8 и 12 порядков, найденные у квазикристаллов. Однако вскоре выяснилось, что их можно описывать шестимерными решетками и группами симметрии, а четырех- и пятимерная кристаллография используется для описания структур различных несоизмеримых фаз [9, 10].

Нельзя не отметить вклад в кристаллографию отечественных ученых. Одним из соавторов закона о постоянстве двугранных углов кристаллов является М.В. Ломоносов, А.В. Гадолин в 1867 г. дал классический вывод 32 кристаллографических групп симметрии, Е.С. Федоров по праву принадлежит к числу основоположников теоретической кристаллографии и кристаллохимии. Г.В. Вульф (1863—1925) первым в России начал рентгеноструктурные исследования и независимо от Брэгга вывел основное уравнение дифракции рентгеновских лучей кристаллами. Ученик Вульфа академик А.В. Шубников (1887—1970) организовал в 1933 г. первый в мире Институт кристаллографии и известен не только как выдающийся исследователь физических свойств кристаллов, но и как пионер промышленного производства кварца, сегнетовой соли и других технически важных кристаллов. В Институте кристаллографии начинал свою карьеру академик Н.В. Белов (1891—1982) — основатель отечественной школы структурной кристаллографии и кристаллохимии, автор всемирно известных блестящих работ по структурам минералов, неорганической кристаллохимии и теории симметрии. Весомый вклад в развитие кристаллографии, структурных исследований и кристаллохимии различных классов соединений внесли также А.К. Болдырев, Г.С. Жданов, Г.Г. Леммлейн, Н.Н. Шефтал, А.И. Китайгородский, М.А. Порай-Кошиц, Б.К. Вайнштейн, Б.Н. Делоне, Ю.Т. Стручков, В.А. Франк-Каменецкий, И.И. Шафрановский, М.П. Шаскольская, В.А. Копчик, П.М. Зоркий, В.И. Симонов, В.С. Урусов и другие отечественные ученые.

Выдающуюся роль в организации кристаллографических лабораторий и кафедр, подготовке советских кристаллографов и кристаллохимиков сыграл член-корреспондент АН СССР Г.Б. Бокий (1909—2001) — автор классического учебника "Кристаллохимия" и один из организаторов Института неорганической химии СО РАН. Он создал и возглавил теоретический отдел (сейчас отдел структурной химии), стал основателем и первым главным редактором "Журнала структурной химии". По примеру М.А. Лаврентьева он задумал создать свой "треугольник", куда входили бы фундаментальные исследования по кристаллографии и кристаллохимии, подготовка специалистов в этих областях и использование полученных результатов для промышленного производства кристаллов. Г.Б. Бокий до 1963 г. руководил созданной им рентгеноструктурной лабораторией (сейчас — лаборатория кристаллохимии), костяк которой составили ученики Н.В. Белова — Р.Ф. Клевцова, С.В. Борисов, В.В. Бакакин. Можно без преувеличения сказать, что эта лаборатория сейчас во многом обеспечивает продуктивность синтетических

исследований и высокий уровень научных публикаций ИНХ. Заложенные Г.Б. Бокием основы также принесли свои плоды в виде признанных во всем мире работ по изучению дефектов в алмазах (Е.В. Соболев, В.А. Надолинный и др.) и выращиванию крупных совершенных кристаллов (А.А. Павлюк, Я.В. Васильев и их ученики).

Со времени открытия дифракции рентгеновских лучей на кристаллах расшифрованы сотни тысяч структур, разработаны новые методы структурной кристаллографии, введены новые источники излучения (электроны, нейтроны, синхротронное излучение, γ -лучи), появились точные и производительные автоматические дифрактометры, мощные компьютеры и кристаллографические программы, сроки структурных исследований сократились от нескольких месяцев и даже лет до немногих часов. С помощью кристаллографии открыты и изучаются новые, интригующие объекты — несоразмерные фазы, пластические и жидкие кристаллы, твердые ионные проводники, квази- и нанокристаллы, сложнейшие биоматериалы. Большое значение приобрели исследования распределения электронной плотности в кристаллах и исследование *in situ* фазовых переходов и структуры кристаллов в условиях высоких (или низких) температур и давлений. Современные компьютерные программы позволяют с достаточной степенью достоверности предсказывать строение и свойства ряда кристаллических веществ и материалов. Кристаллография сумела проникнуть в тайны строения биологических объектов, таких как вирусы, белки и ДНК, что помогло развитию молекулярной биологии и медицины. Без знания структуры не были бы достигнуты успехи в микроэлектронике, синтезе новых сегнетоэлектриков, лазерных материалов и высокотемпературных сверхпроводников, твердых электролитов, молекулярных магнетиков, супрамолекулярных и других соединений. Сейчас статью о получении нового соединения или открытии нового минерала без доказательства их строения не примут для публикации ни в одном серьезном научном журнале.

Представляется, что все-таки больше всех от сотрудничества с кристаллографией и кристаллохимией выигрывает химия. Ведь химик должен увидеть, что он синтезировал! Дифракционные и другие структурные методы стали поистине инструментами познания, которые привели к пониманию основных черт строения кристаллических веществ, что поставило химию на прочный структурный фундамент и дало мощнейший импульс для ее развития. Без структурных данных не была бы понята природа силикатов, нестехиометрических соединений, боргидридов, клатратов, кластеров, многих комплексных соединений и других сложных веществ. Химия с помощью кристаллографии и других методов исследования строения вещества сама по сути стала структурной [11]. Вот далеко не полный список услуг, которые кристаллография оказала и продолжает оказывать химии.

- Идентификация твердых веществ.
- Определение состава, межатомных расстояний и углов, координации, формы молекул и других химических частиц.
- Понимание природы твердых фаз (от силикатов до квази- и нанокристаллов и т.д.).
- Изучение природы химической связи (трехцентровая связь, водородная связь, связи в клатратах, кластерах, π -комплексах и др.)
- Данные для расчетов электронной структуры, молекулярной динамики, термодинамических, физических и иных свойств.
- Исследование молекулярных перегруппировок, механизмов химических реакций, фазовых переходов и пр.
- Изучение фазовых диаграмм, твердых растворов, различных функциональных материалов и т.д.
- Химический и кристаллохимический дизайн новых соединений и материалов на базе структурных знаний.

Последнее направление, дающее возможность совместного творчества химика и кристаллографа-кристаллохимика, следует отметить особо. Структурный дизайн, начавшийся с работ У. Барлоу, был совершенно необходим в "романтический период" структурных исследований, продлившийся до 1930-х годов, когда структуру нужно было "угадать", а потом уже подтвердить расчетом. Большую помощь оказали идеи плотнейшей упаковки, а затем введение

Л. Полингом метода координационных полиэдров и его знаменитые пять принципов строения ионных кристаллов. Важную роль в развитии кристаллохимического дизайна и неорганической химии сыграли открытия в 1940—1960-х гг. сегнетоэлектрических свойств BaTiO_3 , алмазоподобных полупроводников, ферритов-гранатов и других практически важных соединений. Путем изоморфных замещений в них были получены целые семейства родственных по строению материалов. Такой подход к дизайну веществ можно назвать химическим. Было также замечено, что структуры некоторых оксидов переходных металлов (MoO_{3-x} , TiO_{2-x} , фазы Ауривиллиуса и др.) [12] построены из более простых блоков (модулей), одинаковых или разных. На этой основе родилось модульное направление структурного дизайна. Сочетание химического и модульного подходов дало выдающиеся результаты в 1980—1990-е годы при поиске и исследовании высокотемпературных сверхпроводников, большинство которых открыто путем структурного моделирования сложных оксидов меди из слоев-модулей типа дефектного перовскита, NaCl , CaF_2 и других. В 1970—1980-е годы благодаря развитию органической, супрамолекулярной и координационной химии возникла идея инженерии кристаллов, связанной с дизайном и синтезом молекулярных структур с желаемыми свойствами и организацией, которые основаны на использовании направленных межмолекулярных взаимодействий — водородных и координационных связей, π -контактов и пр. [13, 14]. Эта идея сходна с модульным подходом в неорганической кристаллохимии, но более привлекательна и доступна для химика-синтетика ввиду легкой управляемости и практически неограниченной изменчивости исходных конечных "строительных блоков" — молекул, ионов, лигандов и пр. Сейчас инженерия кристаллов — бурно развивающаяся область химии, на счету которой многочисленные синтезы функциональных органических кристаллов, разнообразных координационных полимеров и других интересных соединений. Как сказано в совместном докладе академиков В.А. Тартаковского и С.М. Алдошина на Общем собрании РАН 2008 г., "Поворот химии как науки в сторону молекулярной и надмолекулярной организации — одно из главных стратегических направлений развития химии XXI в." [15].

Все более глубокое проникновение в секреты внутреннего строения кристаллов различных классов соединений позволяет осуществлять результативный направленный синтез веществ с желаемыми структурой и свойствами. Тут уже рукой подать и до дизайна наноструктур и наноматериалов, что также рассматривается как одно из наиболее приоритетных направлений современной химии. Может показаться, что кристаллы и наноматериалы в каком-то смысле антиподы как по своим масштабам, так и по способам получения. Однако в свете кристаллографии раскрывается истинный смысл нанотехнологий — отнюдь не манипулирование атомами и молекулами, а управление структурой вещества на основе знаний о связях между химическими особенностями атомов, строением и физическими свойствами. Вот к чему пришли от простых шариковых моделей Барлоу! Представляется, что кристаллография и кристаллохимия должны и далее вносить существенный вклад в развитие идеологии химического дизайна новых соединений и материалов как базовые методы исследования строения вещества и анализа его результатов.

За более чем 400 лет со времени первой работы Кеплера кристаллография прошла несколько качественно различных этапов своего развития. От созерцательного изучения кристаллических форм в XVII—XVIII вв. кристаллографы пришли к симметричным и структурным представлениям, развивавшимся на протяжении XIX века и увенчавшихся рождением экспериментальной структурной кристаллографии в 1912—1913 гг. Последовавший за этим бурный рост структурных знаний и расцвет кристаллохимии привел к качественным изменениям в химии, физике твердого тела, минералогии, молекулярной биологии, материаловедении и других естественных науках. Можно смело утверждать, что современный уровень этих наук немыслим без использования кристаллографических знаний и методов, без которых ученые поистине слепы. Из "служанки минералогии" и чисто описательной науки кристаллография превратилась в мощную самостоятельную область, главная задача которой — исследование строения кристаллов. Отдельным не менее развитым направлением кристаллографии стало выращивание и применение искусственно выращенных кристаллов, пленок и наноматериалов, изучение процессов

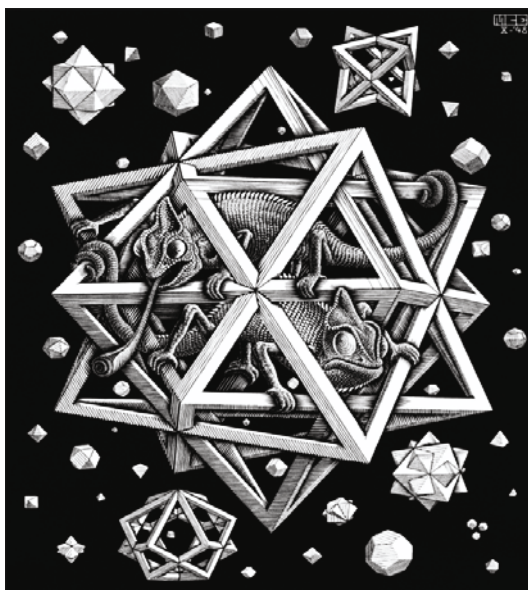


Рис. 4. Гравюра М. Эшера "Звезды" (1948)

их роста и свойств, что имеет громадное практическое значение для создания различных видов твердотельных устройств. Фактически сейчас кристаллография — один из столпов естественных наук и современных высоких технологий.

В чем же видится будущее кристаллографии? Этот вопрос недавно дискутировался на портале ResearchGate [16]. Пессимисты считают, что кристаллография превратилась в прикладной метод получения структурных данных, обслуживающий другие науки. Думается, это мнение связано с тем, что современная структурная кристаллография сейчас более востребована и интегрирована с другими науками, чем 30—50 лет назад, хотя объекты для исследования стали сложнее, а получить их кристаллы не всегда удается. Это стимулирует развитие других структурных методов, таких как порошковая рентгенография, нейтроно- и электронография, исследования на синхротронном излучении, электронная микроскопия высокого разрешения и др., что только увеличивает экспериментальные возможности кристаллографии, делая доступным для нее уже наноразмерный уровень. Ввиду этого оптимисты (к ним относится и автор этих строк) считают, что структурная кристаллография не только не исчерпала себя, а напротив, у нее большие перспективы развития сразу в нескольких направлениях. Вот только самые очевидные из них.

- Развитие методов и техники структурных исследований.
- Получение структурных данных о новых объектах, в том числе на микро- и наноуровнях.
- Структурный анализ *in situ* и в экстремальных условиях.
- Систематика и описание структур, развитие баз структурных данных.
- Изучение взаимосвязей состав—структура—свойства.
- Кристаллохимический дизайн и инженерия кристаллов.
- Изучение электронной плотности и химической связи в кристаллах.
- Развитие вычислительных методов анализа структур, химической связи, термодинамики и свойств кристаллов.

Итоги дискуссии подвел один из ее участников короткой фразой: "Crystallography is a science which is much bigger than diffraction", которая в переводе не нуждается.

Означают ли ныне достигнутые успехи кристаллографии и кристаллохимии, что все тайны кристаллов раскрыты, поняты законы их красоты и совершенства, уникальных и разнообразных свойств? Сила и не до конца еще раскрытый потенциал кристаллов в том, что они уже давно играют роль компактных и эффективных источников удовлетворения энергетических потребностей человечества, аккумуляторов и преобразователей различных видов энергий — тепловой,

механической, электрической, солнечной и т.п. Однако, тратя значительные усилия и средства на получение и исследования новых искусственных и часто экзотических объектов — фуллеренов и нанотрубок, квантовых точек, аморфных и метастабильных веществ, других материалов, — не забываем ли мы о том совершенстве строения и свойств, которое выражено в кристаллах и которое дает нам в руки для изучения и использования сама Природа? Не в этом ли ключ к познанию ее тайн? Действительно, геометрическую правильность, симметрию и кристаллоподобные формы можно увидеть в строении атомов и их ядер, нуклеиновых кислот и вирусов, многоатомных кластеров, нано- и квазикристаллов, в системе элементарных частиц и Периодической системе, в форме растений и некоторых морских организмов, в строении земной коры, нейтронных звезд, галактик и даже Вселенной [17—19]. Не являются ли те законы регулярности, правильности и симметрии, которые в наиболее простом и наглядном виде описываются кристаллографией, универсальными и всеобщими? Не об этом ли писал А.Е. Ферсман, оценивая вклад Е.С. Фёдорова в науку: "Все, что не кристаллично — не прочно и должно превратиться в кристаллы. Кристаллы — это то идеальное состояние вещества, тот глубокий внутренний порядок, к которому стремится природа" (цит. по [18]). Кристаллографическое мироощущение прекрасно выражено М. Эшером в его гравюре "Звезды" (рис. 4). Может быть, вслед за Платоном и Кеплером, развивавшими идеи о подчинении элементов стихий, орбит планет и небесных сфер геометрии правильных многогранников, мы должны искать новые формы мировой гармонии, проявление законов симметрии и регулярности на всех уровнях познания мира, находить их некую суперкристаллографическую общность и подобие?

Хочется подчеркнуть, что Международный год кристаллографии относится не только к профессиональному сообществу кристаллографов и кристаллохимиков, а выходит далеко за его пределы. Кристаллографические методы и достижения, кристаллографическое (структурное) мышление должны быть достоянием всех естественных наук и инструментом познания мира. Будем надеяться, что 2014 год приготовит "нам открытий чудных" и других удивительных и радостных событий в кристаллографии, химии и нашей жизни.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Resolution 66/284. International Year of Crystallography. General Assembly of United Nations, 3 July 2012, <http://www.un.org/en/ga/66/resolutions.shtml>.
2. Шаскольская М.П. Кристаллы. — М.: Наука, 1985.
3. Шафрановский И.И. История кристаллографии (с древнейших времен до начала XIX столетия). — Л.: Наука, 1978.
4. Глазов А.И. // Химия и жизнь. — 1997. — № 6. — С. 36.
5. Hales T. An overview of the Kepler conjecture, <http://arxiv.org/abs/math.MG/9811071>.
6. Barlow W. // Z. Kristallogr. — 1898. — 29. — S. 433.
7. Зоркий П.М. // Рос. хим. журн. — 1996. — 40, № 3. — С. 103.
8. Shafranovskii I.I., Belov N.V. In: Fifty years of X-ray diffraction, 1962. (http://www.iucr.org/__data/assets/pdf_file/0020/749/fedorov.pdf).
9. Гратиа Д. // Успехи физ. наук. — 1988. — 156, № 2. — С. 347.
10. Илюшин А.С., Овчинникова Е.Н. Теоретико-групповые методы в дифракционных исследованиях структуры и свойств твердых тел. — М.: Изд-во МГУ, 1996.
11. Зоркий П.М. // Рос. хим. журн. — 2001. — 45, № 2. — С. 3.
12. Уэдсли А.Д. В кн.: Нестехиометрические соединения / Под ред. Л. Манделькорна (пер. с англ.). — М.: Химия, 1971
13. Desiraju G.R. // Curr. sci. — 2001. — 81, No. 8. — P. 1038.
14. Солдатов Д.В., Терехова И.С. // Журн. структ. химии. — 2005. — 46 (приложение). — S5.
15. Тартаковский В.А., Алдошин С.М. // Вестн. РАН. — 2009. — № 3. — С. 229.
16. https://www.researchgate.net/post/What_is_the_future_of_Crystallography?
17. Галулин Р.В. // Успехи физ. наук. — 2002. — 172, № 2. — С. 229.
18. Галулин Р.В. // Кристаллография. — 2003. — 48, № 6. — С. 965.
19. Лачугин К.А. Земля — большой кристалл? (по материалам исследований Н.Ф. Гончарова, В.А. Макарова, В.С. Морозова). — М.: изд-во "Захаров", 2005.