

Возможности РСА органических монокристаллов

Гатилов Юрий Васильевич

Аннотация

В лекции даются базовые сведения о монокристалльной дифрактометрии органических веществ и о новых возможностях рентгеновских дифрактометров НИОХ

Тематический план

1. Введение в теорию и эксперимент
– основные положения теории
– приборы, требования к образцам
2. Прецизионные измерения
– деформационная электронная плотность (ДЭП)
– мультипольная модель асферических атомов
3. Топологический анализ электронной плотности
– критические точки, энергетические параметры
– литературные примеры (водородные связи, S...O и π - π взаимодействия)

Литература

1. Г.Б. Бокий, М.А. Порай-Кошиц. Рентгеноструктурный анализ. Издательство МГУ 1964, 490 с.
2. Г. Мильбурн. Рентгеновская кристаллография. Мир, Москва 1975, 256 с.
3. Л.А. Асланов, Е.Н. Треушников. Основы теории дифракции рентгеновских лучей. Издательство МГУ 1985, 216 с.
4. М.А.Порай-Кошиц, Основы структурного анализа химических соединений, М., Высшая школа, 1982
5. В.Г. Цирельсон. Прецизионный рентгеноструктурный анализ кристаллов. Соросовский Образовательный журнал, ФИЗИКА, 2000.
6. К.А. Лысенко. Распределение электронной плотности и новые подходы к анализу природы химической связи в молекулярных кристаллах. Диссертация д.х.н. Москва 2006.
7. И.С. Бушмаринов, К.А. Лысенко, М.Ю. Антипин. Энергия атомов в теории "атомы в молекулах" и ее использование для решения химических задач. Успехи химии, 2009, Т 78, №4, 307-327.