

Лекция заключительная

- Теория плотнейших упаковок, ее использование для описания кристаллических структур
 - Символика ПУ
 - Симметрия гексагональной ПУ
- Как определить симметрию многослойной ПУ и структур на их основе



Главным законом вероятного строения кристаллической структуры является неизменное подчинение геометрического узора распределения атомов в кристаллическом пространстве одной из 230 пространственных групп симметрии.

**Атомы в кристалле располагаются
СИММЕТРИЧНО**

А еще -
наиболее
плотно

Исторический аспект



*Одним из первых в научных кругах об этом заговорил И. Кеплер в своем трактате о шестиугольных снежинках, хотя ответ на этот вопрос во времена Кеплера был хорошо известен. **Кому же?***



Способ плотнейшей укладки сферических предметов с давних пор был известен любому лавочнику или пирату



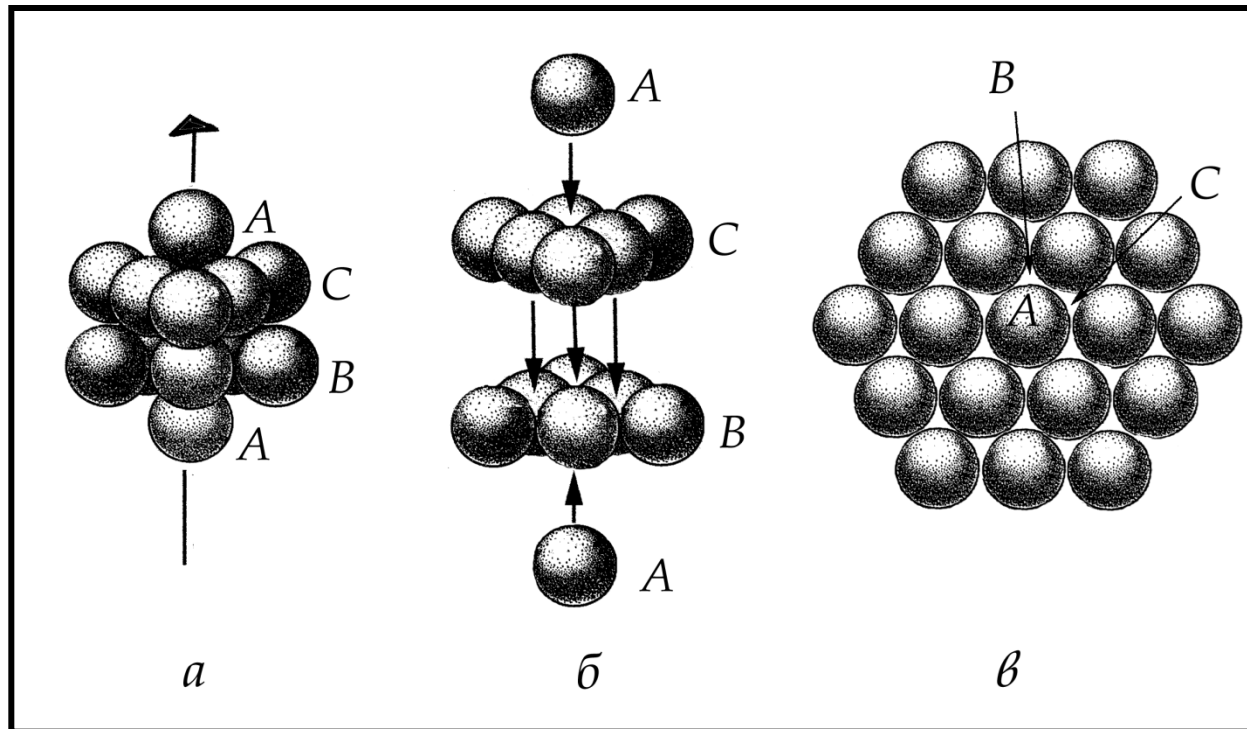
- Кеплер, со свойственной ученому доскональностью проверив все возможные на тот момент способы укладки, подтвердил, что «пиратский» способ действительно самый плотный. Но доказать это не смог.



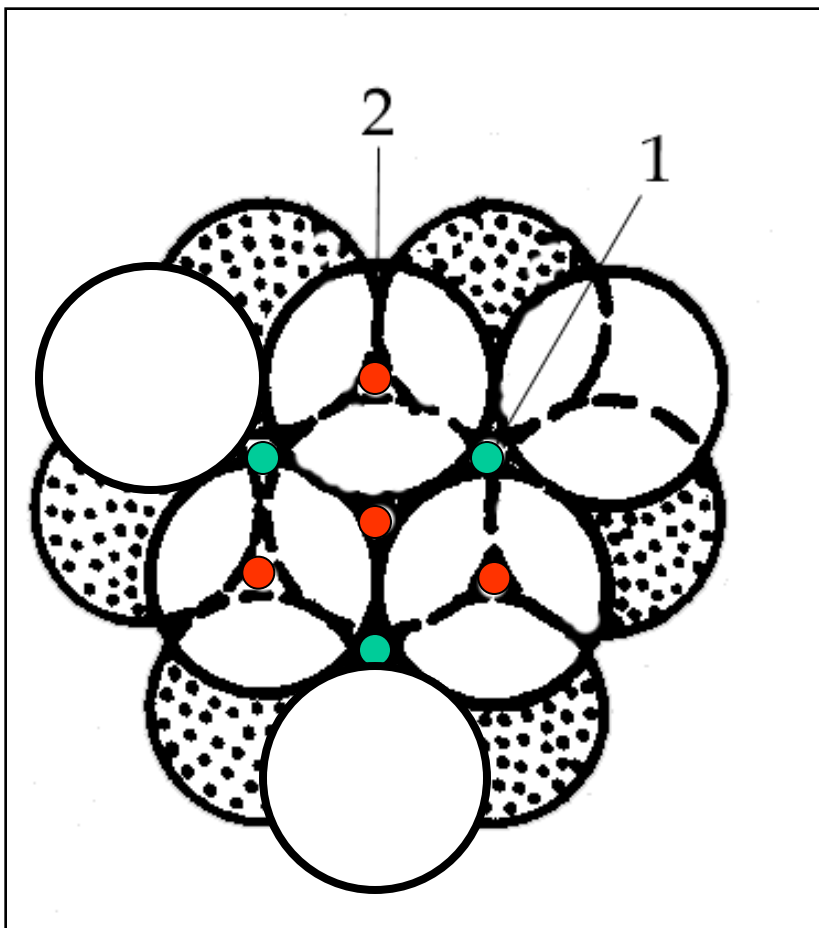
- На первый взгляд не сложная задача, названная впоследствии гипотезой Кеплера, стала краеугольным камнем математики и ждала своего доказательства более 380 лет (даже больше чем знаменитая теорема Ферма).

- Однако только Том Хейлз (США) решил проблему путем нахождения максимума нелинейной функции 150 переменных, свел бесконечное число возможных упаковок к конечному перебору нескольких тысяч вариантов, для реализации чего использовался компьютер. Коллектив рецензентов-математиков, трудившихся над проверкой доказательства 4 года, не найдя ни одной ошибки, постановил, что теорема доказана на 99% (формально не доказана): *«большинство математиков в правильность теории Кеплера верят, а все физики в ее правильности твердо убеждены, потому что это знают»*.

**Разделение плотнейшей укладки шаров (*a*) на
плотнейшие слои (*б*), перпендикулярные
оси 3-го порядка гексагональной симметрии.**

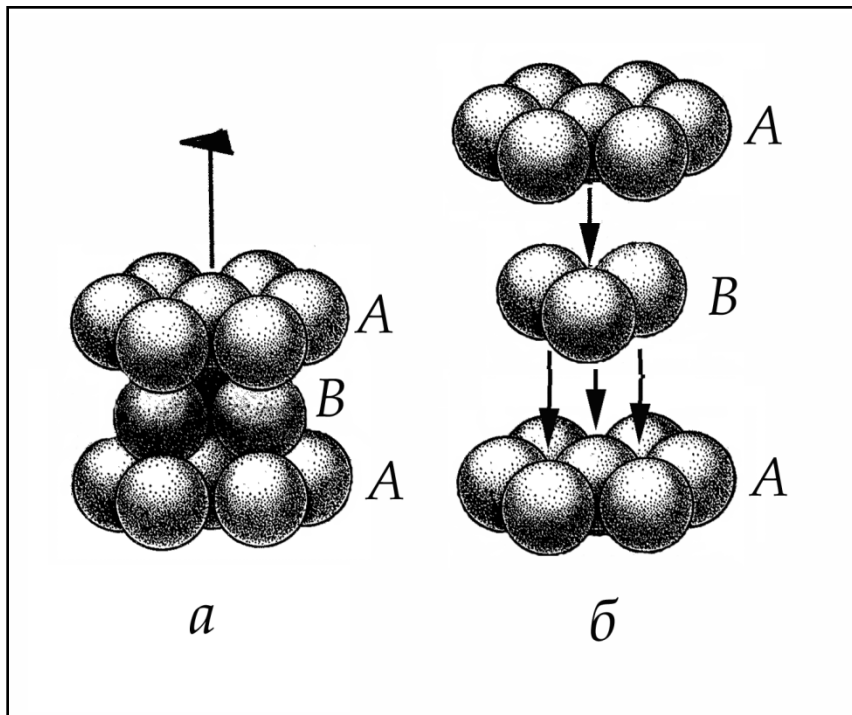


В изолированном плотнейшем слое (*в*) каждый шар (*A*) окружен шестью лунками (*B* и *C*), а так как каждая лунка образована тремя шарами, то соотношение шаров и лунок 1 : 2

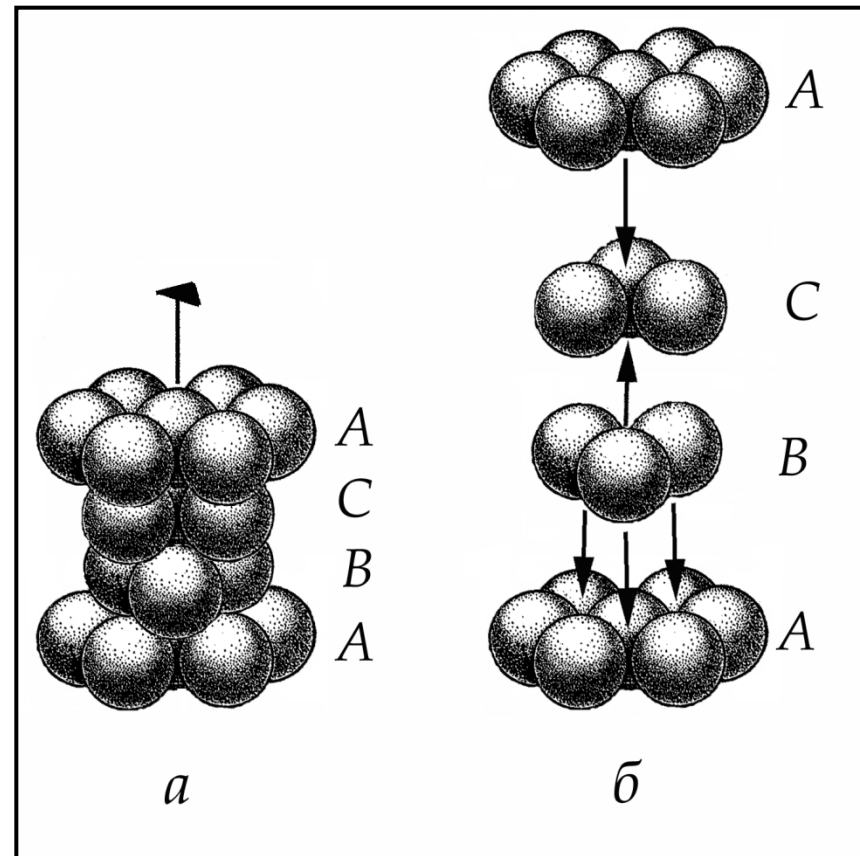


Шары 2-го слоя заполняют
лишь половину лунок
предыдущего
плотноупакованного слоя.
При этом образуется два
вида лунок: половина
СКВОЗНЫХ (1) и половина
НЕСКВОЗНЫХ (2)

Типы плотнейших упаковок



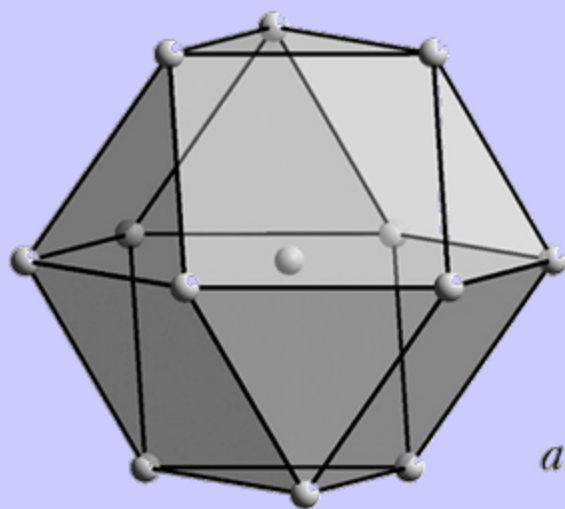
Двухслойная (гексагональная)
плотнейшая упаковка –
 $AB AB AB \dots$ (a) и ее разделение
на слои (б)



Трехслойная (кубическая)
плотнейшая упаковка –
 $ABC ABC \dots$ (a) и ее разделение
на слои (б)

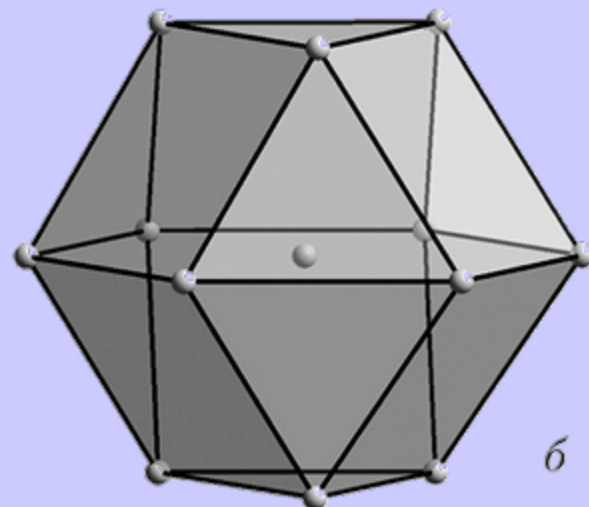
Характеристики плотнейших упаковок любой слойности:

- КЧ* любого шара, слагающего плотнейшую упаковку = **12**, расстояния между шарами в слое и между слоев одинаковы, коэффициент заполнения пространства = **74,05 %**



a

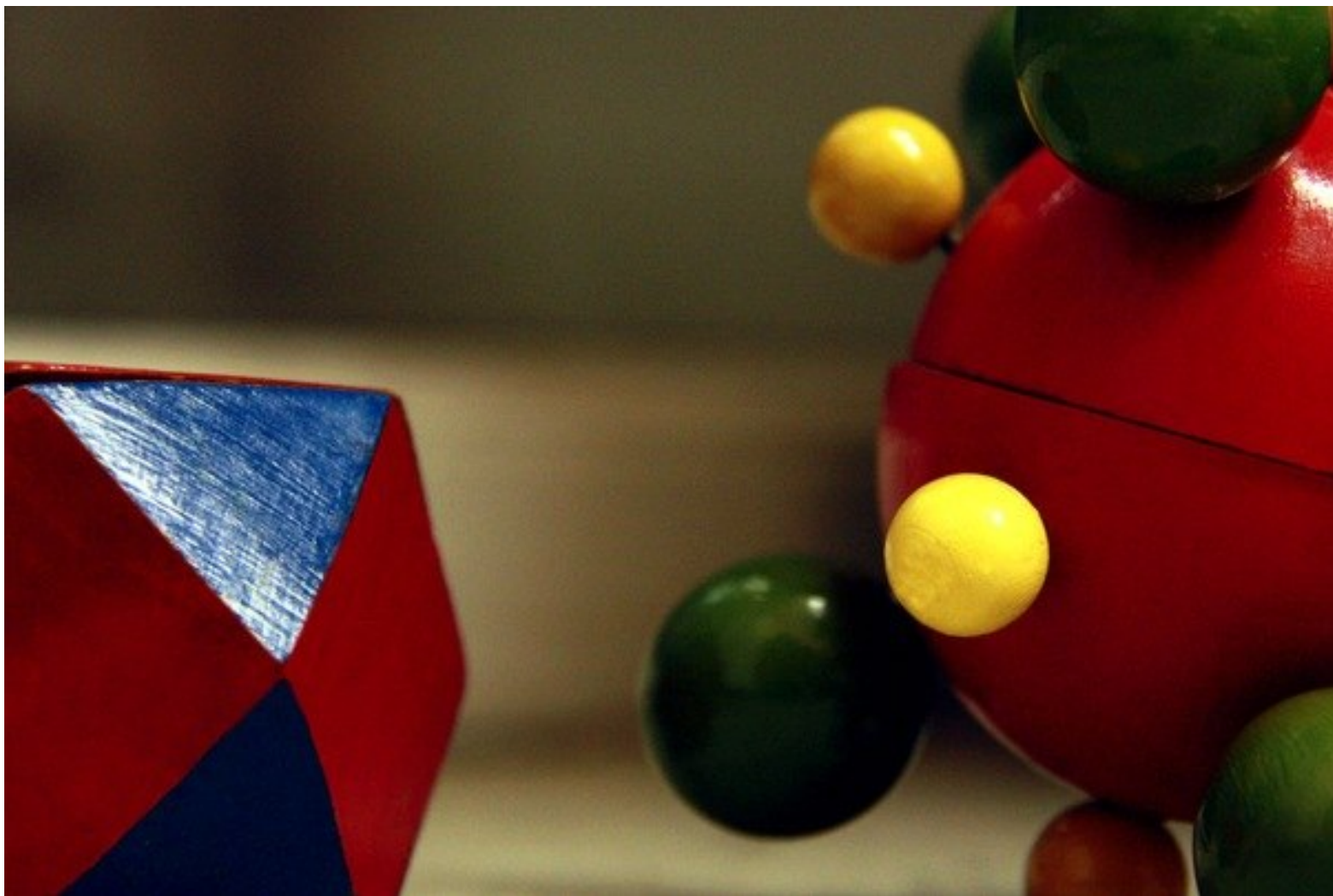
архимедов кубооктаэдр



б

гексагональный аналог

*В трехслойной плотнейшей упаковке встречается **архимедов кубооктаэдр**, в гексагональной – **гексагональный аналог**, в многослойных плотнейших упаковках – и тот, и другой*



*Знакомьтесь – кристаллографические трансформеры
кубоктаэдр-перевертыши*

- Различные комбинации трех слоев (*A*, *B* и *C*) позволяют получить бесконечное множество многослойных упаковок:
 - ... *AB AB AB* ... 2-слойная упаковка гексагональной симметрии
 - ... *ABC ABC* ... 3-слойная упаковка кубической симметрии
 - ... *ABAC ABAC* ... 4-слойная упаковка гексагональной симметрии
 - ... *ABCACB* ... 6-слойная упаковка гексагональной симметрии
- Симметрия всех полученных упаковок описывается в рамках 2 сингоний (нужна ось 3-его порядка): гексагональная и кубическая (причем для последней обязательна нужна *F*-решетка!).

**Можно получить несколько деформированные ПУ
и в других сингониях
(тетрагональной – например рутил,
ромбической – например марказит)**

Л. Полинг предложил ввести особое обозначение для гексагональных (h) и кубических слоев (c).

Справедливости ради нужно отметить, что независимо от Полинга подобные обозначения использовали Уайкофф, Ягодзински, Германн и Эвальд. В русской литературе с легкой руки Н.В.Белова гексагональные и кубические слои обозначаются буквами g и k соответственно.

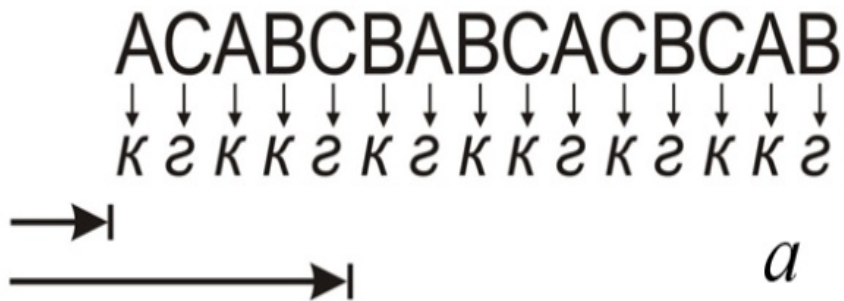
Поэтому в дальнейшем, может и не совсем оправданно, этот способ мы будем называть **символикой Полинга-Белова**.

Четырехслойную упаковку ...гкгк... можно получить укладкой первых трех слоев шаров по «кубическому» закону, а четвертый уложить таким образом, чтобы он повторял второй. Ее часто называют «топазовой», так как впервые она была открыта в структуре этого минерала. Заметим, что более компактно последовательность «гкгк» можно записать как $(гк)_2$, подчеркивая этим, что в элементарной ячейке существует внутренний период.

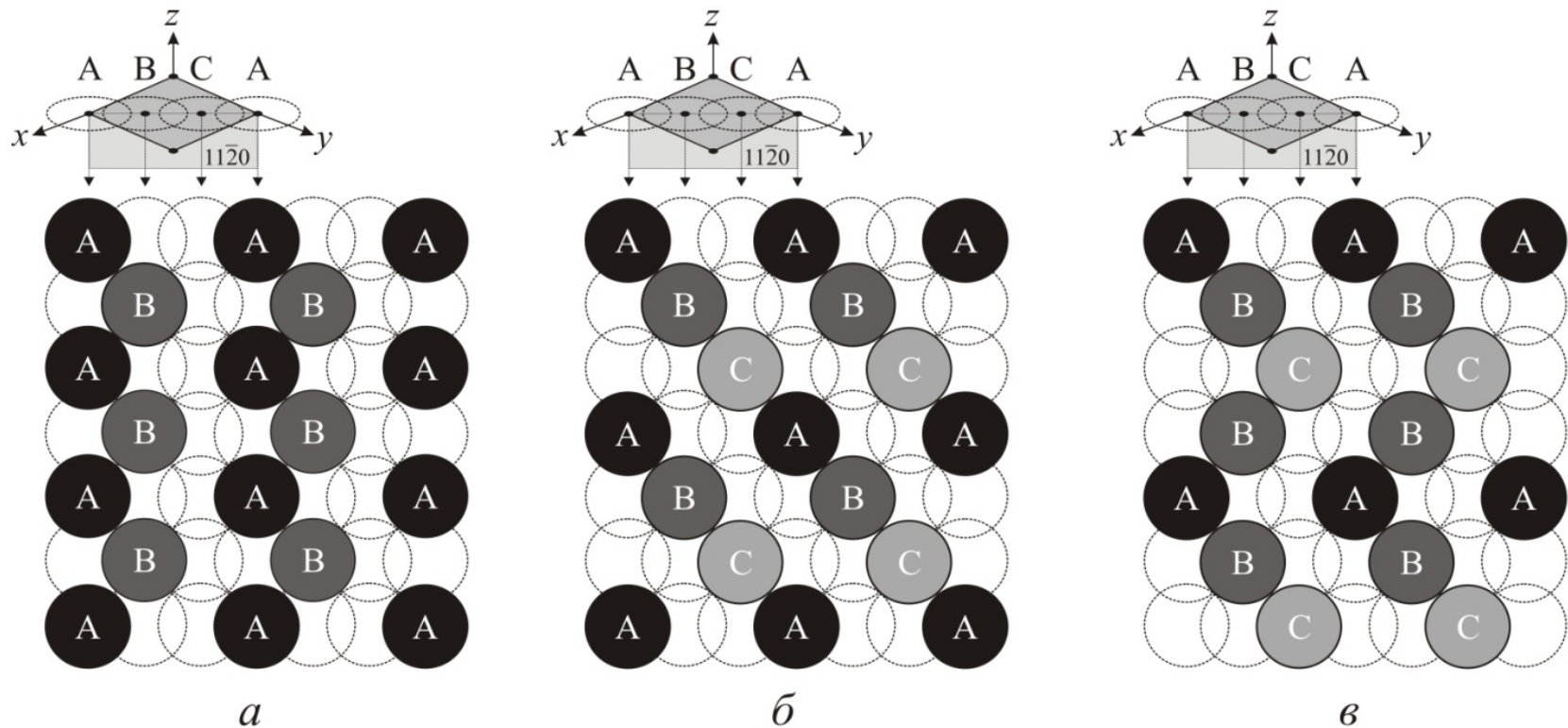
Пятислойную упаковку можно получить, наложив первые три слоя по кубическому закону, а последующие два - по гексагональному. Очевидно, что плотность заполнения пространства от этого никак не меняется, а число разнообразных случаев, отличающихся друг от друга, будет закономерно увеличиваться с ростом периода упаковки.

Существует две различные шестислойные упаковки:

...АВСАСВ... и ...АВАВАС...



Определение символа упаковки по Полингу (а) и Жданову (б)



Схема, поясняющая формирование символа Жданова для различных упаковок: а – двухслойная (11), б – трехслойная (∞), в – четырехслойная (22)

Если бы теорию плотнейших упаковок можно было применить только для описания структур нескольких десятков простых кристаллических веществ, она не имела бы для кристаллохимии такого большого значения. Расширение сферы применения теории плотнейших упаковок как наглядного геометрического способа описания структур, возможно в нескольких направлениях:

1) Плотнейшая упаковка может быть сложена атомами разных сортов, близких по размерным характеристикам, причем атомы могут отличаться и по химическим свойствам, и даже по знаку заряда.

2) Помимо преимущественно ионных или металлических структур, сферичность составляющих их ПУ атомов оправдана, в рамках этой теории прекрасно описываются структуры с практически ковалентными связями, аппроксимация атомов которых не допускает никакой сферичности.

3) В некоторых структурах по закону плотнейшей упаковки располагаются катионы, в то время как позиции анионов совпадают с центрами пустот такой «псевдо» упаковки.

4) Возникающие в процессе упаковки **пустоты** могут занимать атомами меньшего размера, тем самым еще больше повышая плотность упаковки.

*Представьте себе место, наполненное пушечными ядрами так, что больше оным уместиться там не
можно.*

Однако же будут места между ними праздные, которые могут в себя вместить пулей фузейных великое множество.

Меж пулями промежки пускай будут наполнены мелкой дробью

М.В. Ломоносов

Разнообразие кристаллических структур, построенных на основе плотнейших упаковок, связано с геометрией заполнения пустот того или иного типа.

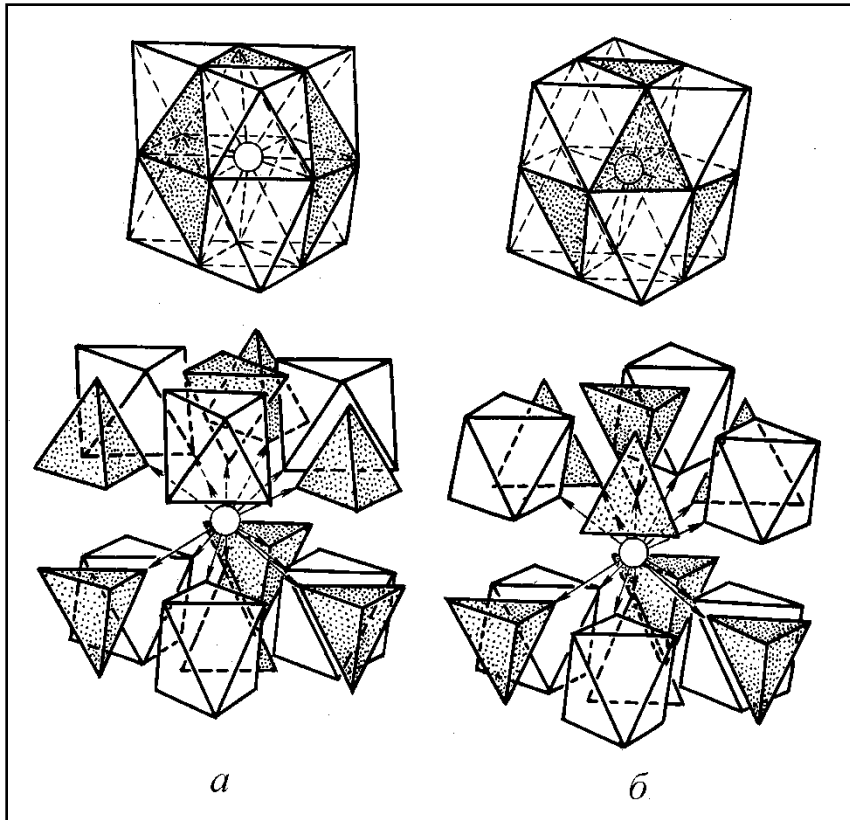
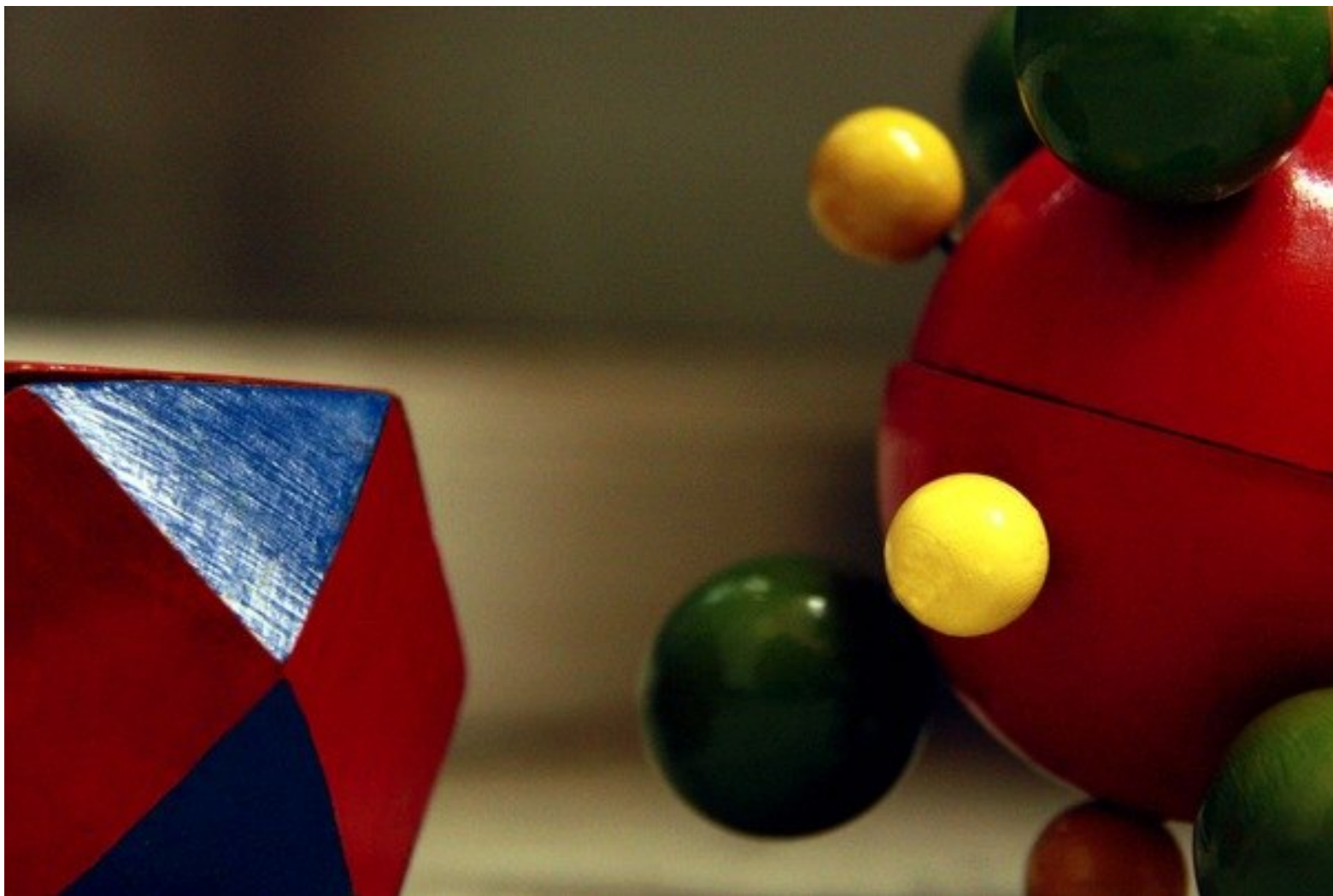


Схема расположения тетраэдрических и октаэдрических пустот в гексагональной (а) и кубической (б) плотнейших упаковках

3 магических Знания



- *Каждый шар любой плотнейшей упаковки окружен 8-ю тетраэдрическими и 6-ю октаэдрическими пустотами*
- *На каждый шар любой плотнейшей упаковки приходятся две тетраэдрические и одна октаэдрическая пустота*
- *Все плотноупакованное пространство разделяется без промежутков на октаэдры и тетраэдры*



*Знакомьтесь – кристаллографические трансформеры
кубоктаэдр-перевертыш
и пустотный ежик*

Описание структуры с позиции ПУ ИЗЯЩНО И ЛАКОНИЧНО:

*Анионы образуют ГПУ, катионы заполняют все
октаэдрические пустоты*



*Анионы образуют КПУ, катионы
заполняют все тетраэдрические
пустоты*

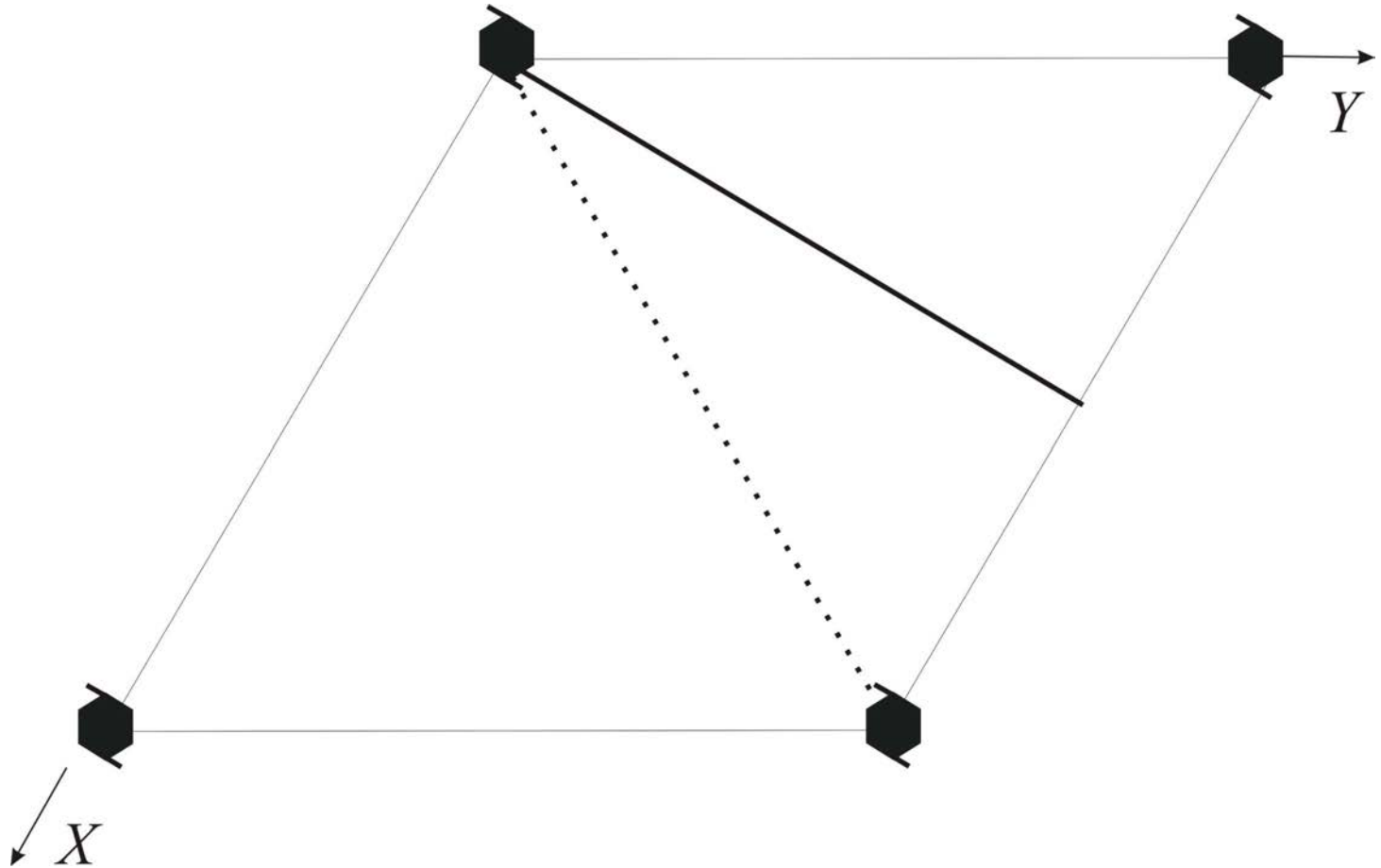


Симметрия ГПУ

$R 6_3/t t c$

Этапы построения графика пр. группы $P 6_3/m m c$

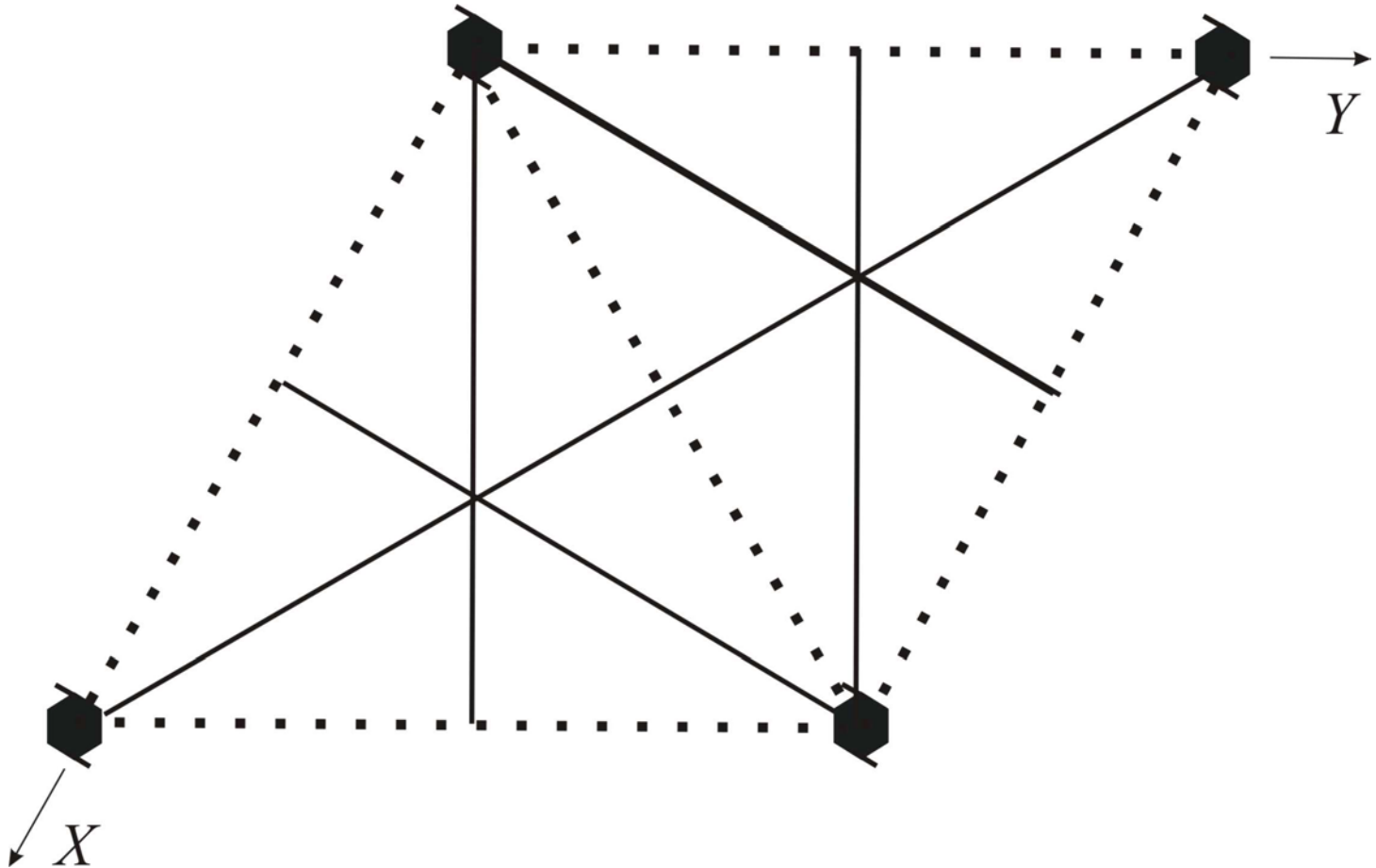
$$m_k \cdot c_d = 6_3$$
$$30^\circ$$



Размножим порождающие плоскости

$$m_k \cdot c_d = 6_3$$

30°



Этапы построения графика пр.группы $P 6_3/m m c$

$$m_K \cdot c_d = 6_3$$

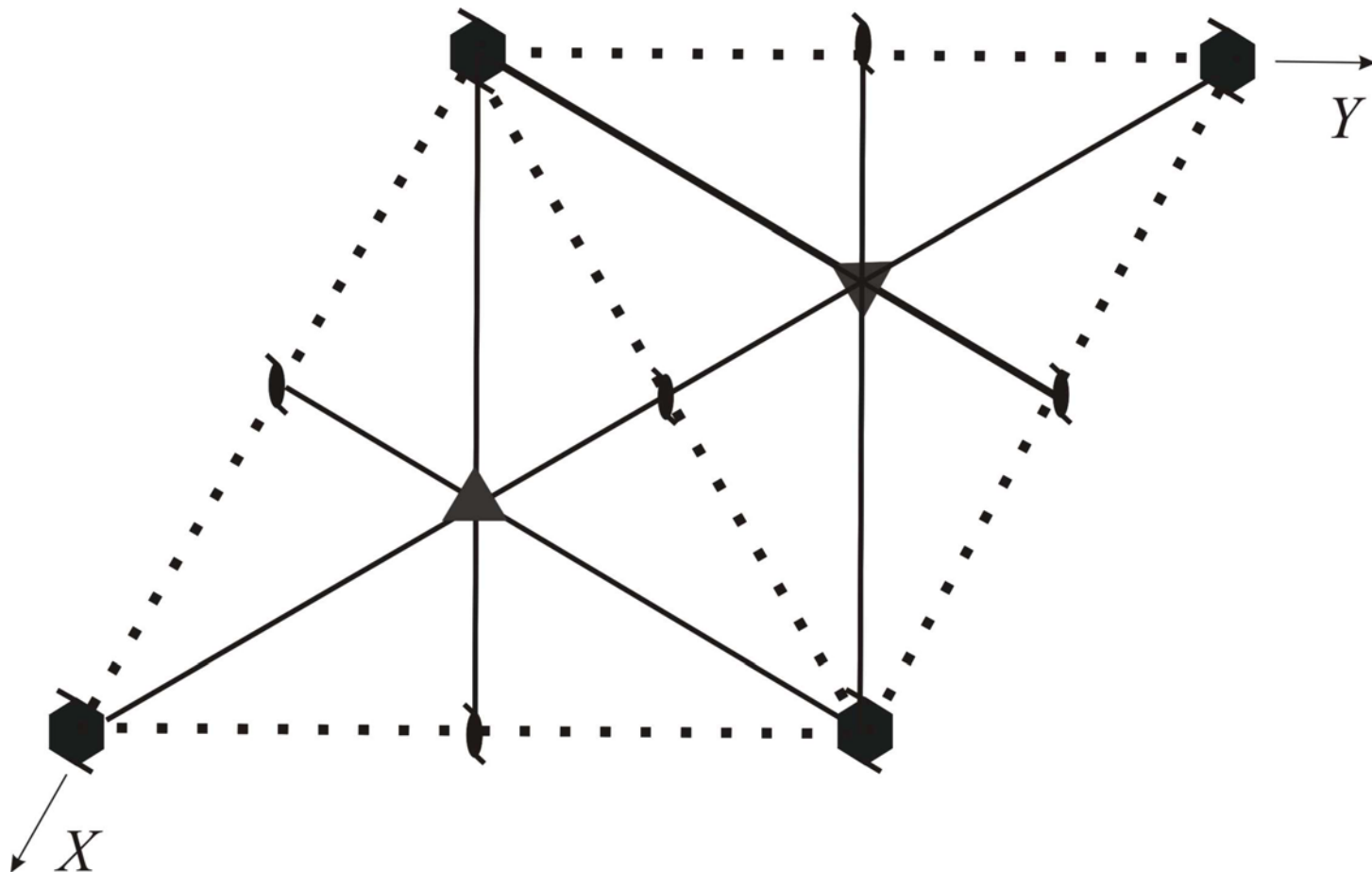
30°

$$m_K \cdot m_K = 3$$

60°

$$m_K \cdot c_d = 2_1$$

90°



Этапы построения графика пр.группы $P 6_3/m m c$

$$m_k \cdot c_d = 6_3$$

30°

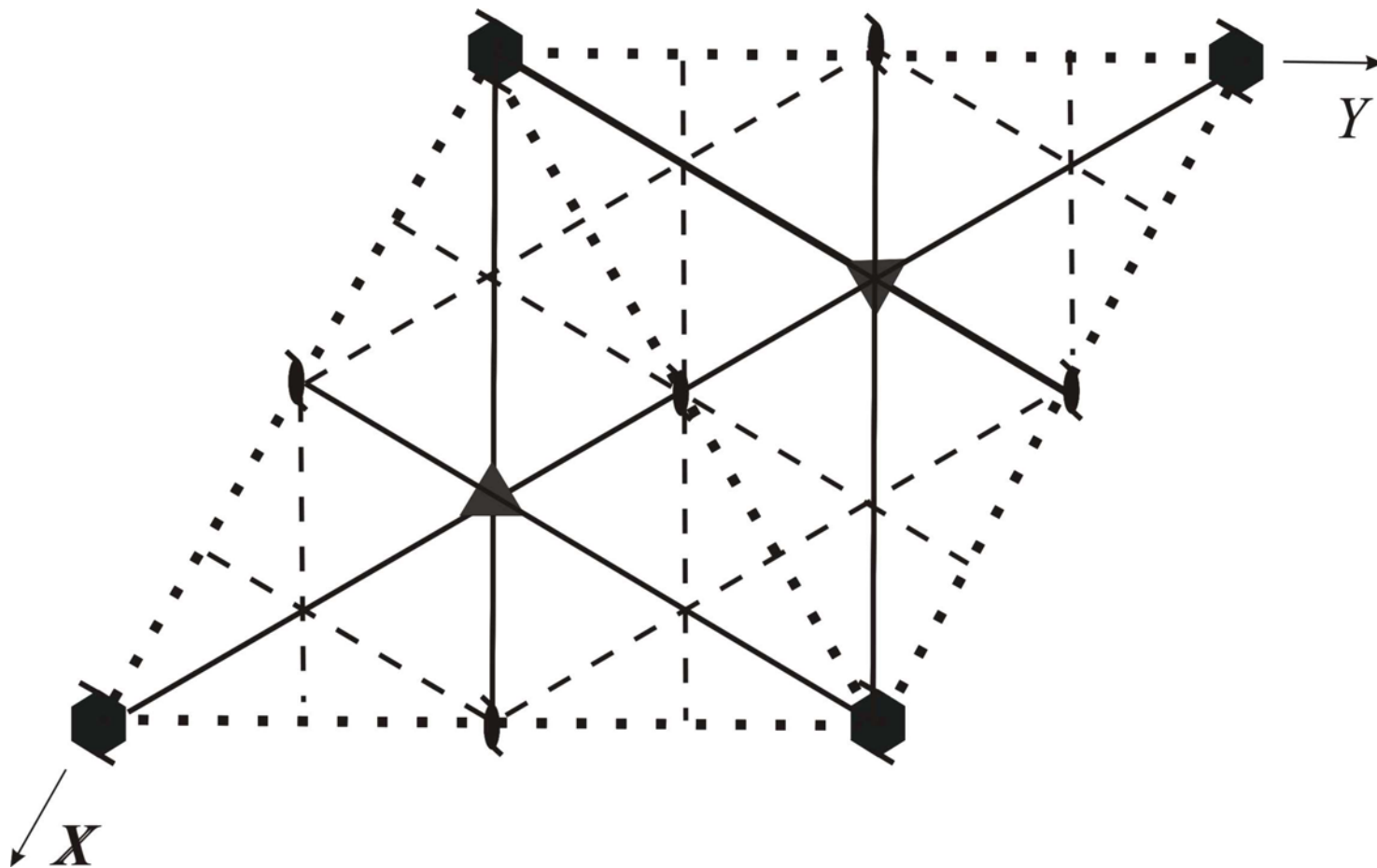
$$m_k \cdot m_k = 3$$

60°

$$m_k \cdot c_d = 2_1$$

90°

$$m_k ; b_k$$



Этапы построения графика пр.группы $P 6_3/m m c$

$$m_k \cdot c_d = 6_3$$

30°

$$m_k \cdot m_k = 3$$

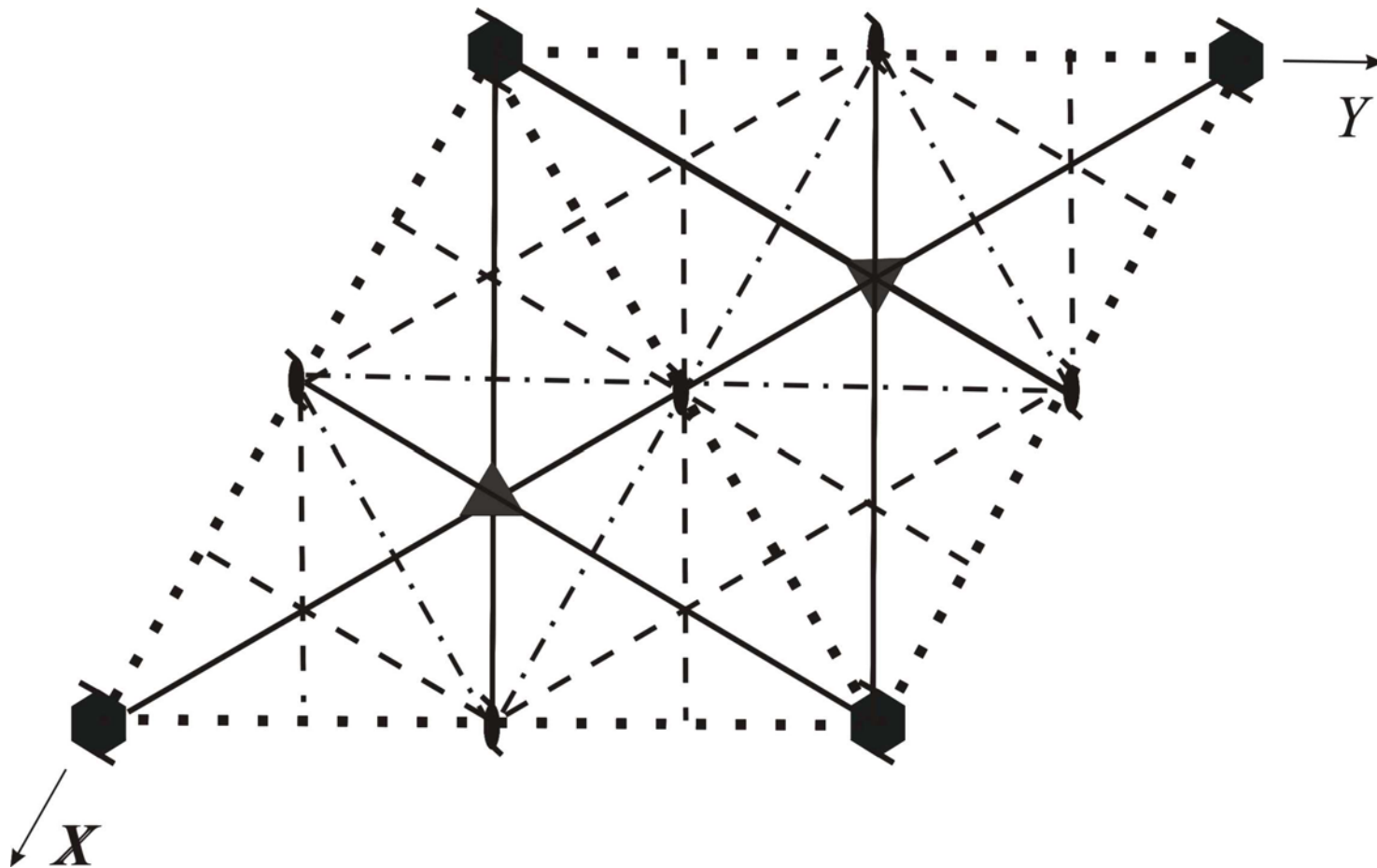
60°

$$m_k \cdot c_d = 2_1$$

90°

$$m_k ; b_k$$

$c_d ; n_d$



А теперь вводим горизонтальную плоскость!

$$m_k \cdot c_d = 6_3$$

30°

$$m_k \cdot m_k = 3$$

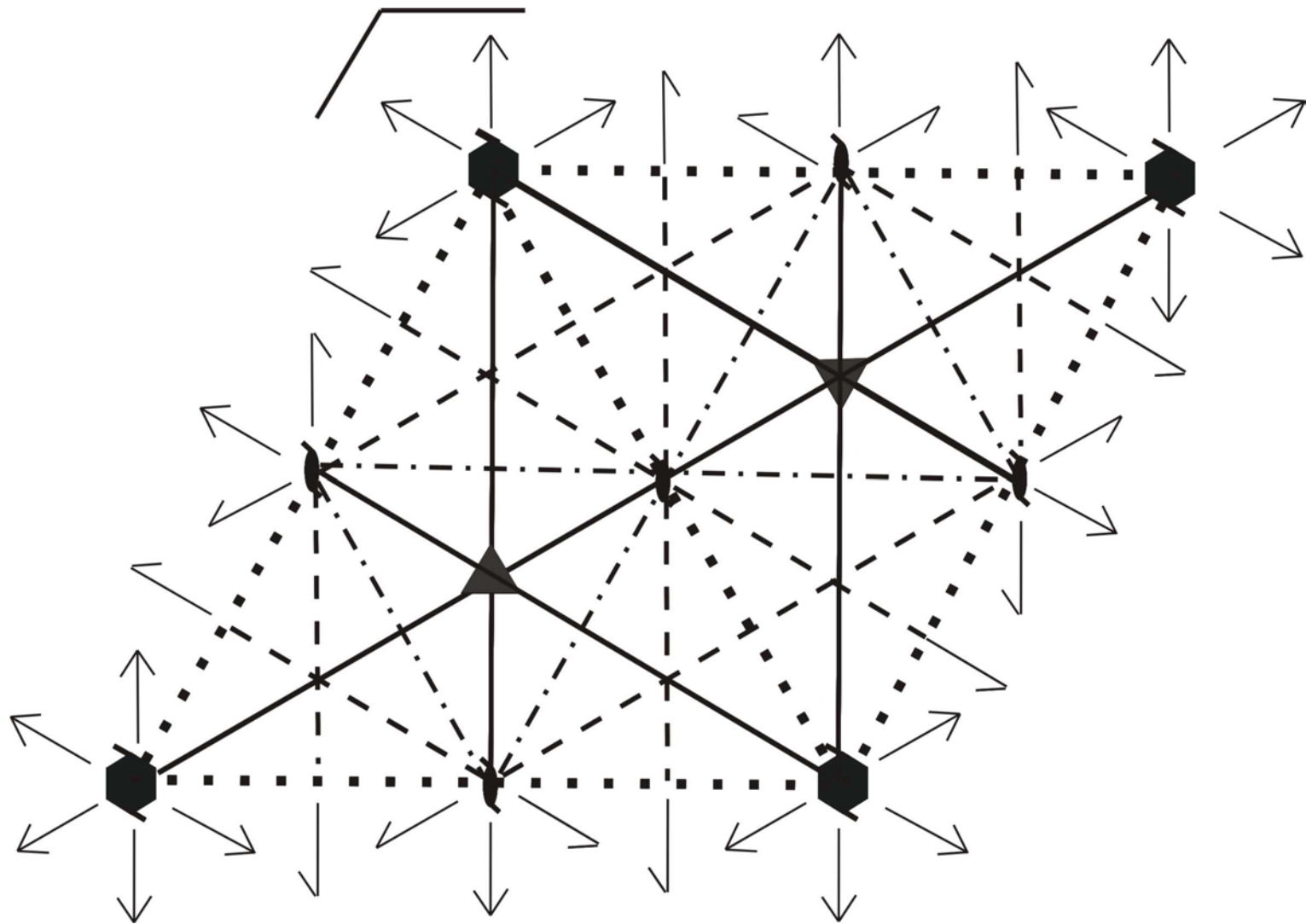
60°

$$m_k \cdot c_d = 2_1$$

90°

$$m_k ; b_k$$

$$c_d ; n_d$$



$$m_z \cdot m_k = 2; \quad m_z \cdot b_k = 2_1;$$

А теперь вводим горизонтальную плоскость!

$$m_k \cdot c_d = 6_3$$

30°

$$m_k \cdot m_k = 3$$

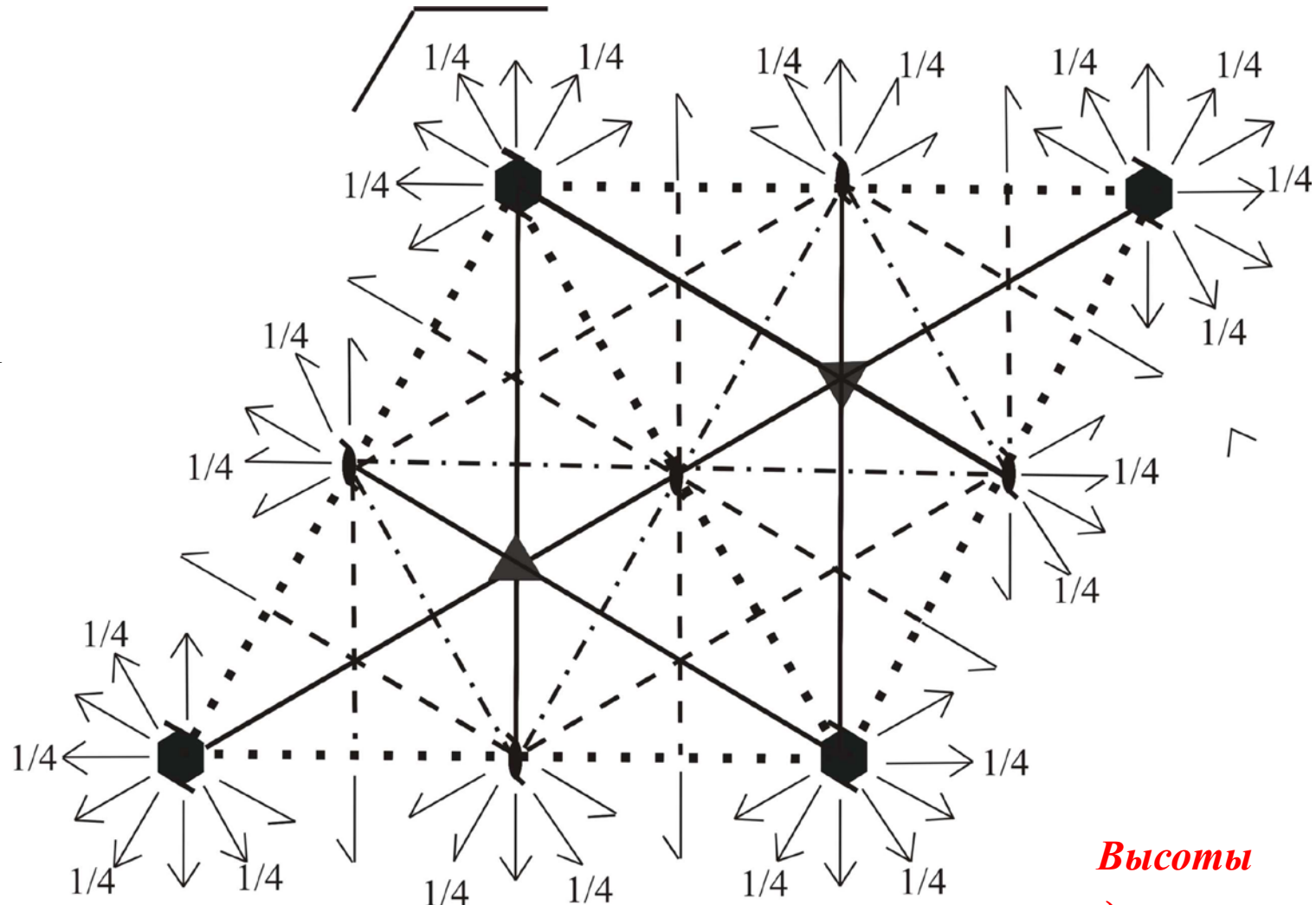
60°

$$m_k \cdot c_d = 2_1$$

90°

$$m_k; b_k$$

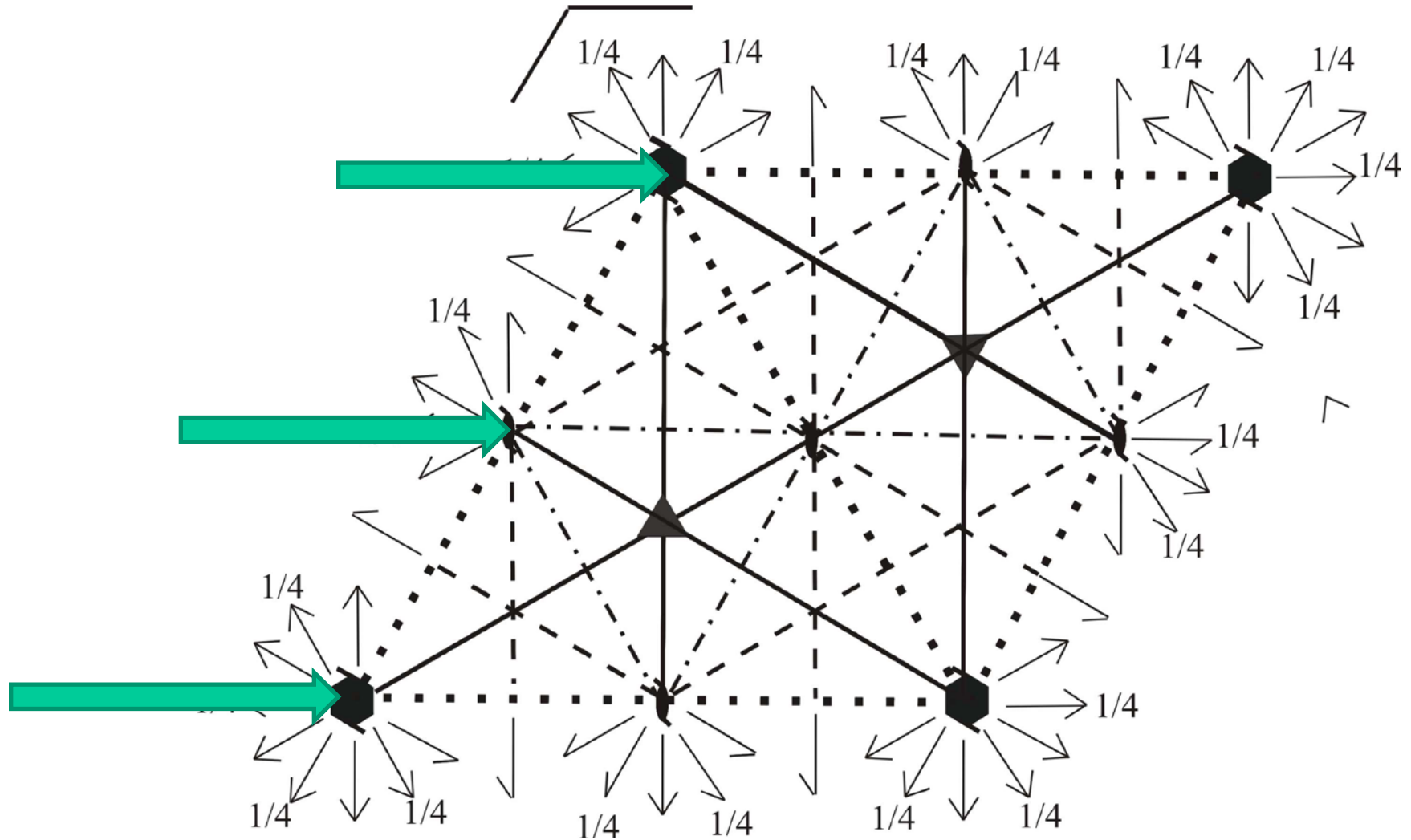
$$c_d; n_d$$



*Высоты
подписываем
карандашом!*

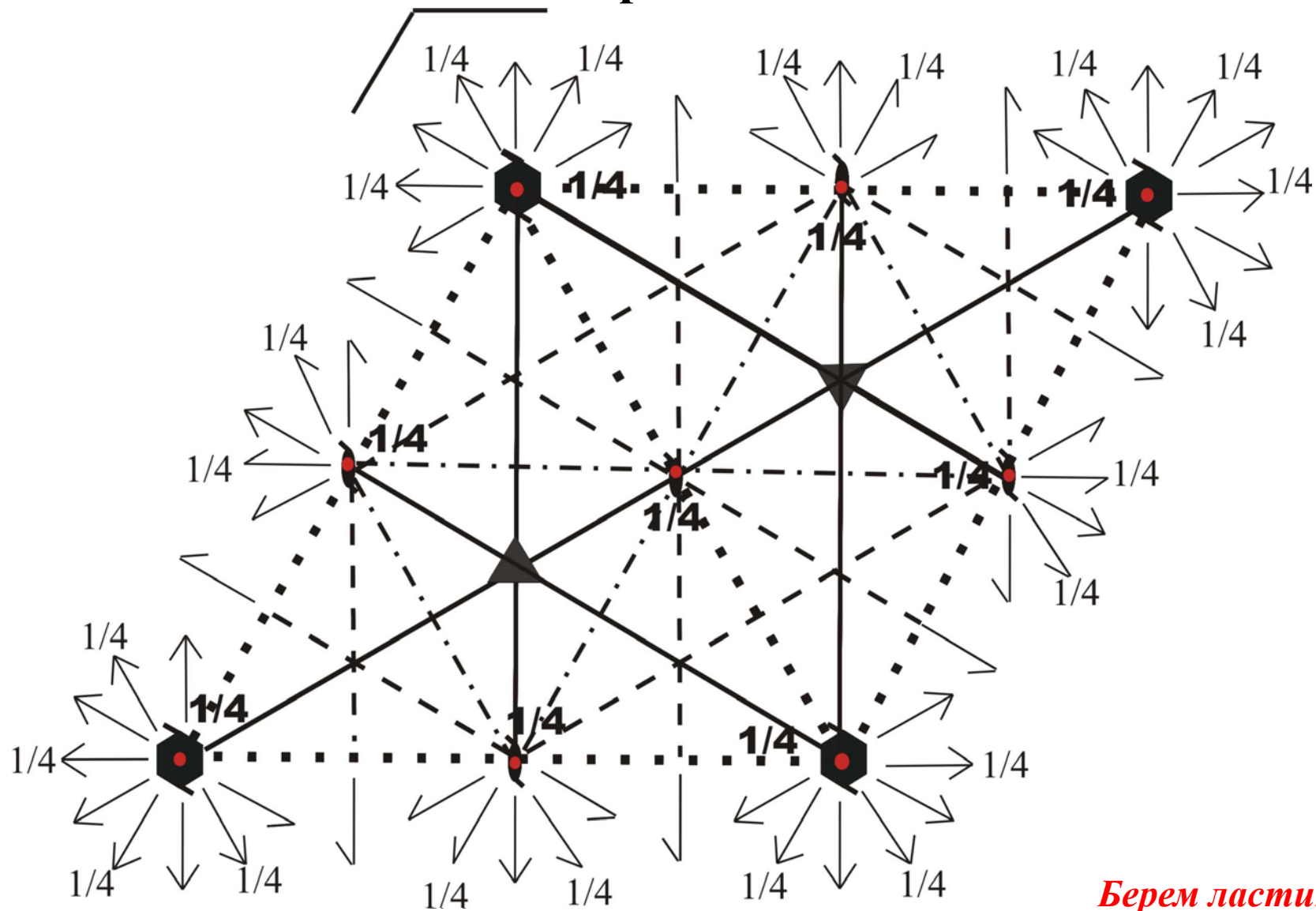
$$m_z \cdot m_k = 2; \quad m_z \cdot b_k = 2_1; \quad m_z \cdot c_d = 2 \quad m_z \cdot n_d = 2_1;$$

Ищем центры любым способом!



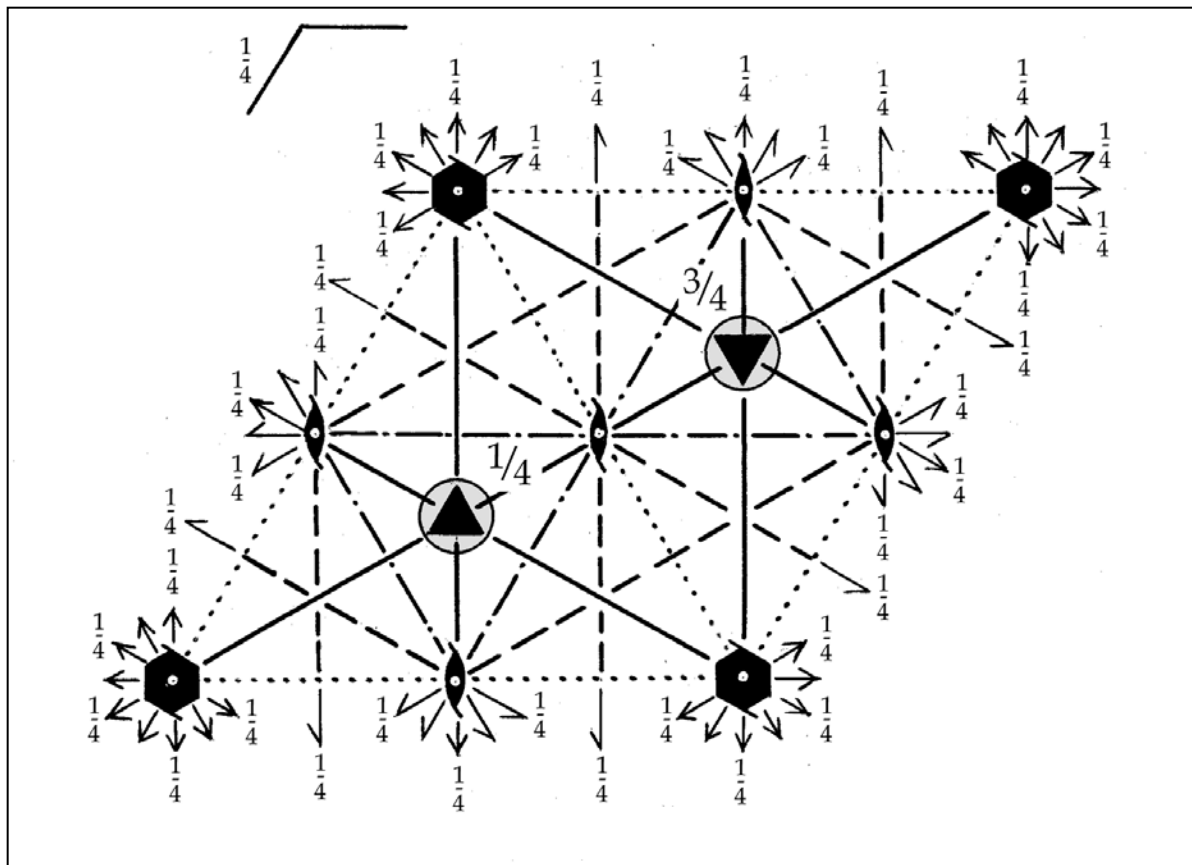
$m_z \cdot 2_{1z}$ например так

А теперь меняем высоты учетом нового начала координат



*Берем ластик
и меняем высоты!*

График пр.группы $P 6_3/m t c$ и характеристики правильной системы точек, занимаемых шарами двухслойной гексагональной плотнейшей упаковки



Симметрия позиции	$\bar{6} m 2$
Величина симметрии	12
Число степеней свободы	0
Кратность	$24:12=2$
Координаты	$1/3 \ 2/3 \ 3/4$ $2/3 \ 1/3 \ 1/4$

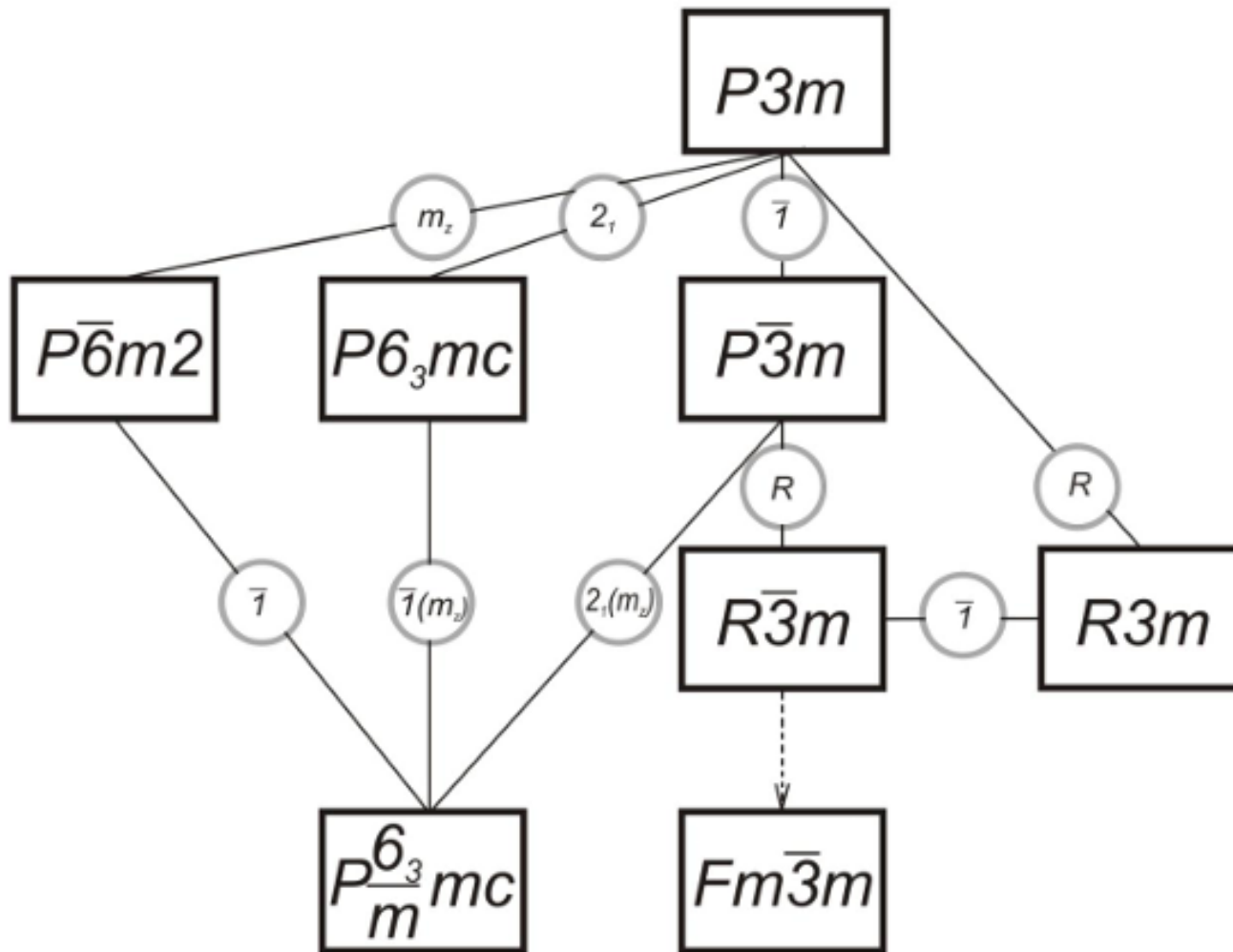
По симметрии все многослойные плотнейшие упаковки относятся к гексагональной сингонии с P или R решетками Браве, и для них возможно всего 7 пространственных групп: $P6_3/ttc$, $P6_3tc$, $P6\bar{t}3$, $P3\bar{t}$, $P3t1$, $P3\bar{t}1$, $R3t1$, из которых минимальным набором элементов симметрии обладает группа **$R3t1$** .

Последняя, таким образом, является максимальным делителем для всех перечисленных пространственных групп, которые могут быть выведены путем добавления одного или нескольких элементов симметрии к минимальному набору.

Таковыми элементами симметрии являются:

- плоскость, перпендикулярная оси упаковки m_z ,
- центр симметрии $\bar{1}$,
- винтовая ось второго порядка 2_{1z} ,
- R -трансляция,
- совокупность нескольких вышеперечисленных элементов симметрии.

Возможные симметрии ПУ



*Их наличие в упаковке можно
определить по символам
Полинга–Белова
либо
по символу Жданова.*

Через центры шаров каждого слоя, обозначенного буквой g , проходит плоскость симметрии, перпендикулярная к главной оси упаковки

(при условии, что вся последовательность букв выше и ниже данного слоя разбивается на две зеркально равные или энантиоморфные части).

Если буква к разбивает формулу упаковки на две такие же симметричные части, то в центрах шаров этого слоя будут располагаться центры инверсии.

Центры симметрии могут находиться также и между одинаковыми слоями в тех случаях, когда пара одинаковых букв kk или gg делит формулу упаковки на два энантиоморфных фрагмента.

Таким образом, при соблюдении зеркального равенства, плоскость может проходить только по слоям g , а центры инверсии находится как в слоях k , так и между любыми одинаковыми слоями.

Если формулу можно разбить на два конгруэнтно равных фрагмента, это однозначно указывает на присутствие в упаковке оси 2_1 , наличие которой обуславливает существование диагональной s -плоскости (как результат взаимодействия 2_1 с координатной плоскостью t)..

Например, в шестислойной упаковке $gkkgkk$ комбинация gkk повторяется дважды (можно записать как $(gkk)_2$), наличие винтовой оси второго порядка приводит к одновременному повышению тройной оси до шестерной 6_3 и возникновению диагональной плоскости s . В результате приходим к группе $R6_3tc$

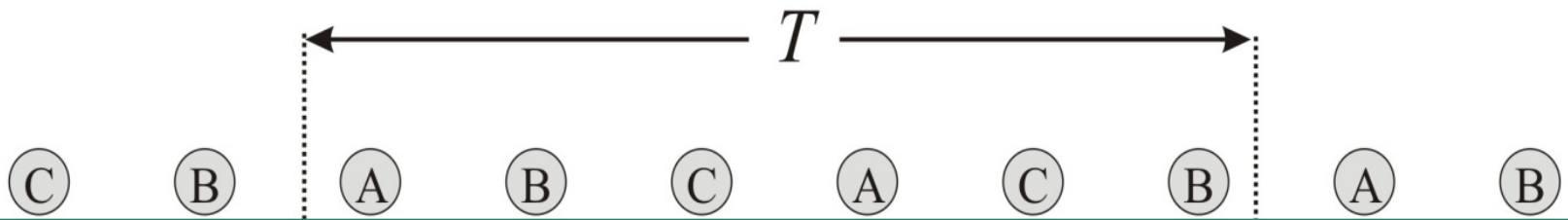
R-трансляция присутствует в случае если вся формула разбивается на три конгруэнтно равных фрагмента, то есть она может быть представлена формулой вида $(\dots)_3$ с троекратным внутренним периодом. Конгруэнтность в этом случае означает одинаковую последовательность символов в скобках.

Наличие R-трансляции можно определить и по ABC-записи. Для этого необходимо проанализировать чередование букв через $1/3$ периода (например, в девятислойной упаковке 1-4-7 слои, 2-5-8 и 3-6-9 слои, соответственно). Если все буквы, связанные между собой этим трансляционным интервалом чередуются по закону $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A$ (либо в противоположную сторону по закону $A \rightarrow C \rightarrow B \rightarrow A$), то перед нами R-ячейка.

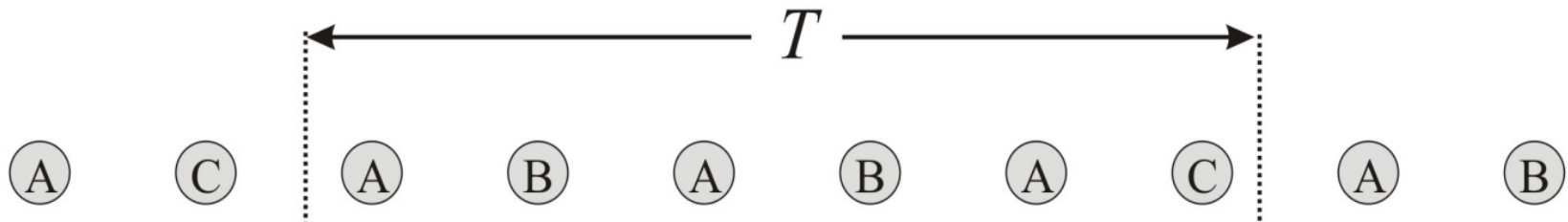
В случае символов Жданова плоскость симметрии может располагаться только между цифрами, если последние разбивают формулу на 2 энантиоморфные части, а центры инверсии - в цифрах при соблюдении того же условия. Причем если цифра четная – центр находится в к-слое, нечетная – между слоями. Определение наличия в упаковке R-трансляции и винтовой оси 2_1 определяется точно также как и в символике Полинга-Белова.

Дополнительный элемент симметрии	Символика Полинга-Белова	Символика Жданова	Классическая ABC - последовательность
Последовательность разбивается на две энантиоморфно равные части			
m_z	слоем z	парой одинаковых цифр	-
$\bar{1}$	слоем k	цифрой	-
	парой одинаковых букв		-
Последовательность разбивается на n конгруэнтно равных частей			
2_1	$n=2$		-
R	$n=3$		см. по тексту

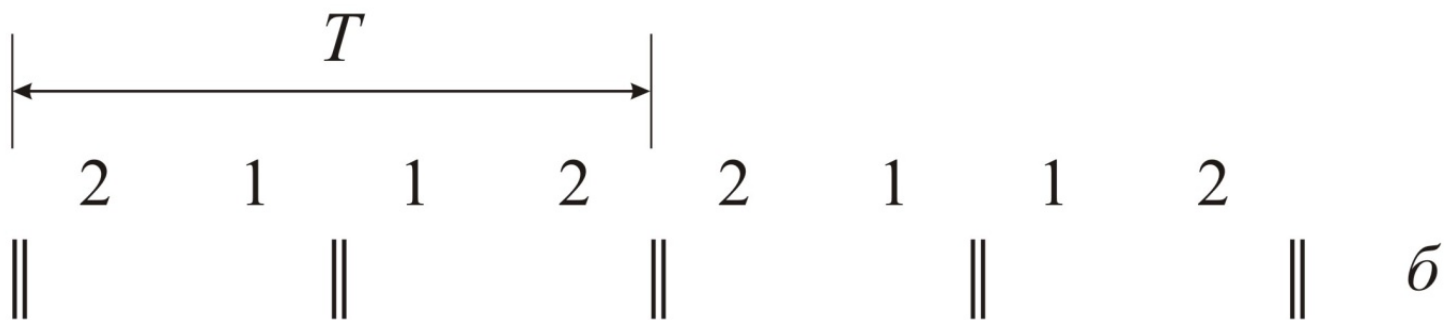
«Рамзаитовая» 6-слойная упаковка (ккг)₂

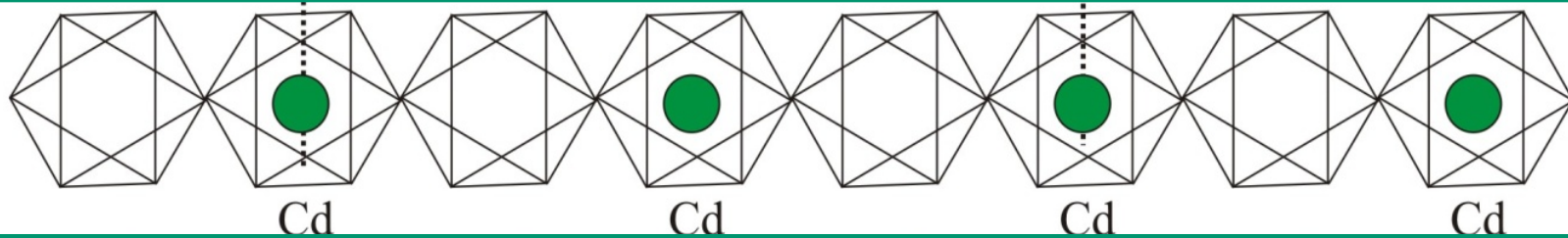
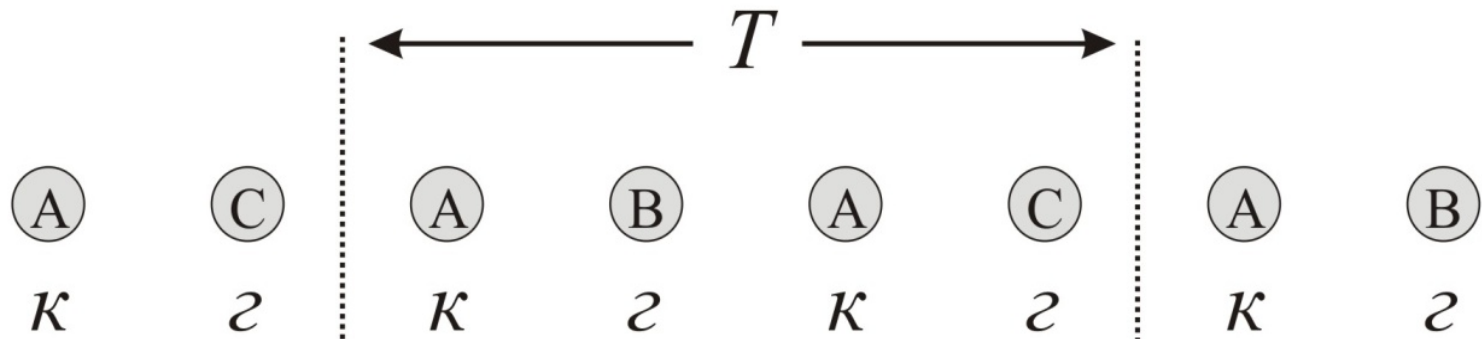


б-слойная плотнейшая упаковка второго типа (кзгзгкз):

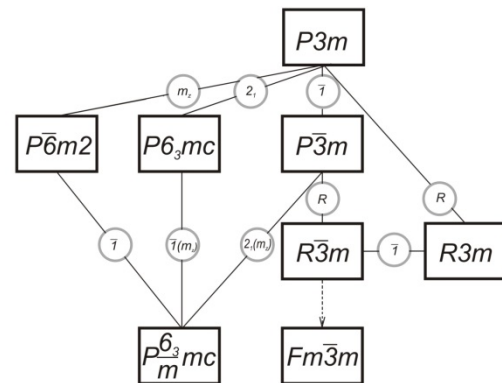


*Так же легко определяется симметрия этих двух упаковок
и по символам Жданова*





конечная группа симметрии – ?



Зачет еще открыт!


До 13 мая будут регулярные обновления.

Как увидите напротив своей фамилии надпись «зачет» -
можно приходить с зачетной книжкой.

Подведение итогов курса с награждением отличившихся – 13 мая


← ↻ 🔒 <https://cryst.geol.msu.ru/courses/mfk2/index.php>

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА, ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

 Кафедра кристаллографии и кристаллохимии


Информация о кафедре
Исторический обзор
Страница памяти
Сотрудники, аспиранты
Научная работа
Публикации сотрудников
Информация для аспирантов
Информация для магистров
Информация для студентов
Учебный план
Учебные курсы
Учебные пособия
Практики
Абитуриенту
Новости
Конференции
Полезные ресурсы
Спорт на кафедре

4,273 Pageviews
Mar 11th - Apr 11th



Rating@Mail.ru

Симметрия кристаллов

 Предлагаемый межфакультетский курс «Симметрия кристаллов» представляет собой популярное изло внутреннего строения. Лекции включают в себя основы классической кристаллографии с элементами кри

Содержание лекций :

1. [Лекция 01 от 11 февраля 2026 г.](#)
2. [Лекция 02 от 18 февраля 2026 г.](#)
3. [Лекция 03 от 25 февраля 2026 г.](#)
4. [Лекция 04 от 04 марта 2026 г.](#)
5. [Лекция 05 от 11 марта 2026 г.](#)
6. [Лекция 06 от 18 марта 2026 г.](#)
7. [Лекция 07 от 25 марта 2026 г.](#)
8. [Лекция 08 от 01 апреля 2026 г.](#)
9. [Лекция 09 от 08 апреля 2026 г.](#)

ЗАЧЕТ:

1. Бонусные баллы за домашние работы (на 8 апр)
2. ВХОД В ЗАЧЕТ ПОКА ЗАКРЫТ

Справочный материал

1. ["32 класса симметрии" Плакат](#)
2. [Сетка Вульфа в формате BMP, радиусом 10 см с разрешением 300 dpi в архиве](#)
3. [Трафарет для рисования, радиус 8 см](#)
4. [Правила формирования международного символа](#)
5. [Правила формирования символа Шенфлиса](#)

Спасибо за сотрудничество!

**Нам с вами было хорошо, пусть и вам
будет жить здорово!**



Для вас работали весь семестр на арене:



*Доктор хим. наук,
член-корр. РАН, зав. каф.
Еремин Николай Николаевич*



*Кандидат хим. наук,
доцент
Еремина Татьяна Александровна*



*Кандидат геол.-мин. наук,
с.н.с. ИГЕМ РАН
Демина Анна Алексеевна*

neremin@mail.ru

t_eremina@list.ru

demina0aa@ya.ru