

## Аннотация.

Предлагаемый межфакультетский курс «Симметрия кристаллического микромира» представляет собой изложение фундаментальных симметричных законов, управляющих строением минералов или синтетических кристаллов, применяемых в качестве материалов. В его основе лежит курс «Теории симметрии кристаллов», читаемый на кафедре кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета на протяжении десятилетий, сформированный академиком Н.В.Беловым и его учениками и изложенный в учебнике Ю.К.Егорова-Тисменко и Г.П.Литвинской. В курсе будут рассмотрены основные операции и элементы симметрии, конечные как отправные и бесконечные, начиная от самих элементов симметрии микромира через одномерно-бесконечные постройку (бордюры), двумерно-бесконечные (слои) с привлечением графики Эшера до трехмерных Федоровских групп. Их рассмотрение будет проведено последовательно от ромбических к тетрагональным, кубическим и гексагональным пространственным группам. Особенностью изложения материала является рассмотрение взаимосвязи сингоний при выведении пространственных групп, а также выведение двух общих законов взаимодействия элементов симметрии и трансляций решетки. Лекции будут иллюстрироваться моделями структур минералов и кристаллов неорганических соединений из уникальной коллекции кафедры кристаллографии. Планируется познакомить слушателей с двуцветными Шубниковскими группами симметрии кристаллов – т.е. с основными представлениями учения об антисимметрии, которое находит применение в описании магнитных свойств кристаллов. Будут также упомянуты многоцветные группы симметрии Белова. Курс может представить интерес для студентов и аспирантов геологических, химических и физических специальностей Московского университета, а также для всех, интересующихся пространственным строением твердых тел.

Вопросы по межфакультетскому курсу «Симметрия кристаллического микромира».

1. Элементы симметрии I и II рода как операции конечных фигур, группа симметрии, координатные системы, категории и сингонии; международная символика.
2. Трансляция как основной элемент симметрии, ее взаимодействие с осями и плоскостями макромира при параллельном расположении, реестр микроэлементов симметрии.
3. Действие перпендикулярной трансляции на плоскости и оси симметрии всех порядков. Косая трансляция как частный случай двух основных.
4. Взаимодействие плоскостей различных типов под углом  $90^\circ$  и  $45^\circ$ , возникающие группы.
5. Группы симметрии бордюров и их вывод с использованием принципа Кюри. Группы симметрии слоев и их вывод в аналогии с бордюрами, графики плоских групп и умение вывести группу на основе узора. Плоские орнаменты Бюржера.
6. Решетки Бравэ для всех сингоний.
7. Основной принцип вывода пространственных групп на основе ромбической гемиздри для  $P$ -решетки Бравэ, примеры вывода групп с  $C$ -,  $A$ -,  $I$ -,  $F$ -решетками.
8. Принцип построения чертежа группы. Понятия «правильной системы точек», ее величины симметрии, кратности, степени свободы.
9. Разнообразие установок голоэдрических ромбических групп и принцип вывода Белова. Понятие групп-подгруппа для связи с гемиздрией. Примеры экзотических групп ( $Fddd$ ). Представление об осевых группах.
10. Классный вывод тетрагональных голоэдрических групп и особенности вычерчивания графиков.
11. Вывод голоэдрических групп из ромбических путем тетрагонализации на примере голоэдрических групп.
12. Принцип вывода кубических пространственных групп на основе ромбических путем кубизации в классе  $m\bar{3}$ . Примеры построения графиков.
13. Принцип вывода кубических пространственных групп на основе тетрагональных. Примеры построения графиков.
14. Классный вывод гексагональных голоэдрических пространственных групп; соотношение группа-подгруппа в дальнейшем выводе. Особенности  $P$  и  $R$  решеток Бравэ.
15. Наиболее популярная группа для структур с плотнейшими упаковками.
16. Переход от кубических к тригональным группам.

17. Понятие антисимметрии как введение четвертой переменной в описание симметрии кристаллов. Закон  $AA=K$ , возможные двуцветные оси, примеры двуцветных точечных групп и их иллюстрация.
18. Принцип зацветивания подрешеточных элементов симметрии и введение цветной трансляции, одномерные группы антисимметрии.
19. Плоские группы антисимметрии, графики двуцветных групп и Беловские мозаики антисимметрии.
20. Цветные решетки Бравэ и примеры групп ромбической гемизедрии, графики.
21. Кристаллоструктурные иллюстрации Белова для структур типа АВ.
22. Понятие о многоцветных группах Белова, многоцветные мозаики.

## Программа курса

### «Симметрия кристаллического микромира»

1. История создания пространственных групп симметрии и их значение для исследования структур кристаллов. Русская школа кристаллографии. Работы Федорова, Шенфлиса. Базовые симметрические операции – ось, зеркальная плоскость и центр инверсии: I и II роды преобразований, представления симметрических операций: модельный, координатный и матричный; положения теории групп. Трансляции. Реестр винтовых осей и скользящих плоскостей  $a, b, c, n, d$ . Взаимодействие трансляций и других элементов симметрии между собой.
2. Вывод одномерных групп, иллюстрации бордюров. Двумерные плоские группы: выбор ячейки, возможности центрировок.
3. Вывод 17 групп на основе принципа Кюри: крючечные (лепестковые) точечные группы и их взаимодействие с решетками с образованием узоров. Орнаменты Бюргера, узоры Эшера.
4. Вывод 14 решеток Бравэ на основе принципа Кюри, а именно: сочетание координатного репера каждой из сингоний с голоэдрической симметрией точечных групп для  $P$ -решеток, возможные дополнительные центрировки. Принцип вывода пространственных групп класса  $mm2$  – простейшие графики, понятия выбора начала координат, правильные системы точек (орбиты), величины симметрии, кратности позиции, инвариантные, моно-, ди-, тривариантные точки. Изображение групп в Интернациональных таблицах на основе подхода Федорова.
5. Ромбические голоэдрические и осевые группы, основные представления. Примеры структур ромбических кристаллов: графики групп и структуры  $\text{AgNO}_2$ ,  $\text{FeS}_2$  марказит,  $\text{PdCl}_2$ ,  $\text{CaCO}_3$  арагонит,  $\text{I}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$  тенардит; задачи на восстановление структуры из проекции с выведение группы и позиций атомов.
6. Тетрагональная сингония – классный вывод на основе комбинаций микроэлементов симметрии в каждой из точечных групп в возможных решетках Бравэ: 16 голоэдрических с  $P$ -решеткой, группы с  $I$ -решеткой и гемиедриа как подгруппы. Особенности тетрагональных графиков, связь тетрагональных и ромбических групп – примеры тетрагонализации. Примеры структур тетрагональных кристаллов: графики групп и структуры  $\text{TiO}_2$  рутил,  $\text{CuFeS}_2$  халькопирит,  $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$  станнин,  $\text{ZrSiO}_4$  циркон,  $\text{ThCl}_4$ ,  $\text{VPO}_4$ ,  $\text{PCl}_5$ .
7. Кубические группы как производные ромбических и тетрагональных путем кубизации. Способы представления групп в кристаллографическом атласе. Примеры структур кубических кристаллов: графики групп и структуры  $\text{FeS}_2$  пирит,  $\text{NiAsS}$  герсдорфит,  $(\text{CH}_2)_6\text{N}_4$  уротропин,  $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$  тетраэдрит,  $\text{ZnS}$  сфалерит,  $\text{C}$  алмаз,  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  шпинель,  $\text{As}_4\text{O}_6$  арсенолит,  $\text{Ca}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$  гранат.
8. Особенности гексагональной сингонии – меньшие возможности выбора микроэлементов симметрии для сочетаний в группе, винтовые оси и расположение винтов перпендикулярных осей 2. Примеры структур кристаллов: графики групп и структуры:  $\text{NiAs}$  никелин,  $\text{C}$ -лонсдейлит,  $\text{CdI}_2$ ,  $\text{SiO}_2$ -кварц,  $\text{Hg}$ -ртуть,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -корунд,  $\text{CaCO}_3$ -кальцит.
9. Моноклинные сингония и вариации в выборе осей и установок:  $\text{FeAsS}$  арсенопирит,  $\text{CuO}$  тенорит. Частота встречаемости пространственных групп – статистика и причины.

10. История вопроса об антисимметрии и роль советских ученых: Шубников, Копцик. Представление об антисимметрии как введение 4-го параметра: цвет, знак, спин. Принцип  $AxA=K$ . Примеры двуцветных точечных групп. Вывод черно-белых одномерных групп из 7-ми классических. Вывод двумерных группы и их графики, плоские черно-белые мозаики. Представление о выводе Шубникова на основе примеров из атласа.

11. Двуцветные группы – пример из ромбической сингонии. Графики групп и атлас Шубниковских групп - Копцика. Приложения к магнитным свойствам кристаллов.

12. Многоцветные группы Белова и мозаики, выбор групп. Кристаллоструктурные иллюстрации соединений типа АВ: NaCl, CsCl, CuAu, BN, TlI, ZnS, CaF<sub>2</sub>.

13. Пятерная симметрия в кристаллографии: точечные группы, фуллерены и трубки, квазикристаллы, узоры Пенроуза как математическая база пятерной симметрии.