

## NOTES INTRODUCTÒRIES

(Les conferències i les activitats científiques del Segon Seminari sobre “Estructura i Propietats Físiques dels Cristalls”, celebrat del 7 al 25 de juny de 1991)

*V. I. SIMONOV*

Institut de Cristal·lografia, Moscou.

El segon Seminari catalano-soviètic (ara diríem catalano-rus), de títol “Estructura i Propietats Físiques dels Cristalls”, fou celebrat a bord del vaixell turístic “Yuri Andròpov” durant un viatge al llarg de rius, llacs i embassaments de les zones del nord i del centre de la Rússia europea. El nombre de científics participants al Seminari fou de 56. A més dels participants de l’Institut d’Estudis Catalans (Barcelona) i dels de l’Institut de Cristal·lografia (Moscou) de l’Acadèmia de Ciències de Rússia (abans Acadèmia de Ciències de l’U.R.S.S.), hi assistiren alguns participants de França, d’Alemanya i de Finlàndia. El programa del Seminari incloïa vuit conferències plenàries, vint-i-set treballs de recerca presentats oralment i cinc taules rodones en les quals es discutiren problemes científics específics.

El Seminari començà amb conferències de caràcter general en les quals fou exposat l’estat actual de les recerques cristal·logràfiques que s’efectuen en els centres científics representats al Seminari. Aquestes conferències foren importants per al coneixement mutu dels participants amb els treballs en curs dels seus col·legues d’altres països. Els participants catalans donaren dues d’aquestes conferències plenàries, una, els Profs. M. Font-Altaba i X. Solans sobre “Cristal·lografia i estructures cristallines a Barcelona: solucions aplicades”, i l’altra, el Prof. J. M. Ribó sobre “La Societat Catalana de Química de l’Institut d’Estudis Catalans, i altres societats en els camps de les Ciències i de la Tecnologia”. Aquesta darrera, que era únicament d’informació general, no és inclosa en aquesta publicació. El Prof. M. Hospital va presentar una conferència

sobre "Resultats recents en el Laboratori de Cristal·lografia de Bordeus", i la Dra. M. Blomberg ho feu sobre "Estudis estructurals al Laboratori de Raigs X del Departament de Física de la Universitat d'Helsinki, no per a publicació, sinó per a informació dels participants, perquè tinguessin coneixença de les activitats dels científics finesos. El Prof. V. I. Simonov, en la seva conferència sobre "Estructura cristal·lina dels superconductors de temperatura alta" feu una revisió dels desenvolupaments recents en aquest camp de la cristal·lografia a l'Institut de Cristal·lografia de Moscou. Finalment, el Prof. H. G. H. Burzlaff, d'Erlangen, Alemanya, posà un èmfasi especial sobre la generalització dels resultats dels estudis estructurals en la seva conferència "Sobre les relacions quantitatives entre estructures cristallines".

Aquesta sèrie de conferències fou molt interessant perquè donà oportunitat de definir els camps d'interès de cada participant i permeté de començar les discussions científiques de casos particulars, cosa que complementà el programa general i contribuí a l'èxit del Seminari.

En un primer grup de les comunicacions presentades, els temes principals tractats foren els problemes que plantegen els mètodes i les tècniques que hom emprà en l'estudi de l'estructura cristal·lina. Aquests problemes foren discutits en les comunicacions sobre les determinacions experimentals de fases basades en la difracció de raigs X per feix múltiple (Prof. K. Hümmel); sobre l'aplicació de pressions altes i temperatures baixes als estudis estructurals (Dr. T. Granier, Prof. Chanh N'Guen-Ba); sobre un tipus nou de difractòmetre de raigs X per a cristall únic (Prof. H. G. H. Burzlaff). Com exemple de l'aplicació de la radiació del sincrotró a l'anàlisi de les estructures de cristalls únics es posà un estudi estructural de zeolites (Dr. J. J. Kansikas); i, també, foren analitzats els mètodes òptims de recollida de dades quan hom utilitza autodifractòmetres de raigs X (Dr. Yu. V. Nekràsov).

En un altre grup de comunicacions l'interès major se centrà en els problemes de l'establiment de correlacions entre les estructures i les propietats físiques dels cristalls. El Prof. I. S. Zheludev exposà diversos problemes generals de la simetria cristal·lina; el Prof. J. M. Ribó analitzà les correlacions entre l'estructura i les propietats de transport dels polipirroles. Algunes comunicacions foren dedicades a l'estructura i les propietats elèctriques de compostos com  $\text{CaNb}_3\text{O}_6$  (Dr. P. Alemany),  $\text{RbLiCrO}_4$  (Dra. I. P. Makarova), pel·lícules fines de  $\text{ZnSe}$  (Dra. A. A. Tikhonova), i a les propietats magnètiques de les fluorites (Dra. M. G. del Muro), i altres compostos.

Foren molt interessants les generalitzacions cristal·loquímiques basades en dades estructurals, com les incloses en el treball del Dr. Yu. Malinovsky sobre silicats, en el treball del Dr. V. N. Molchànov (sobre fases de Ti) i en el del Dr. R. A. Tamazyán (sobre fases de La), així com també les presentades en el

grup de comunicacions relatives a fluorurs no estequiòmètrics (Dr. V. B. Alexandrov, Dr. P. P. Fedorov i Dr. L. L. Vistin).

Una altra secció important es dedicà als estudis estructurals de molècules biològicament actives, bé siguin molècules petites (Dra. M. Font-Bardia, Dr. G. N. Tishchenko), bé siguin macromolècules (Dra. T. N. Safonova, Dra. E. V. Blagova). En aquesta secció val la pena d'esmentar les comunicacions relatives a la catalasa (Dr. V. R. Melik-Adamyán, Dr. A. I. Grebenko), a les pel·lícules de Langmuir-Blodgett (Dra. R. L. Kayushina) i a l'estructura cristal·lina del compost format per un anticòs neutralitzant enfront HRV2 i un pèptid VP2 (Drs. Tormo, Blaas, Stuart i Fita).

La part final del Seminari consistí en cinc taules rodones convocades per a la discussió de temes específics. Una d'elles fou dedicada a problemes de la cristal·lografia de proteïnes, i el Prof. M. Hospital en fou el conductor. El Dr. B. P. Sobolev organitzà una taula rodona per a discutir problemes del creixement cristallí. Una altra, amb el Prof. H. G. H. Burzlaff com a director, discutí la difractometria pel mètode de Laue. Finalment, la Dra. L. F. Malakhova i el Dr. Yu. V. Nekràsov, conjuntament, organitzaren sengles taules rodones per a la discussió de l'experimentació en la difracció de raigs X i de l'optimització de la recollida de dades.

El Seminari fou molt valuós per a l'establiment de contactes científics nous, així com també per a desenvolupar els ja existents. Hi foren discutits diversos plans per a col·laboracions futures. Aquest volum conté els textos de les comunicacions presentades oralment al Seminari, i el d'algunes de les conferències plenàries que hi foren pronunciades. Esperem que aquest volum sigui interessant per als científics especialitzats en els camps de la cristal·lografia estructural que hi són tractats.

## INTRODUCTORY REMARKS

(On the lectures and scientific papers at the Second Seminari  
on "Structure and Physical Properties of Crystals",  
June, 7 - 25, 1991)

The second Catalan-Soviet Seminar (actually Catalan-Russian) «Structure and physical properties of crystals» was held on board «Yuri Andropov» tourist ship during a journey down rivers, lakes and reservoirs of the European areas of Northern and Central Russia. There were 56 participants to the Seminar. Besides participants from the Institut d'Estudis Catalans (Barcelona) and the Institute of Crystallography, Russian Academy of Sciences (Moscow), there

were also participants from France, Germany and Finland. The programme of the Seminar comprised 31 oral presentations and five round table discussions devoted to specific scientific problems.

The Seminar started with several general lectures dealing with the present state of crystallographic investigations conducted at the scientific centres represented at the Seminar.

These lectures were important for the mutual acquaintance of the participants with the work of their colleagues from the other countries. There were two general lectures delivered by Catalan participants, namely, Profs. M. Font-Altaba and X. Solans on «Crystallography and crystal structures in Barcelona: applied solutions» and Prof. J.M. Ribó on «The Catalan Chemical Society of the Institut d'Estudis Catalans and other related Societies in the field of Science and Technology», the last one only for general information. Prof. M. Hospital presented a lecture on «Recent results of the Laboratory of Crystallography in Bordeaux». Dr. M. Blomberg presented a lecture on «Structural studies at the X-ray Laboratory of the Department of Physics, University of Helsinki», not for publication, in order to acquaint the participants with the activities of Finnish scientists. Prof. V.I. Simonov in his lecture «Crystal structure of high-temperature superconductors» made a review of recent developments in this field of crystallography. Prof. H.G.H. Burzlaff from Erlangen, Germany laid special emphasis on the generalization of results of structural studies in his lecture «On quantitative relations among crystal structures».

This series of lectures was important because it gave opportunity to define the fields of interests of each participant and to start scientific discussions of particular problems, which supplemented the main program and contributed to the success of the meeting.

The problems of methods and techniques of crystal structure studies were one of the key subjects. They were discussed in presentations on the experimental determinations of phases of structure amplitudes based on multi beam X-ray diffraction (Prof. K. Hümmel); on the application of high pressures and low temperatures in structural studies (Dr. T. Granier, Prof. Chanh N'Guen-Ba); on a new type of X-ray single crystal diffractometers (Prof. Dr. H.G.H. Burzlaff). The application of synchrotron radiation for single crystal structure analysis was exemplified by a structural study of zeolites (Dr. J.J. Kansikas); also, the optimum methods of data collection using X-ray autodiffractometer were analysed (Dr. Yu.V. Nekrasov).

The major emphasis was laid on the problems of establishing correlations between structure and physical properties of crystals. Prof. I.S. Zheludev considered general problems of crystal symmetry, Prof. J.M. Ribó analysed correlations between the structure and the transport properties of polypyrroles.

Several presentations were devoted to structure and electric properties of such compounds as  $\text{CaNb}_3\text{O}_6$  (Dr. P. Alemany),  $\text{RbLiCrO}_4$  (Dr. I.P. Makarova), thin  $\text{ZnSe}$  films (Dr. A.A. Tikhonova), magnetic properties of fluorites (Dr. M.G. del Muro), and other compounds.

Quite interesting were crystallochemical generalizations made on the basis of structural data, such as the paper by Dr. Yu. Malinovsky reporting silicates, the paper by Dr. V.N. Molchanov (Tl-phases) and Dr. R.A. Tamazyan (La-phases), as well as a series of presentations concerning non-stoichiometric fluorides (Dr. V.B. Alexandrov, Dr. P.P. Fedorov, Dr. L.L. Vistin).

Another important section was devoted to structural studies of biologically active small molecules (Dr. M. Font-Bardia, Dr. G.N. Tishchenko), and macromolecules (Dr. T.N. Safonova, Dr. E.V. Blagova). In this section it is worthwhile mentioning presentations on catalasa (Dr. V.R. Melik-Adamyanyan, Dr. A.I. Grebenko), on Langmuir-Blodgett films (Dr. R.L. Kayushina) and on the crystal structure of the complex formed by a neutralizing antibody against HRV2 and a VP2 peptid (Dr. Tormo, Blaas, Stuart and Fita).

The final stage of the Seminar comprised five round table discussions. One of them was devoted to problems of protein crystallography, and Prof. M. Hospital was the chairman. Prof. B.P. Sobolev organized a round table discussion concerning crystal growth. One more discussion was devoted to the Laue diffractometry with Prof. Dr. H.G.H. Burzlaff as the chairman. Dr. L.F. Malakhova and Dr. Yu.V. Nekrasov organized, accordingly, round table discussions on X-ray diffraction experiment and on optimization of X-ray data collection.

The Seminar was very helpful in establishing new scientific contacts, as well as in developing the existing ones. Plans for future joint collaboration were discussed. This book contains the text of oral presentations of the Seminar. We hope that they will be interesting for scientists specializing in the above mentioned fields of structural crystallography.