
ФІЗІКА

УДК 538.9

**Валерий Александрович Лиопо¹, Ирена Александровна Лявишук²,
Станислав Станиславович Секержицкий³, Андрей Вацлович Сабуть⁴**

¹д-р физ.-мат. наук, проф.

²магистр природовед. наук, ст. преподаватель каф. информационных систем и технологий
Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

³канд. физ.-мат. наук, доц.

⁴канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. теоретической физики и теплотехники
Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

Valery Liopo¹, Irena Laushuk², Stanislav Sekerzhitsky³, Andrej Sabut⁴

¹Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

²Master of Science in Natural Sciences,

Senior Lecturer of the Department of Information Systems and Technologies

Yanka Kupala State University of Grodno

³PhD in Physics and Mathematics, Assistant Professor

⁴PhD in Physics and Mathematics, Assistant Professor,

Assistant Professor of the Department of Information Systems and Technologies

Yanka Kupala State University of Grodno

e-mail: sekerzhitsky@rambler.ru

ПЛОТНЕЙШАЯ ДВУХСЛОЙНАЯ ШАРОВАЯ УПАКОВКА – МОДЕЛЬ ГПУ

Проведен анализ структуры гексагональной плотнейшей упаковки, который показал, что она не соответствует требованиям симметрии гексагональных решеток. Исследована двухслойная плотнейшая шаровая упаковка как модель ГПУ. При этом построено матричное представление групп $\bar{6}$ и $\bar{6}$ в кристаллографическом базисе. Установлено, что в двухслойной плотнейшей шаровой упаковке (ДПШУ) нет осей $\bar{6}$ и $\bar{6}$. Показано, что ячейка (ДПШУ) не соответствует ни одному из типов ячеек Браве. Выявлено, что в (ДПШУ) нельзя построить ячейку P -типа. Обосновано утверждение, что (ДПШУ) не является решетчатой структурой и должна рассматриваться как самостоятельный тип атомно-молекулярных систем.

Dense Two-Layer Ball Packaging – HDP Model

The analysis of the structure of the hexagonal closest packing has been carried out, which has shown that it does not meet the requirements of the symmetry of hexagonal lattices. A two-layer densest spherical packing is investigated as an HCP model. At the same time, a matrix representation of groups $\bar{6}$ and $\bar{6}$ in the crystallographic basis was constructed. It was found that there are no axes $\bar{6}$ and $\bar{6}$ in a two-layer densest ball packing (TLDBP). It is shown that the cell (TLDBP) does not correspond to any of the types of Bravais cells. It was revealed that in (TLDBP) it is impossible to build a P -type cell. The statement is substantiated that (TLDBP) is not a lattice structure and should be considered as an independent type of atomic-molecular systems.

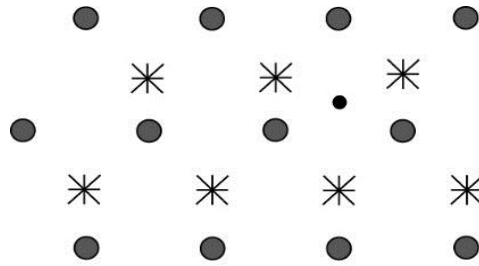
Введение

Атомы в кристаллах с изодесмической связью моделируются шарами. Межатомные расстояния равны сумме их радиусов, которые, наряду с атомными, имеют свои значения в зависимости от типа связей (атомные, ионные, металлические и т. п.).

Если кристалл состоит только из атомов одного типа, то его структура зачастую подчиняется принципу плотнейшей упаковки [1]. Плотнейшая упаковка построена по принципу, приведенному на рисунке 1.

Атомы первого слоя – A – формируют плоскую плотнейшую упаковку. Атомы второго слоя – B – также формируют плотнейшую плоскую упаковку, но эти атомы размещаются в центре лунок (пустот) в атомной A -сетке. Слой атомов, расположенных

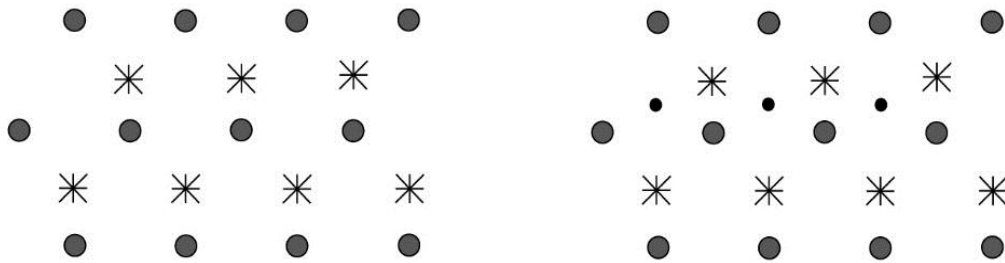
над слоем B , размещается в лунках этого слоя, но размещение этого слоя возможно двумя способами. Первый способ – атом размещается над атомами слоя A в лунках слоя B . Чередование слоев при такой упаковке следующее: $\dots ABABABAB \dots$, поэтому упаковка такого типа называется двухслойной. Если атомы слоя размещаются над пустотами как слоя B , так и слоя A (на рисунке 1 атом такого слоя обозначен $C - (\bullet)$), то последовательность слоев имеет вид: $\dots ABCABCABC \dots$. Такая плотнейшая упаковка называется трехслойной, и ячейка такой структуры – гранецентрированная кубическая. Пример этих упаковок приведен на рисунке 2.



A - ●, B - *, C - ●.

*A – центры плоской шаровой упаковки,
B – центры атомов второго слоя
над пустотами между атомами слоя A,
C – центр атома третьего слоя
над пустотами в слое A и B.*

Рисунок 1. – Схема плотнейшей шаровой упаковки



A - ●, B - *.

A - ●, B - *, C - ●.

a)

b)

Рисунок 2. – Плотнейшие шаровые упаковки:

а) – двухслойная, б) – трехслойная

Для обеих упаковок коэффициент компактности равен $\kappa = 74\%$. В обеих плотнейших упаковках координационное число атомов равно 12. Наименьшим структурным полиэдром является тетраэдр с ребрами, равными $2r$, но на такой ячейке построить трехмерную решетку невозможно, т. к. вдоль оси, не совпадающей с атомными слоями, трансляция отсутствует. Поэтому выбирается ячейка с параметрами $a = b = 2r$, которые лежат в атомной плоскости, параметр c нормален этой плоскости и равен

$\frac{2\sqrt{6}}{3}a$. Каждый атомный слой формирует плоскую сетку с осью b . Именно поэтому двухслойную плотнейшую шаровую упаковку называют гексагональной плотнейшей упаковкой (ГПУ). Коэффициенты компактности двух- и трехслойной упаковок одинаковые и равны 0,74.

Параметры ячейки гексагональной решетки: $a = b \neq c$; $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$. Нижнее основание ячейки находится в слое A .

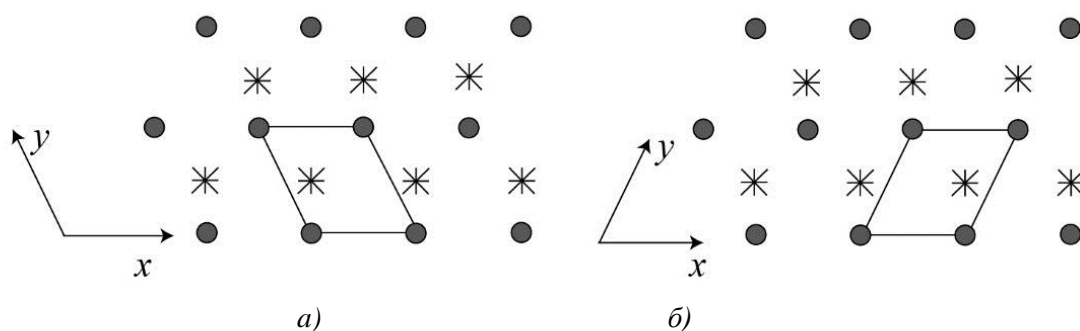


Рисунок 3. – Ячейки с углами а) $\gamma = 120^\circ$, б) $\gamma = 60^\circ$

На рисунке 3 приведена проекция двухслойной плотнейшей упаковки на координатную плоскость XU . Видно, что основание – это параллелограмм с углами $\gamma = 120^\circ$ и $\gamma = 60^\circ$. Обе эти ячейки имеют тождественную структуру, т. к. они определяют только выбор начала координат и направление координатных осей. Ячейка двухслойной плотнейшей упаковки (ДПУ) представляет собой параллелепипед с основанием $a = b$, $\gamma = 120^\circ$ или $a = b$, $\gamma = 60^\circ$. Верхнее основание – трансляционно-тождественный параллелепипед, высота которого равна $c = \frac{2\sqrt{6}}{3}a = 1,633a$. Какая бы ячейка ни выбиралась, $\gamma = 60^\circ$ или $\gamma = 120^\circ$, в обеих внутри имеются атомы, структурно абсолютно тождественные атомам в вершинах ячейки (рисунок 4).

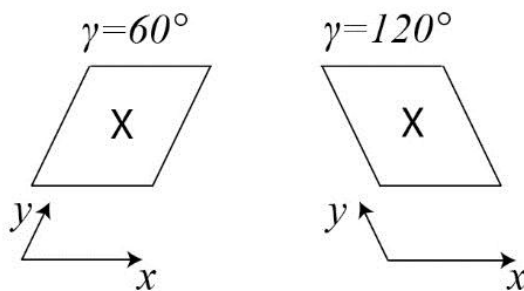


Рисунок 4. – Проекция ячеек на плоскость xu для $\gamma = 60^\circ$ и $\gamma = 120^\circ$

Координаты атома внутри ячейки для $\gamma = 60^\circ$ – $(0,0,0)$, $(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$, для $\gamma = 120^\circ$ – $(0,0,0)$, $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$. Данные координаты – кристаллографические. В атомном слое B именно через эти точки проходит ось b , определяющая симметрию

сетки атомов B , но только в пределах этого слоя. Поэтому в атомных сетках оси b имеются, но для кристалла как объемной структуры ось b отсутствует.

Матричное представление групп $\bar{6}$ и $\bar{6}$ в кристаллографическом базисе

В гексагональных кристаллах есть группа $\bar{6}$, матрица-генератор которой имеет вид:

$$|\bar{6}|_{K\Phi} \Rightarrow \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

В кристаллографическом базисе матрица-генератор точечной группы определяется по формуле:

$$|\bar{6}|_{KT} = |M|^{-1} |\bar{6}|_{K\Phi} |M|, \quad (1)$$

где $|M|$ и $|M|^{-1}$ – метрические тензоры решетки [2], которые для значений $\gamma = 60^\circ$ и $\gamma = 120^\circ$ имеют вид:

$$\gamma = 60^\circ, |M| \Rightarrow \begin{vmatrix} a & \frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}, |M|^{-1} \Rightarrow \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & -\frac{\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix}, \quad (2)$$

$$\gamma = 120^\circ, |M| \Rightarrow \begin{vmatrix} a & -\frac{a}{2} & 0 \\ 0 & \frac{a\sqrt{3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix}, |M|^{-1} \Rightarrow \begin{vmatrix} \frac{1}{a} & \frac{\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3a} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{c} \end{vmatrix}. \quad (2')$$

Следовательно, группы $|\bar{6}|_{KT}$ для этих установок начала координат имеют вид:

$\gamma = 60^\circ$, ось \bar{b} :

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 & \bar{1} & \bar{1} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \bar{1} & \bar{1} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \bar{1} & \bar{1} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (3)$$

$\gamma = 120^\circ$, ось \bar{b} :

$$\begin{vmatrix} \bar{1} & 1 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 1 & 0 & 0 & \bar{1} & 1 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 & 1 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (4)$$

Обратная решетка двухслойной плотнейшей упаковки

Обратная решетка двухслойной плотнейшей упаковки описывается функцией $F(hkl)$, которая при $\gamma = 60^\circ$ имеет вид:

$$F(hkl) = f \left[1 + \exp \left\{ 2\pi i \left[\frac{2}{3}h + \frac{2}{3}k + \frac{l}{2} \right] \right\} \right] = f \left[1 + \exp \left\{ 2\pi i \left[\frac{2}{3}(h+k) + \frac{l}{2} \right] \right\} \right],$$

т. е. для рефлексов типа $00l$ значение $l = 2n$.

Для рефлексов $hk0$ узлы $h+k = 3n$ описываются действительными функциями $F(hk0)$. На рефлексы общего типа (hkl) условие погасания не налагается.

Если $\gamma = 120^\circ$, то:

$$F(hkl) = f \left[1 + \frac{2\pi i}{3}(h+2k) + \frac{l}{2} \right],$$

т. е. для рефлексов типа $00l$ $F(00l) \neq 0$ только при условии $l = 2n$.

Полученные группы являются изоморфными. В обеих группах элементы 2, 4, 6 образуют подгруппы 3, а элементы 3, 6 – подгруппу m_z [3].

С каждым атомным слоем (A или B) совпадает плоскость отражения (m_z). Если группами b_{60} и b_{120} будем действовать на узел решетки (100) , то получим кристаллографические орбиты в $K\Gamma$ -базисе.

В обратной решетке кристалла распределение узлов подчиняется той же точечной симметрии, что и в прямой решетке. Поэтому координаты узлов прямой и обратной решеток в индексах (hkl) те же самые, что и в таблице 1. В ней приведены кристаллографические орбиты для исходной точки B ячеек $\gamma = 60^\circ$ и $\gamma = 120^\circ$.

$$\begin{aligned} \gamma = 60^\circ & \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 2 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} & \gamma^* = 60^\circ & \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 2 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \\ \\ \gamma^* = 120^\circ & \begin{vmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 2 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix} & \gamma = 120^\circ & \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 2 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Таблица 1. – Кристаллографические орбиты точечной группы $\bar{6}$ прямой и обратной решеток для исходной точки $(xyz) = (100)$ или $hkl = 100$ для ячеек $\gamma = 60^\circ$ и $\gamma = 120^\circ$

Угол поворота	0°	60°	120°	180°	240°	300°
$\gamma = 60^\circ \bar{6}$	100	$0\bar{1}0$	$\bar{1}10$	100	$0\bar{1}0$	$\bar{1}10$
$\gamma = 120^\circ \bar{6}$	100	$\bar{1}\bar{1}0$	010	100	$\bar{1}\bar{1}0$	010
$\gamma = 60^\circ$	$\frac{2\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{4}\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$	$\frac{\bar{4}\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ 2\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{4}\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{\bar{4}\ 2\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$
$\gamma = 120^\circ$	$\frac{1\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{\bar{1}\ 2\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{1}\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{\bar{1}\ 2\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$	$\frac{1\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{1}\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$

Как следует из результатов, приведенных в таблице 1, в двухслойной плотнейшей упаковке ось $\bar{6}$ отсутствует. Для атомов слоя *A* под действием группы $\bar{6}$ формируются только координаты трех атомов. Для атомов слоя *B* формируется «антипризма» с треугольными основаниями, развернутыми относительно друг друга на 60° .

Группа 6_{KT} в кристаллографическом базисе для различных значений γ имеет вид:
 $\gamma = 60^\circ$:

$$\begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 & \bar{1} & \bar{1} & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & \bar{1} & \bar{1} & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (5)$$

$\gamma = 120^\circ$:

$$\begin{vmatrix} 1 & \bar{1} & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & \bar{1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \bar{1} & 0 & 0 & \bar{1} & 0 & 0 & \bar{1} & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (6)$$

Таблица 2. – Кристаллографические орбиты точечной группы $\bar{6}$ в *KT*-базисе для $\gamma = 60^\circ$ и $\gamma = 120^\circ$ для исходных точек слоев *A* и *B*

Угол поворота	0°	60°	120°	180°	240°	300°
$\gamma = 60^\circ$	100	010	$\bar{1}10$	$\bar{1}00$	$0\bar{1}0$	$1\bar{1}0$
$\gamma = 120^\circ$	100	110	010	$\bar{1}00$	$\bar{1}\bar{1}0$	$0\bar{1}0$
$\gamma = 60^\circ$	$\frac{2\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{4}\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{\bar{4}\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ 2\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{4}\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{4\ \bar{2}\ 1}{3\ 3\ 2}$
$\gamma = 120^\circ$	$\frac{1\ 2\ 1}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ 1}{3\ 2}$	$\frac{2\ 1}{3\ 2}$	$\frac{1\ 2\ \bar{1}}{3\ 3\ 2}$	$\frac{2\ \bar{1}}{3\ 2}$	$1 - \frac{2\ 1}{3\ 2}$

В двухслойной плотнейшей упаковке отношение параметров $c/a = 1,633$. В таблице 3 приведены литературные данные для металлов с *ГПУ*-структурой [4].

Таблица 3. – Отношение параметров c/a для металлов с *ГПУ*-структурой

Металл в таблице Менделеева	<i>a</i>	<i>c</i>	c/a	$c/a - 1,633$
литий	3,111	5,093	1,637	0,004
бериллий	2,2853	3,5829	1,5677	-0,0653
натрий	3,767	6,154	1,634	0,001

Окончание таблицы 1

магний	3,20928	5,21023	1,6235	-0,0095
скандий	3,3090	5,2733	1,5936	-0,0394
α -титан	2,9504	4,6833	1,587	-0,046
α -кобальт	2,5074	4,0699	1,62316	-0,0098
цинк	2,66466	4,9469	1,856	0,223
β -стронций	4,319	7,071	1,635	0,002
α -иттрий	3,6474	5,7306	1,5712	-0,0618
α -цирконий	3,2312	5,1477	1,5931	-0,0399
технеций	2,735	4,388	1,604	-0,029
рутений	2,7057	4,2815	1,5824	-0,0506
кадмий	2,9787	5,6166	1,8858	0,2528
α -лантан	3,770	12,159	3,2252	1,5922
α -гафний	3,1946	5,0510	1,5811	-0,0519
рений	2,760	4,458	1,615	-0,018
осмий	2,7353	4,3191	1,5790	-0,054
α -таллий	3,4564	5,5247	1,598	-0,035
α -празеодим	3,6725	11,8354	3,2227	1,5897
α -неодим	3,6579	11,7992	3,2257	1,5927
α -самарий	3,621	26,25	7,241	5,608
α -гадолиний	3,6360	5,7826	1,5904	-0,0426
α -тербий	3,6010	5,6936	1,5811	-0,0519
диспрозий	3,5903	5,6475	1,5730	-0,06
гольмий	3,5773	5,6158	1,5698	-0,0632
эрбий	3,5588	5,5874	1,5700	-0,063
тулий	3,5375	5,5546	1,5702	-0,0628
лютеций	3,5031	5,5509	1,5846	-0,0484

Из таблицы 3 следует, что отношение c/a отличается от теоретического на вполне допустимую величину, свойственную непрецизионным исследованиям. Кроме того, в ряде случаев эти отношения объясняются авторами исследований тем, что форма некоторых атомов отличается от сферической, т. е. присутствуют анизодесмические факторы в межатомных взаимодействиях. В двухслойной плотнейшей упаковке реперы ячейки, как и в любых решеточных системах, это три некопланарных вектора. Если за начальный атом взят атом слоя A , то в этой сетке он определяется шестью другими атомами. Два ближайших к начальному атому определяют базовые векторы $a = b$ с углом между ними 60° или 120° . Вектор \overrightarrow{AB} , где B – атом слоя * на рисунке 1, определяет вектор \vec{c} , модуль которого $c = a$. Но на этих трех векторах построить ячейку невозможно. Т. е., строго говоря, ГПУ не есть ячейка с решеточной системой. Ячейка любой решетки должна удовлетворять следующим признакам: точечная симметрия кристалла должна отражаться в точечной симметрии ячейки, ячейка должна относиться к одному из типов Браве: примитивный (P), база бокоцентрированная C (A, B), объемноцентрированная (I), гранецентрированная (F).

Гексагональная решетка характеризуется ячейкой P -типа. В некоторых работах ячейку относят к C -типу с пространственной группой $D_{6h}^4 - C6/mmc$ [4]. Основным признаком гексагональных решеток (таксоном) является наличие в них осей b или \bar{b} [5]. Гексагональная решетка относится к средним сингониям.

Рассмотрим соответствие двухслойной плотнейшей упаковки требованиям гексагональной сингонии. Приведенные результаты расчета кристаллографических орбит

в $KГ$ -базисе (таблицы 1 и 2) показывают, что ось b имеется как в слое атомов A , так и в слое атомов B (рисунок 1). Причем эти две оси совпадают друг с другом. В решетке ось b , как и ось \bar{b} , отсутствует. Таких осей, естественно, нет и в ячейке решетки. Т. к. для описания ячейки необходимо знать два параметра, то для гексагональных упаковок – это параметры $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$ или $\gamma = 60^\circ$. В плотнейшей двухслойной упаковке это условие не выполняется: ячейка описывается одним параметром a , а $c = \frac{2\sqrt{6}}{3}a = 1,633a$.

В двухслойной плотнейшей упаковке ячейка решетки содержит два структурно абсолютно тождественных атома: (000) , $\left(\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}\right)$ или (000) , $\left(\frac{2}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}\right)$. Поэтому на ячейку приходятся две гомологичные точки, а сама ячейка не соответствует ни одной ячейке Браве. В любой решеточной структуре всегда можно построить примитивную ячейку. Для этого необходимо выбрать начальную точку (атом) и соединить его с ближайшими атомами в той же координационной системе. Репер Браве определяют три вектора $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ и углы между ними. Параллелепипед, построенный на этих векторах, – это и есть ячейка решетки. Такими базисными векторами в двухслойной плотнейшей упаковке будут ребра тетраэдра, т. к. ближайшие атомы в слое A лежат от него на расстоянии $a = 2r$. Атом B в лунке этих трех слоев определяет вектор C . Т. е. репер Браве – это три вектора a с углами между ними 60° . Однако трансляции вдоль этих векторов по оси c нет, поэтому ячейку кристалла построить невозможно. Выбор в слое A других двух атомов так, чтобы угол стал равным 120° , ничего не меняет. Слои A и B совпадают с плоскостями отражения. Следовательно, в последовательности $\dots ABABAB \dots$ два соседних слоя энантиоморфны друг к другу. Каждый слой совпадает не только с зеркальной плоскостью, но и является плоскостью двойникования.

Заклучение

Метод моделирования кристаллических структур упаковками шаров широко используется в практике кристаллофизических исследований. В этой модели атомы представлены в виде шаров, радиусы которых относятся друг к другу, как относятся атомные (или ионные) радиусы атомов (ионов) в кристалле. Для моноэлементных кристаллов в качестве модельных берутся шары одинакового размера. Из этих шаров формируется плоская сетка так, что каждый шар окружен шестью контактирующими с ним соседними шарами. Прямая линия, перпендикулярная плоскости упаковки, проходящая через любой атом, является осью шестого порядка (6). В лунки между тремя шарами нижнего слоя размещаются по такой же схеме шары второго слоя. Над шарами второго слоя размещаются шары третьего слоя, но их размещение может быть осуществлено двумя способами. Первый способ, когда шары третьего слоя располагаются в лунках второго слоя над шарами первого слоя. Второй способ – шары третьего слоя размещаются над лунками первого и второго слоев. В этом случае получаются соответственно двухслойные $\dots ABABAB \dots$ и трехслойные $\dots ABCABCABC \dots$ плотнейшие упаковки.

В двухслойных упаковках, которые называются гексагональными плотнейшими упаковками, ячейка кристалла строится в соответствии с требованиями гексагональной сингонии. Для анализа структуры двухслойных плотнейших шаровых упаковок ДПШУ использовались матричные представления точечных групп для кристаллографического базиса. Этот метод основан на описании симметрий группами, элементами матриц которых являются $0, \pm 1$. Основным критерием принадлежности решетки к гексагональной

сингонии является наличие осей b и \bar{b} . В ДПШУ оси b имеются в каждом слое, но эти оси не совпадают друг с другом, и поэтому в решетке ось b отсутствует. Поскольку ячейка гексагональной решетки имеет параметры $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$, то для описания ячейки необходимо знать два параметра: $a=b$ и c . В ячейке ДПШУ ячейку определяет один параметр, т. к. $c = \frac{2\sqrt{6}}{3} = 1,633a$. В гексагональных решетках ячейка может быть только примитивной, т. е. внутри ячейки не может быть точек, гомологичных точкам ее вершин. В ДПШУ атом, находящийся внутри ячейки, имеет координаты $\frac{2}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}$ или $\frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{1}{2}$ и др. в зависимости от выбора системы координат, что не соответствует ни одной из ячеек Браве.

В любой решетке можно построить примитивную ячейку на трех минимальных по размеру векторах. В ДПШУ основным структурным полиэдром есть тетраэдр. Базисными векторами являются ребра тетраэдра, выходящие из общей вершины, т. е. такой базис имеет вид: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$. Но на этом базисе построить решетку для ДПШУ невозможно. Объясняется это тем, что плоскость, проходящая через любой атомный слой, является плоскостью отражения и плоскостью двойникования. Отсюда следует, что ДПШУ, во-первых, не может называться гексагональной, а во-вторых, не соответствует требованиям решетки. Следовательно, ДПШУ должна рассматриваться как самостоятельная атомная структура со своими особенностями и с наличием дальнего порядка с учетом зеркальной симметрии смежных слоев.

Работа может представлять интерес для специалистов в области кристаллографии и кристаллофизики.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конвей, Дж. Упаковки шаров, решетки и группы : в 2 т. / Дж. Конвей, Н. Слоэн. – М. : Мир, 1990. – Т. 2. – 376 с.
2. Лиопо, В. А. Матричная кристаллография / В. А. Лиопо. – Гродно : Изд-во ГрГУ, 1998. – 78 с.
3. Вайнштейн, В. Б. Современная кристаллография : в 4 т. / В. Б. Вайнштейн. – М. : Наука, 1979. – Т. 1. – 384 с.
4. Андреев, А. И. Фундаментальная теория классов симметрии кристаллов / А. И. Андреев // Мир современной науки. – М. : Перо, 2015. – С. 10–16.
5. Narai-Sabo, I. Inorganic crystal chemistry / I. Narai-Sabo. – Budapest : Acad. of Sciences of Hungary, 1969. – 504 p.

Рукапіс надііть у редакцію 24.12.2020