

ФЕДЕРАЦИИ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

по организации и проведению практических занятий

по дисциплине «Кристаллохимия»

для направления подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) Органическая и медицинская химия

Ставрополь
2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА «КРИСТАЛЛОХИМИЯ»	5
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Содержание дисциплины	6
3. Темы семинарских занятий	8
4. Перечень и содержание контрольных работ (КР) и индивидуального задания (ИЗ)	9
5. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости освоения дисциплины	10
5.1. Пример билета контрольной работы по теме «Закрытые элементы симметрии. Симметрия молекул и многогранников»	10
5.2. Пример билета контрольной работы по теме «Открытые элементы симметрии. Симметрия кристаллических структур»	11
5.3. Содержание индивидуального задания по теме «Важнейшие структурные типы сложные веществ»	12
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	12
ПЛАНЫ СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ	14
Семинар 1. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллическое вещество и его свойства	14
Семинар 2. Понятие о симметрии. Операции и элементы симметрии	14
Семинар 3. Взаимодействие элементов симметрии. 32 вида симметрии	17
Семинар 4. Классы симметрии кристаллов. Категории и сингонии	18
Семинар 5. Симметрия многогранников. Обозначение групп симметрии по Шенфлису и классов симметрии по Герману – Могену	19
Семинар 6. Симметрия кристаллических структур. Символы граней и простые формы кристаллов. Типы решеток Бравэ.....	21
Семинар 7. Трансляционные (открытые) элементы симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения.	23
Семинар 8. Группы симметрии различной размерности. Пространственные (федоровские) группы симметрии. Правильные системы точек.....	23

Семинар 9. Симметрия бесконечных одномерных цепей и двумерных слоев. ...	25
Семинар 10. Симметрия трехмерных бесконечных структур	28
Семинар 11. Типы химической связи в кристаллах. Характер кристаллической структуры.	30
Семинар 12. Описание кристаллических структур в терминах плотнейших шаровых упаковок	31

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА «КРИСТАЛЛОХИМИЯ»

1. Цели освоения дисциплины

Кристаллохимия – пограничная наука, возникшая на пересечении больших областей классического естествознания – кристаллографии и химии. Как наука о кристаллических структурах, основанная на теории атомной структуры кристаллов, она представляет собой важнейший раздел химии, так как знание структуры твердых тел необходимо для предсказания и интерпретации их свойств, прогнозирования реакционной способности веществ, разработки методов синтеза твердых веществ.

Цель курса: освоение общих принципов описания кристаллических структур, теории важнейших кристаллохимических явлений и обобщенной кристаллохимии, рассматривающей многообразие конденсированных фаз с различной структурой, изучение физико-химических методов исследования кристаллов.

Задачи курса состоят в:

освоении симметричного аппарата описания молекул, кристаллов и кристаллических структур;

изучении вопросов, связанных с экспериментальным определением кристаллических структур;

рассмотрении химической связи в кристаллах;

знакомстве с основными категориями теоретической кристаллохимии и соотношением между ними;

изучении структурных особенностей различных классов химических соединений и их взаимосвязи с физико-химическими свойствами кристаллов;

рассмотрении современных методов кристаллохимического прогнозирования.

В результате освоения дисциплины студент должен:

– *иметь* представление об общих принципах описания кристаллических структур, основных положениях теории важнейших кристаллохимических явлений и обобщенной кристаллохимии, методах физико-химического исследования структуры твердых веществ.

– *знать* основные теории описания кристаллических структур: дискретные, континуальные, статические и динамические модели; описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок; группы симметрии и структурные классы; типы химической связи в кристаллах; основные категории теоретической кристаллохимии: морфотропия, полиморфизм, изоморфизм, структурная гомология; критерии устойчивости структурного типа.

– *уметь (иметь навыки)* использовать полученные теоретические знания в области кристаллохимии при прогнозировании реакционной способности и свойств веществ; разработки методов синтеза твердых веществ. Осуществлять самостоятельный поиск кристаллохимической информации с использованием различных источников (справочных, научных и научно-популярных изданий, компьютерных баз данных, ресурсов Интернета).

2. Содержание дисциплины

Предмет, задачи и основные понятия кристаллохимии

Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и как метод исследования химических веществ. Кристаллическое вещество. Основные свойства кристалла. Основные законы кристаллографии. Пространственная (трансляционная) решетка кристалла и её элементарная ячейка. Индексы узлов, рядов и плоскостей решетки.

Группы симметрии и структурные классы

Понятия о симметрии. Закрытые элементы симметрии. Взаимодействие элементов симметрии. 32 вида симметрии. Понятие точечной группы, их классификация, изображение на стереографической проекции. Обозначение групп симметрии по Шенфлису. Кристаллографические координатные системы. Международные обозначения классов симметрии (символика Германа – Могена). Системы эквивалентных позиций. Простые формы кристаллов.

Открытые элементы симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения. Взаимодействие закрытых и открытых операций симметрии кристалла между собой и с трансляциями решетки. Типы решеток (типы Бравэ). Структуры Бравэ. Пространственные (федо-

ровские) группы симметрии, их классификация и обозначение. Общие и частные правильные системы точек.

Общая кристаллохимия

Типы химической связи в кристаллах. Ионная модель кристалла и энергия решетки. Уравнение Борна – Ланде и Борна – Майера. Цикл Борна – Габера. Ковалентные кристаллы. Правило Юм – Розери. Молекулярные кристаллы. Металлические кристаллы.

Гомо- и гетеродесмичные структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры.

Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ). Координационные числа и пустоты в ПШУ. Слоистость ПШУ. Координационный полиэдр и координационное число.

Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Ковалентные и Ван-дер-ваальсовы радиусы.

Основные категории теоретической кристаллохимии

Морфотропия. Критерии устойчивости структурного типа. Правила Магнуса – Гольдшмидта, Полинга (ионные кристаллы). Правила Юма – Розери, Грима – Зоммерфельфа, Пирсона (ковалентные кристаллы).

Структурная гомология. Фазы вычитания и внедрения. Псевдосимметрия. Производные и вырожденные структуры.

Полиморфизм и политипизм. Классификация полиморфизма. Фазовые переходы. Механизм полиморфных превращений.

Изоморфизм. Типы изоморфизма. Правила изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания.

Дефекты в кристаллах. Классификация дефектов. Точечные дефекты. Вакансии и межузельные атомы. Дефекты Шоттки и Френкеля. Понятие дислокации. Геометрические свойства дислокаций.

Важнейшие структурные типы

Простые вещества. Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов. Типичные структуры металлов. Изменение характера

структуры в группах Периодической системы, сравнение структур, относящихся к разным группам (правило октета).

Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений. Кристаллические структуры интерметаллических соединений. Кристаллические структуры бинарных соединений АХ, описываемые в терминах ПШУ (анионные упаковки и кладки). Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений АХ и ХУ. Примеры структур различного характера. Кластеры.

Структуры солей кислородсодержащих кислот и сложных оксидов. Структурный тип перовскита. Перовскитоподобные структуры. Структурный тип шпинели. Нормальная и обращенная шпинель. Ферриты и их свойства. Кристаллические структуры силикатов. Их классификация. Алюмосиликаты и силикаты алюминия. Зависимость физических свойств силикатов от их структуры. Цеолиты.

Прикладные аспекты кристаллохимии

Зависимость физических свойств кристаллов от их строения. Механические (твердость, спайность, двойникование), оптические (двулучепреломление, оптическая активность, показатель преломления), электрические (пьезо-, пиро- и сегнето-эффекты) и магнитные свойства.

Современные источники кристаллохимической информации. Базы структурных и рентгенографических данных. Возможности структурного анализа. Проблемы современной кристаллохимии.

3. Темы семинарских занятий

1. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллическое вещество и его свойства.
2. Понятие о симметрии. Операции и элементы симметрии.
3. Взаимодействие элементов симметрии. 32 вида симметрии.
4. Классы симметрии кристаллов. Категории и сингонии.
5. Симметрия многогранников. Обозначение групп симметрии по Шенфлису и классов симметрии по Герману – Могену.
6. Симметрия кристаллических структур. Символы граней и простые формы кристаллов. Типы решеток Бравэ.

7. Трансляционные (открытые) элементы симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения.

8. Группы симметрии различной размерности. Пространственные (федоровские) группы симметрии. Правильные системы точек.

9. Симметрия бесконечных одномерных цепей и двухмерных слоев.

10. Симметрия трехмерных бесконечных структур.

11. Типы химической связи в кристаллах. Характер кристаллической структуры.

12. Описание кристаллических структур в терминах плотнейших шаровых упаковок.

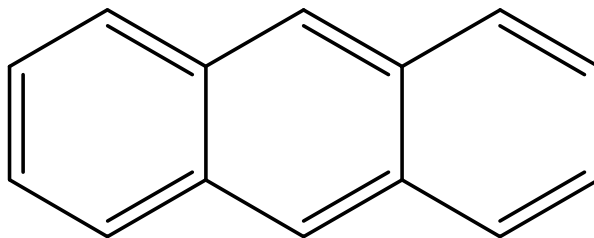
4. Перечень и содержание контрольных работ (КР) и индивидуального задания (ИЗ)

№	Тема КР, ИЗ	Содержание
1	Закрытые элементы симметрии. Симметрия молекул и многогранников (КР).	Понятия о симметрии. Закрытые элементы симметрии. Понятие точечной группы, их классификация, изображение на стереографической проекции. Обозначение групп симметрии по Шенфлису. Кристаллографические координатные системы. Международные обозначения классов симметрии (символика Германа-Могена). Системы эквивалентных позиций. Простые формы кристаллов.
2	Открытые элементы симметрии. Симметрия кристаллических структур (КР).	Открытые элементы симметрии. Типы решеток (типы Бравэ). Структуры Бравэ. Пространственные (федоровские) группы симметрии, их классификация и обозначение. Общие и частные правильные системы точек.
3	Важнейшие структурные типы сложных веществ (ИЗ).	Структурные типы AX и AX ₂ : CsCl, NaCl, ZnS (сфалерит и вюрцит), NiAs, CaF ₂ , TiO ₂ , CdI ₂ , CdCl ₂ . Структурный тип шпинели AB ₂ O ₄ , структурный тип перовскита ABO ₃ . Строение клатратов и кристаллогидратов. Строение силикатов и алюмосиликатов.

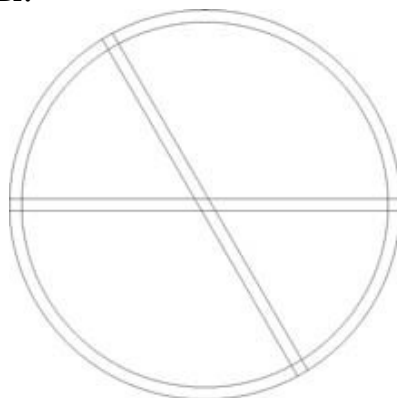
5. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости освоения дисциплины

5.1. Пример билета контрольной работы по теме «Закрытые элементы симметрии. Симметрия молекул и многогранников»

1. Обозначьте элементы симметрии плоской молекулы. Запишите обозначение элементов симметрии по Бравэ.



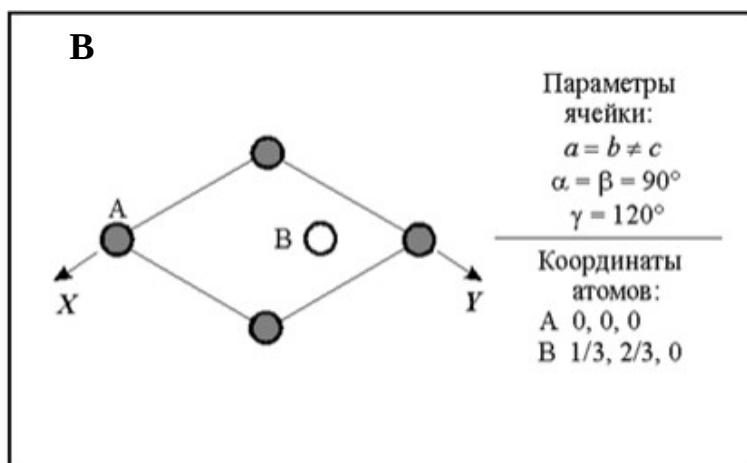
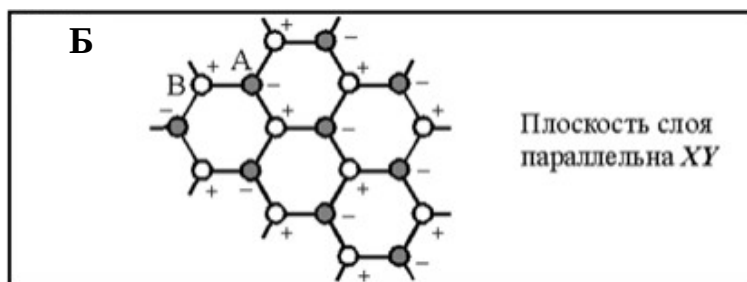
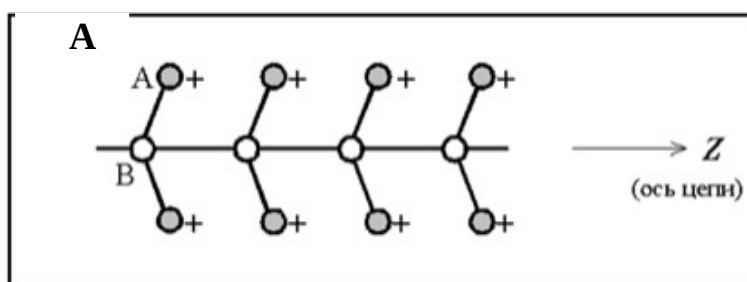
2. Выведите полный набор элементов симметрии и определите категорию точечной группы:



3. Используя модель молекулы и многогранника:
назовите элементы симметрии, напишите формулу симметрии по Бравэ;
укажите категорию, сингонию и вид симметрии;
запишите обозначение класса симметрии по Шенфлису и Герману-Могену;
нанесите элементы симметрии на проекцию.

5.2. Пример билета контрольной работы по теме «Открытые элементы симметрии. Симметрия кристаллических структур»

Запишите структурные классы цепи (А), слоя (Б) и кристаллической структуры (В), проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



5.3. Содержание индивидуального задания по теме «Важнейшие структурные типы сложные веществ»

1. Словесное описание структуры.

2. Кристаллографическое описание:

определить ячейку Бравэ;

подсчитать число атомов различного типа, которое приходится на ячейку Бравэ, определить кристаллохимическую формулу соединения, число формульных единиц;

определить взаимную координацию атомов, координационное число и координационный полиэдр для каждого сорта атомов;

3. Кристаллохимическое описание:

описать структуру в терминах плотнейших шаровых упаковок, если это возможно;

указать характер сочленения разнообразных структурных фрагментов;

пояснить распределение атомов определенного сорта по кристаллографическим позициям;

указать минералы, кристаллизующиеся в этом структурном типе;

указать на возможный изоморфизм атомов в конкретных структурных позициях;

указать типы химических связей между атомами.

Список структур: CsCl, NaCl, ZnS (сфалерит и вюрцит), NiAs, CaF₂, TiO₂, CdI₂, CdCl₂, KClO₄, CaCO₃ (кальцит), квасцы. Структурный тип шпинели AB₂O₄, структурный тип перовскита ABO₃. Силикаты и алюмосиликаты.

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия. М.: КДУ, 2005. 592 с.

2. Урусов В.С., Ерёмин Н.Н. Кристаллохимия. Краткий курс. М.: МГУ, 2010. 256 с.

б) дополнительная литература:

1. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971. 400 с.
2. Зоркий П.М. Критический взгляд на основные понятия химии. // Российский химический журнал. 1996. Т. XL, № 3. С. 5–25.
3. Зоркий П.М. Очерки истории кристаллохимии. Российский химический журнал. 1996. Т. XL, № 3. С. 103–120.
4. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во МГУ, 1986. 176 с.
5. Зоркий П.М. Структурная химия на рубеже веков. // Российский химический журнал. 2001. Т. XLV, № 2. С. 3–10.
6. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений. М.: Мир, 1971. 304 с.
7. Полторак О. М., Ковба Л. М. Физико-химические основы неорганической химии. М.: Изд-во МГУ, 1984. 288 с.
8. Попов Г. М., Шафрановский И. И. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1972. 352 с.
9. Порай-Кошиц М. А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высшая школа, 1989. 192 с.
10. Урусов В. С. Как кристаллохимия предсказывает структуру и свойства кристаллов. // Соросовский образовательный журнал. 1997. № 12. С. 41–47.
11. Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 1987.
12. Уэлс А. Структурная неорганическая химия: в 3 т. М.: Мир, 1987. Т. 1. 408 с., Т. 2. 696 с., Т. 3. 564 с.
13. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1989. 496 с.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Crystallographic and Crystallochemical Database for Minerals and their Structural Analogues. Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов. URL: <http://database.iem.ac.ru/mincryst/>.
2. Минералогическая база данных. URL: <http://web.wt.net/~daba/Mineral/index.htm>.
3. Минералогическая база данных ATHENA. URL: <http://un2sg4.unige.ch/athena/mineral/mineral.html>.
4. Учебные материалы для курса «Кристаллохимия» для студентов МГУ. URL: <http://www.chem.msu.su/rus/cryst/welcome1.html>.

г) учебно-методические пособия:

1. Мишенина Л.Н. Кристаллохимия (мультимедийное учебное пособие). Томск. ИДО ТГУ, 2007. URL: http://ido.tsu.ru/iop_res2/kristallohimia/

ПЛАНЫ СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ

Семинар 1. Предмет и задачи кристаллохимии.

Кристаллическое вещество и его свойства

1. Предмет и задачи кристаллохимии.
2. Кристаллическое вещество, основные свойства кристалла.
3. Основные законы кристаллографии.

Вопросы и задания

1. Сформулируйте основные цели и задачи кристаллохимии.
2. Покажите связь кристаллохимии с другими науками.
3. Что называется кристаллом в современном понимании этого термина?
4. Какие различные твердые состояния вещества известны сегодня? В чем особенности кристаллического состояния?
5. Как закон постоянства углов помогает диагностировать кристаллы различных минералов?
6. Что такое грань, ребро и вершина?
7. Сколько вершин у октаэдра и ребер у тетраэдра?
8. В чем отличия природных и синтетических кристаллов?

Семинар 2. Понятие о симметрии. Операции и элементы симметрии

1. Понятие и операции симметрии.
2. Простые элементы симметрии: центр, ось, плоскость.
3. Сложные элементы симметрии: зеркально-поворотные и инверсионные оси.
4. Символика Бравэ.

Вопросы и задания

1. Что такое симметрия?
2. Что такое операция и элемент симметрии?
3. Чем различаются операции симметрии первого и второго рода? Перечислите их.

4. Почему в кристаллах встречаются поворотные оси строго определенных порядков?

5. Как действует зеркально-поворотная ось симметрии?

6. Как действует инверсионная ось симметрии?

7. Продемонстрируйте на чертеже действие инверсионных осей 1, 2, 3, 4 и 6 порядков.

8. Какими простыми элементами симметрии можно заменить действие инверсионной оси шестого и третьего порядков? Дайте объяснение.

9. Какими простыми элементами симметрии можно заменить действие инверсионной оси первого и второго порядков? Дайте объяснение.

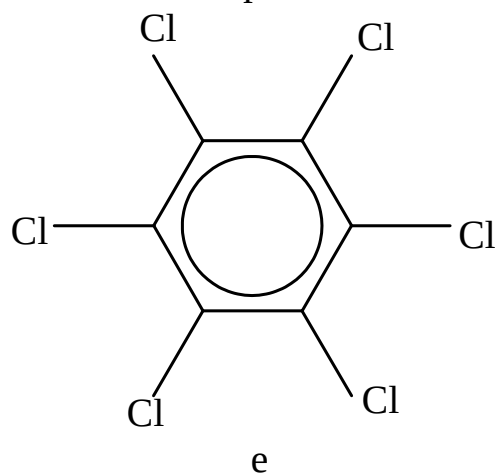
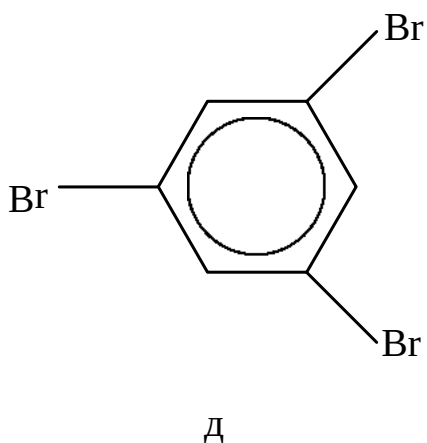
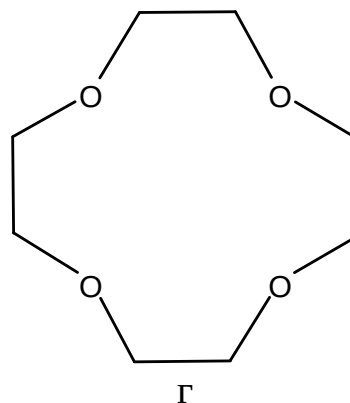
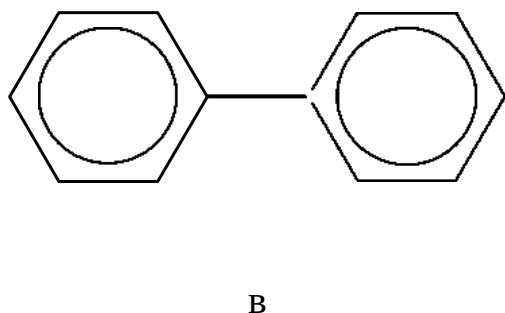
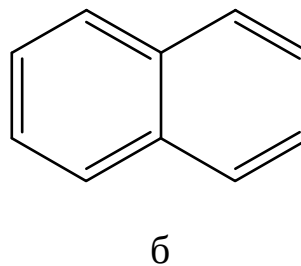
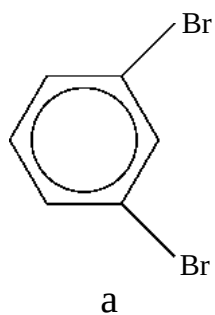
10. Почему из всех сложных осей графический символ имеет только ось четвертого порядка?

11. Посмотрите на фотографию главного корпуса ТГУ. Какие элементы симметрии можно найти? Может ли кристалл иметь такой же набор элементов симметрии?



Рис. 1. Главный корпус НИ ТГУ

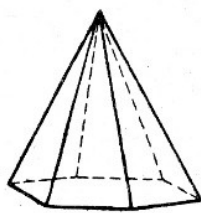
12. Определите элементы симметрии плоских молекул, покажите их на рисунке, запишите в символике Бравэ:



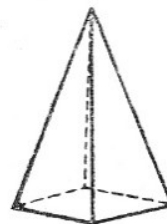
13. Определите элементы симметрии плоских фигур, покажите их на рисунке, запишите в символика Бравэ:

косоугольный параллелепипед;
 прямоугольник;
 равнобедренный треугольник;
 равносторонний треугольник;
 квадрат;
 правильный шестиугольник.

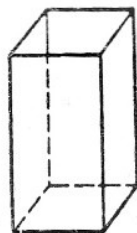
14. Определите элементы симметрии объемных фигур, покажите их на рисунке, запишите в символика Бравэ:



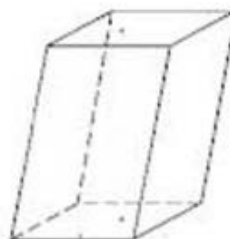
а



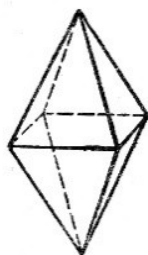
б



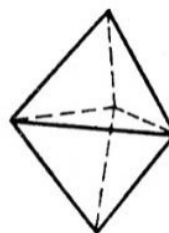
в



г



д



е

Семинар 3. Взаимодействие элементов симметрии. 32 вида симметрии

1. Взаимодействие элементов симметрии (теоремы).
2. 32 вида симметрии (вывод).

Вопросы и задания

1. Выведите точечные группы симметрии и запишите их символы:
 поворот вокруг оси второго порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии;
 отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, лежащей в этой плоскости;
 последовательные повороты вокруг двух взаимно перпендикулярных осей второго порядка;

поворот вокруг оси четвертого порядка и отражение в перпендикулярной ей плоскости симметрии;

последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 45° , а третья им перпендикулярна;

отражения в двух пересекающихся под углом 30° плоскостях симметрии и центре инверсии.

2. Дайте определение единичного направления и охарактеризуйте его свойства.

3. Дайте определение симметрично-равного направления.

4. Что такое вид симметрии? Перечислите их.

Семинар 4. Классы симметрии кристаллов. Категории и сингонии

1. Понятие категории и сингонии.

2. Понятие точечной группы, их классификация, изображение на стереографической проекции.

Вопросы и задания

1. Что положено в основу разделения классов симметрии на категории? Перечислите их.

2. Что положено в основу разделения классов симметрии на сингонии? Перечислите их.

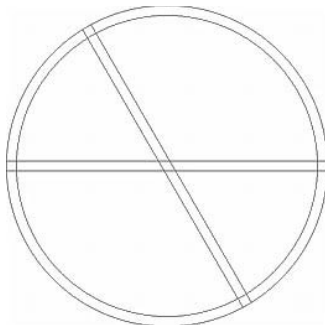
3. Какой класс симметрии возникнет, если к исходному классу добавить новый элемент симметрии (см. таблицу)? К какой сингонии будет относиться полученный класс? Нарисуйте его проекцию.

№	Исходный класс	Новый элемент симметрии
1	L_2P	горизонтальная плоскость P
2	$3L_23PC$	вертикальная плоскость под углом 45° к исходным плоскостям
3	L_4P	центр симметрии
4	L_6L_2	центр симметрии

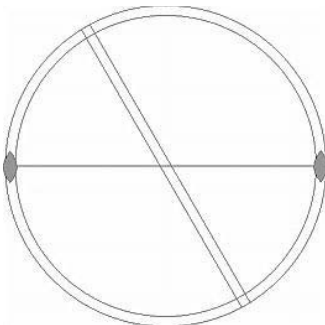
4. Покажите на проекции полную стереографическую проекцию элементов симметрии точечных групп, возникающую при взаимодей-

ствии симметрических операций, заданных указанными на проекции элементами симметрии:

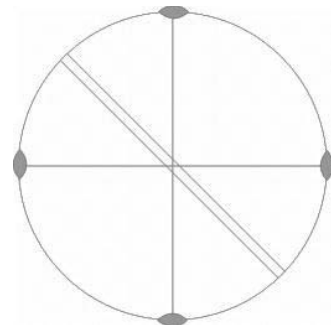
5.



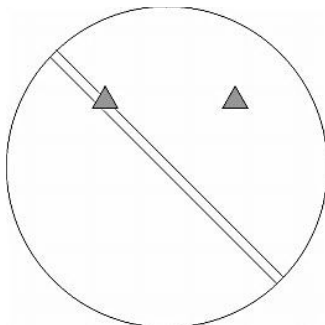
а



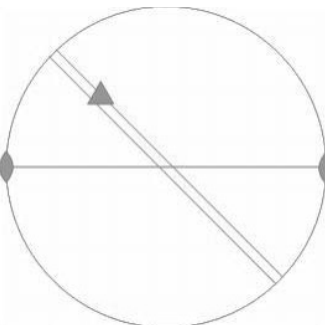
б



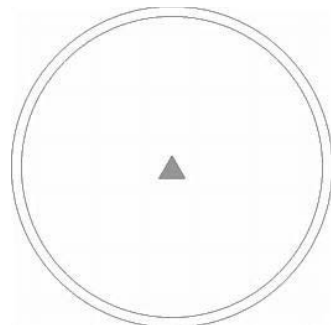
в



г



д



е

6. Используя модель многогранника:
назовите элементы симметрии, напишите формулу симметрии по Бравэ;
укажите категорию, сингонию и вид симметрии;
нанесите элементы симметрии на проекцию.

Семинар 5. Симметрия многогранников. Обозначение групп симметрии по Шенфлису и классов симметрии по Герману – Могену

1. Кристаллографические системы.
2. Обозначения групп симметрии по Шенфлису.
3. Обозначение классов симметрии по Герману – Могену.

Вопросы и задания

1. В чем преимущество при описании кристаллов кристаллографической системы координат перед декартовой?

2. Сформулируйте принципы построения символа Шенфлиса. В чем преимущества символики Шенфлиса перед символикой Бравэ?

3. Какие направления фиксируются на первом, втором и третьем месте в международной символике Германа – Могена в различных категориях? Какие преимущества международной символики перед символикой Шенфлиса и Бравэ?

4. Записать символами Шенфлиса и Германа – Могена точечные группы, заданные кристаллографической формулой (символикой Бравэ), назовите категорию и сингонию точечной группы:

L_2 ;

L_22P ;

L_44L_2 ;

L_33L_23PC ;

L_66P ;

$3L_24L_3$;

$3L_24L_36P$;

$3L_44L_36L_2$.

5. Запишите символы Германа – Могена точечных групп, заданных символами Шенфлиса, назовите категорию и сингонию точечной группы:

C_{3v} ;

D_{4h} ;

C_{6h}

T_h ;

O_h ;

D_2 ;

D_{2d} ;

C_{3i} ;

D_{3h} .

6. Запишите символы Бравэ и Шенфлиса точечных групп, заданных символами Германа – Могена, назовите категорию и сингонию точечной группы:

1;
m;
mm2;
—mm;
4;
42m;
32;
÷;
m3;
m3m.

7. Используя модель молекулы или многогранника:
назовите элементы симметрии, напишите формулу симметрии по Бравэ;
укажите категорию, сингонию и вид симметрии;
запишите обозначение класса симметрии по Шенфлису и Герману – Могену;
нанесите элементы симметрии на проекцию.

Семинар 6. Симметрия кристаллических структур. Символы граней и простые формы кристаллов. Типы решеток Бравэ

1. Символы граней кристаллов (индексы Миллера).
2. Простые формы кристаллов.
3. Пространственная решетка.
4. Типы решеток Бравэ (с выводом).

Вопросы и задания

1. Дайте определение кристаллографических индексов Миллера (*hkl*).
2. Изобразите на чертеже плоскости с индексами (111), (023), (301), (110), (002), (100), (020), (132).
3. Дайте определение простой формы.
4. Чем открытая простая форма отличается от закрытой?
5. Что такое комбинационный многогранник?
6. Чем частная простая форма отличается от общей?

7. Перечислите формы, которые встречаются только в одном классе низшей категории.

8. В каких классах средней категории все кристаллы являются комбинационными многогранниками?

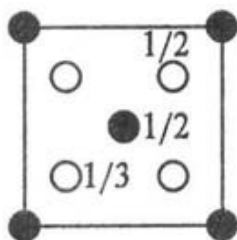
9. Какая простая форма гексагональной сингонии имеет наибольшее число граней?

10. В чем особенность простых форм кубической сингонии?

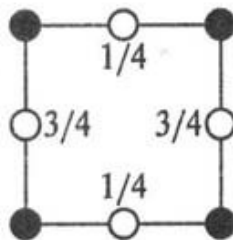
11. Дайте определение пространственной решетки: одно-, двух- и трехмерной.

12. Сформулируйте правила выбора ячеек Бравэ и выведите их.

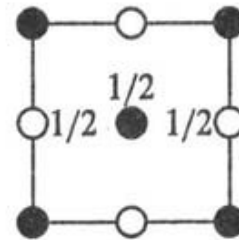
13. Определите тип решеток Бравэ тетрагональных кристаллов:



а

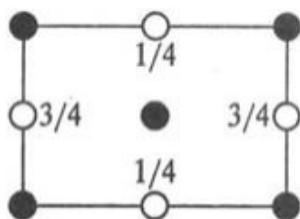


б

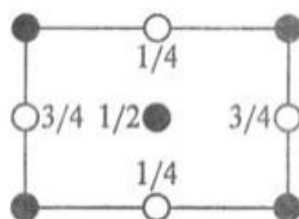


в

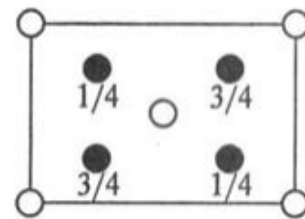
14. Определите тип решеток Бравэ ромбических кристаллов:



а

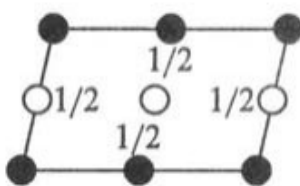


б

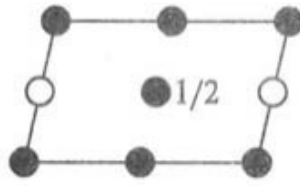


в

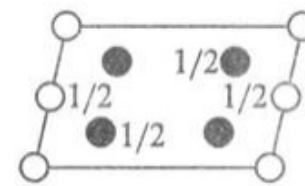
15. Определите тип решеток Бравэ моноклинных кристаллов:



а

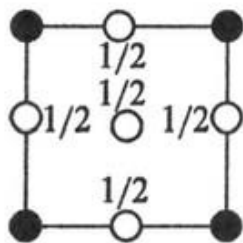


б

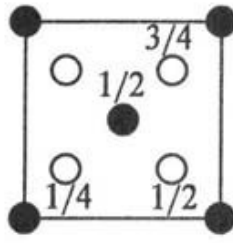


в

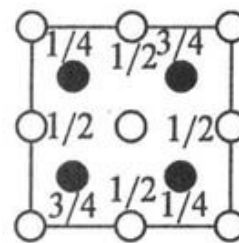
16. Определите тип решеток Бравэ кубических кристаллов:



а



б



в

Семинар 7. Трансляционные (открытые) элементы симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения

1. Понятие трансляции и трансляционного переноса, ось и шаг трансляции.
2. Плоскости скользящего отражения.
3. Винтовые оси.

Вопросы и задания

1. Дайте определение трансляционного переноса, оси и шага трансляции.
2. Какие симметричные преобразования реализуются при действии плоскости скользящего отражения.
3. Какие плоскости скользящего отражения существуют, в чем их отличие?
4. Как действует винтовая ось симметрии? Оси каких типов реализуются в кристаллах?

Семинар 8. Группы симметрии различной размерности. Пространственные (федоровские) группы симметрии. Правильные системы точек

1. Группы симметрии различной размерности.
2. Пространственные группы симметрии Федорова (определение, принцип построения символа для всех категорий).
3. Понятие о правильных системах точек.

Вопросы и задания

1. Назовите группы симметрии различной размерности, существующие в 3-мерном пространстве и охарактеризуйте их.
2. Какие направления фиксируются на первом, втором, третьем и четвертом месте в международной символике Германа-Могена в различных категориях?
3. В чем состоят особенности построения символа Германа-Могена для объектов различной размерности?
4. Установите категории и сингонии, к которым принадлежат следующие пространственные группы, объясните все обозначения:

$P \text{ --- } \rightarrow$;

$I \text{ ---md}$;

$P3 \text{ ---}$;

$C \text{ ;}$

$P \text{ ;}$

$P6 \text{ ---} 22$;

$P2 \text{ } 2 \text{ } 2 \text{ ;}$

$Fdd2$;

$Fm3m$.

5. Дополните символ пространственной группы пропущенными элементами симметрии:

$P \text{ --- } \rightarrow$;
?

$P \text{ --- } \rightarrow$;
?

$P \text{ --- } \rightarrow$;
?

$P4 \text{ } n?$;

$P6 \text{ } ?m$.

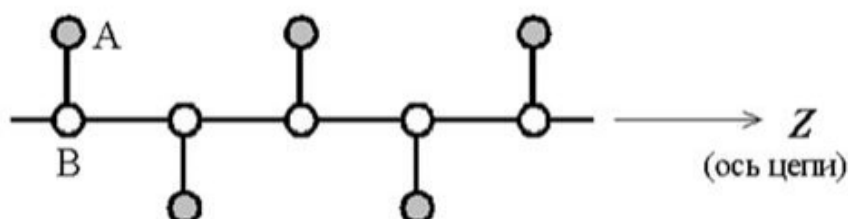
6. Дайте определение правильной системы точек. Чем отличаются общие и частные системы?
7. Охарактеризуйте характеристики правильной системы точек: величину симметрии, число степеней свободы, кратности и координаты.

Семинар 9. Симметрия бесконечных одномерных цепей и двухмерных слоев

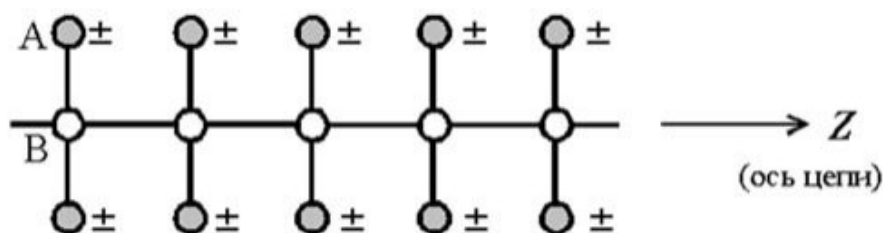
1. Симметрия одномерных цепей.
2. Симметрия двухмерных слоев.

Вопросы и задания

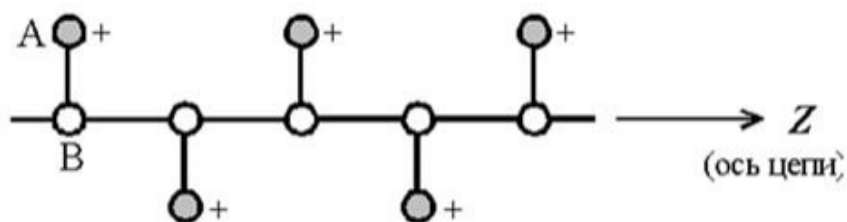
1. Поясните различия в симметрии групп (плоских цепей – бордюров) и (трехмерных цепей – стержней).
2. Поясните различия в симметрии групп (сетчатых орнаментов – обоев) и (объемных слоев).
3. Запишите структурный класс цепей, проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



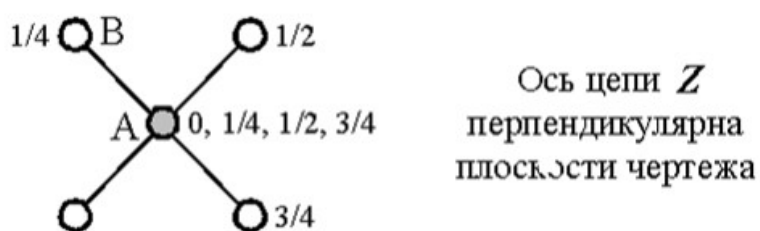
а



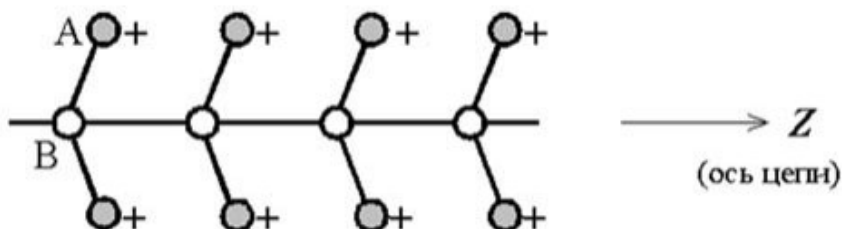
б



В

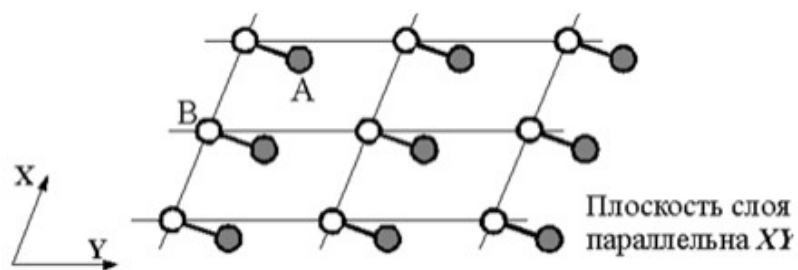


Г

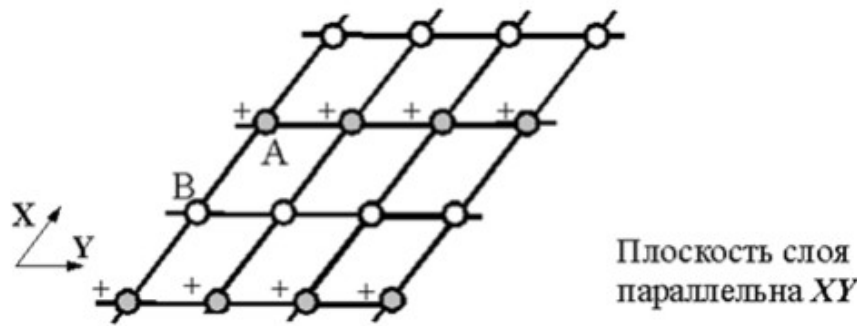


Д

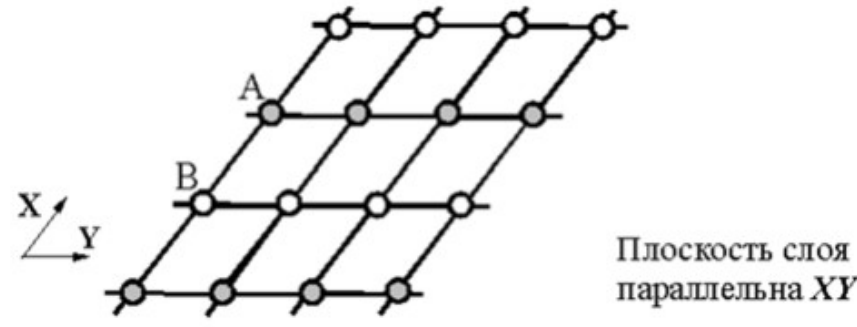
4. Запишите структурный класс слоев, проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



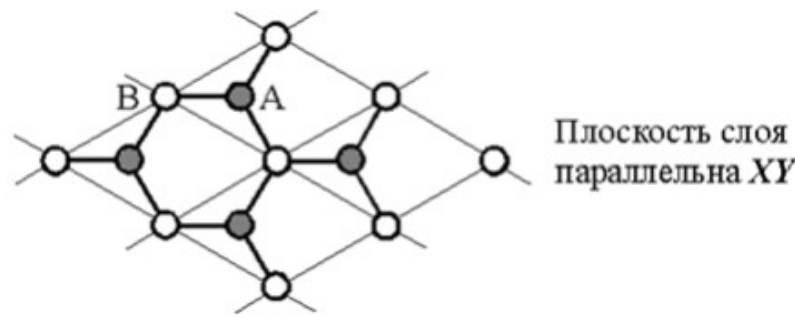
а



б



в



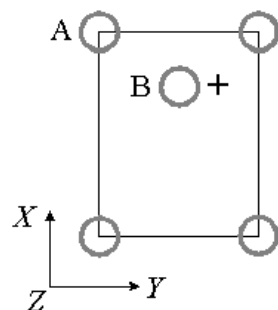
г

Семинар 10. Симметрия трехмерных бесконечных структур

1. Трехмерная пространственная решетка.
2. Координационные числа, координационные полиэдры, число формульных единиц в элементарной ячейке.

Вопросы и задания

1. Дайте определение пространственной решетки.
2. В чем различие понятий «кристаллическая решетка» и «кристаллическая структура».
3. Как определяется координационное число структурных единиц в элементарной ячейке?
4. Как образуется координационный полиэдр?
5. Как рассчитывается число формульных единиц?
6. Запишите структурный класс трехмерных структур, проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



Параметры ячейки:

$$a \neq b \neq c$$

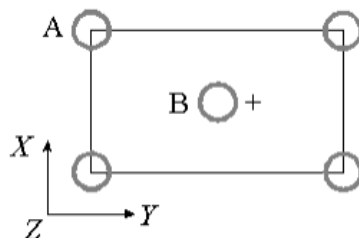
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Координаты атомов:

$$A \quad 0, 0, 0$$

$$B \quad x, 1/2, z$$

а



Параметры

ячейки:

$$a \neq b \neq c$$

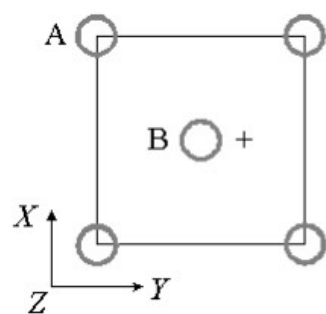
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Координаты атомов:

$$A \quad 0, 0, 0$$

$$B \quad 1/2, 1/2, z$$

б



Параметры ячейки:

$$a = b \neq c$$

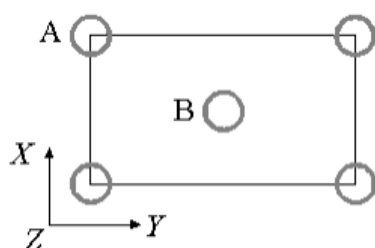
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Координаты атомов:

$$A \quad 0, 0, 0$$

$$B \quad 1/2, 1/2, z$$

В



Параметры

ячейки:

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

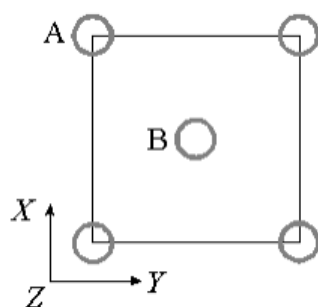
Координаты

атомов:

$$A \quad 0, 0, 0$$

$$B \quad 1/2, 1/2, 0$$

Г



Параметры ячейки:

$$a = b \neq c$$

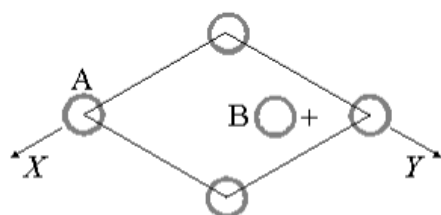
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

Координаты атомов:

$$A \quad 0, 0, 0$$

$$B \quad 1/2, 1/2, 0$$

Д



Параметры ячейки:

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

$$\gamma = 120^\circ$$

Координаты атомов:

$$A \quad 0, 0, 0$$

$$B \quad 1/3, 2/3, z$$

е

Семинар 11. Типы химической связи в кристаллах. Характер кристаллической структуры

1. Типы химической связи в кристаллах.
2. Ионная модель кристалла и энергия решетки. Уравнение Борна-Ланде и Борна – Майера. Цикл Борна – Габера.
3. Ковалентные кристаллы. Правило Юм-Розери.
4. Молекулярные кристаллы.
5. Металлические кристаллы.
6. Характер кристаллической структуры. Гомо- и гетеродесмичные структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры.

Вопросы и задания

1. Как суммируется электростатическая энергия взаимодействия между ионами в кристалле? Что такое константа Маделунга, от чего она зависит и что она характеризует?
2. Запишите цикл Борна – Габера для экспериментального определения энергии решетки.
3. В чем заключается структурное различие кристаллов с ковалентной и ионной связью? Дайте определение правила Юм – Розери и несколько примеров структур для его иллюстрации.
4. Почему кремний и германий имеют только одну кристаллическую структуру типа алмаза, а углерод широко представлен двумя модификациями – структурами алмаза и графита? Какова причина резкого различия свойств этих двух модификаций.
5. В результате каких электронных взаимодействий возникает ван-дерваальсова связь, в каких кристаллах она определяет их структуру и какую? Присутствует ли она в других веществах?
6. Какие характеристики различных типов химической связи в кристаллах являются общими, а какие отличают их друг от друга? Имеются ли различия в физических свойствах основных типов кристаллов и какие?
7. Приведите примеры кристаллов, в которых атомы связаны одновременно с помощью нескольких различных типов химической связи.
8. Как можно разделить структуры по мотиву?

Семинар 12. Описание кристаллических структур в терминах плотнейших шаровых упаковок

1. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ).
2. Координационные числа и пустоты в ПШУ.
3. Симметрия ПШУ.

Вопросы и задания

1. В чем различие кубической и гексагональной плотнейшей упаковки? Чему равен коэффициент заполнения пространства у обеих упаковок?
2. Объясните, почему для обозначения плотнейшей упаковки любой сложности достаточно использовать всего три буквы – А, В, С.
3. Определите базис ячейки и координационное число (число ближайших соседей, окружающих каждый шар) в двухслойной упаковке.
4. Структура соединения АВ характеризуется кубической элементарной ячейкой. Базис структуры этого соединения: А: 000, 1/21/20, 01/21/2, 1/201/2; В: 01/20, 001/2, 1/200, 1/21/21/2. Определите тип ячейки Браве, координацию атомов А атомами В и атомов В атомами А.

ФЕДЕРАЦИИ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

по организации и проведению самостоятельной работы

по дисциплине «Кристаллохимия»

для направления подготовки 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) Органическая и медицинская химия

Ставрополь

2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

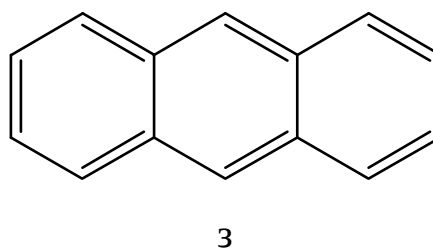
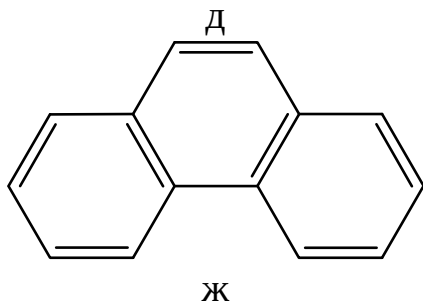
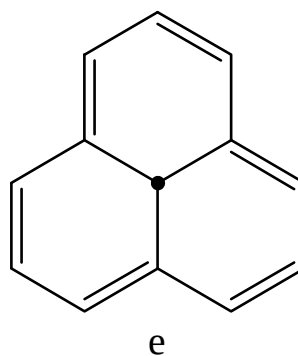
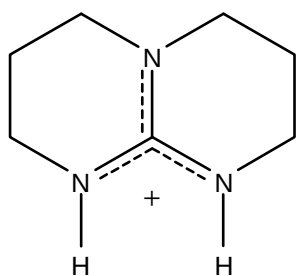
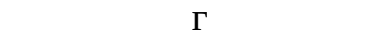
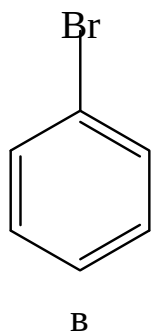
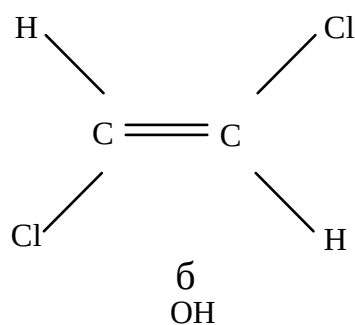
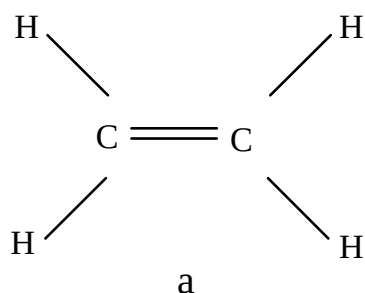
Основы учения о симметрии. Элементы симметрии.	
Взаимодействие элементов симметрии.	32
Классы симметрии кристаллов. Категории и сингонии	34
Обозначение классов симметрии по Шенфлису и Герману Могену..	36
Симметрия кристаллических структур. Типы решеток Бравэ	37
Пространственные (федоровские) группы симметрии.	38
Симметрия бесконечных одномерных цепей	39
Симметрия бесконечных двумерных слоев	41
Симметрия трехмерных бесконечных структур	43
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	47

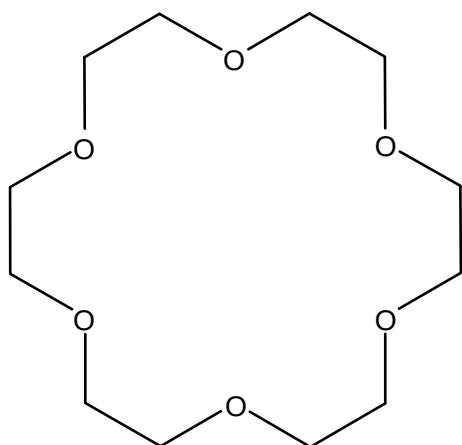
ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Основы учения о симметрии. Элементы симметрии.

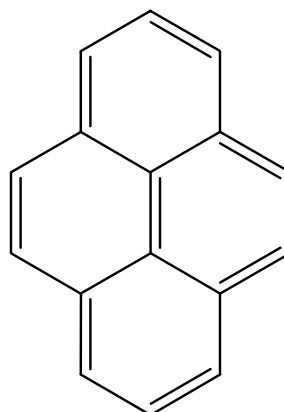
Взаимодействие элементов симметрии

1. Определите элементы симметрии плоских молекул, покажите их на рисунке, запишите в символике Бравэ:



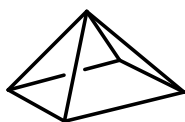


и

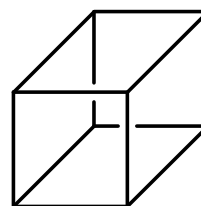


к

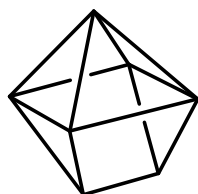
2. Определите элементы симметрии плоских фигур, покажите их на рисунке, запишите в символика Бравэ:



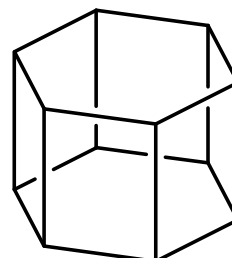
а



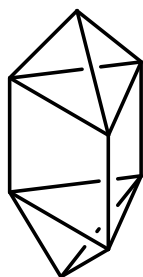
б



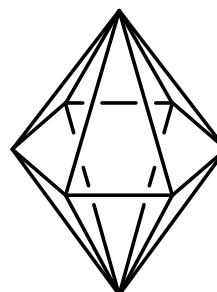
в



г



д



е

3. Определите элементы симметрии многогранников, покажите их на рисунке, запишите в символика Бравэ:

тригональная пирамида;

тригональная призма;

тетрагональный тетраэдр (тетраэдр, грани которого равнобедренные треугольники);

ромбоэдр (параллелепипед, грани которого равные ромбы).

4. Выведите точечные группы симметрии и запишите их символы:

повороты вокруг двух осей второго порядка, составляющих друг с другом угол 60° ;

отражение в плоскости симметрии и поворот вокруг оси второго порядка, составляющей с ней угол 45° ;

последовательные отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 30° ;

последовательные повороты вокруг взаимно перпендикулярных осей четвертого и второго порядка и отражение в центре инверсии;

последовательные отражения в трех плоскостях симметрии, две из которых пересекаются под углом 30° , а третья им перпендикулярна.

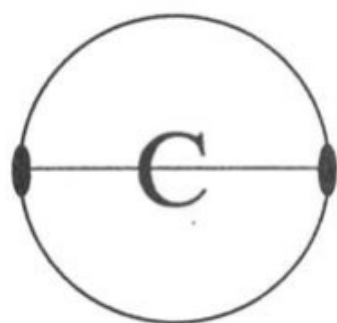
Классы симметрии кристаллов. Категории и сингонии

1. Какой класс симметрии возникнет, если к исходному классу добавить новый элемент симметрии (см. таблицу)? К какой сингонии будет относиться полученный класс? Нарисуйте его проекцию.

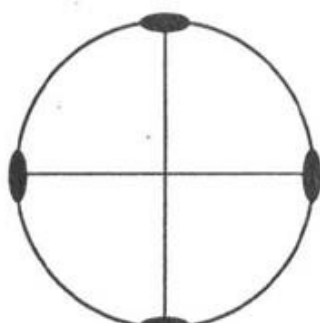
№	Исходный класс	Новый элемент симметрии
1	L_6L_2	Горизонтальная плоскость Р
2	$3L_23PC$	Вертикальная плоскость под углом 30° к исходным плоскостям
3	$3L_2$	Вертикальная плоскость под углом 45° к осям второго порядка L_{2x} и L_{2y}
4	L_33L_2	Центр симметрии

2. Покажите на проекции полную стереографическую проекцию элементов симметрии точечных групп, возникающих при взаимодей-

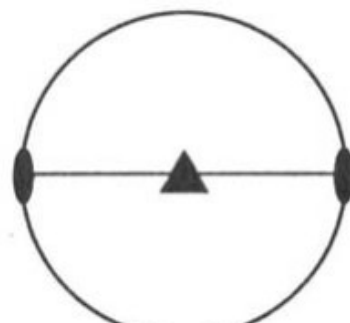
ствии симметрических операций, заданных указанными на проекции элементами симметрии:



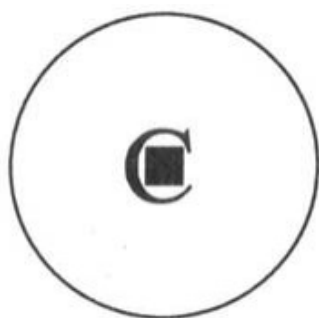
а



б



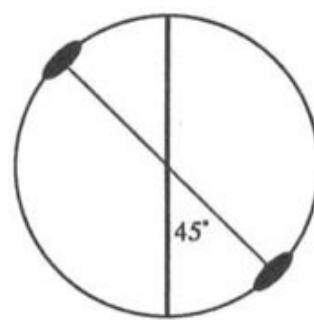
в



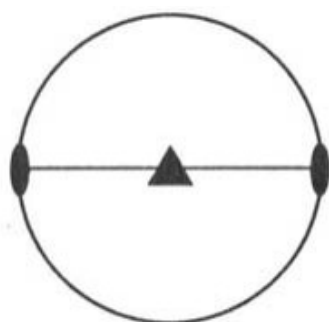
г



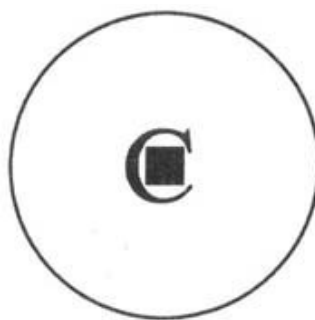
д



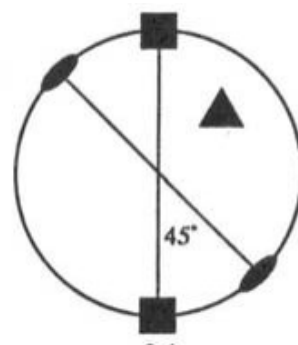
е



ж



з



и

Обозначение классов симметрии по Шенфлису и Германи – Могену

1. Записать символами Шенфлиса и Германа – Могена точечные группы, заданные кристаллографической формулой (символикой Бравэ), назовите категорию и сингонию точечной группы:

$3L_2$;
 L_33P ;
 L_44L_25PC ;
 L_33L_2 ;
 L_63L_23P ;
 L_66L_2 ;
 $3L_24L_36P$;
 $3L_44L_36L_29PC$.

2. Запишите символы Германа – Могена точечных групп, заданных символами Шенфлиса, назовите категорию и сингонию точечной группы:

C_{4v} ;
 D_{6h} ;
 C_{4h}
 T_d ;
 O ;
 D_3 ;
 D_{3d} ;
 C_{3h} ;
 S_4 .

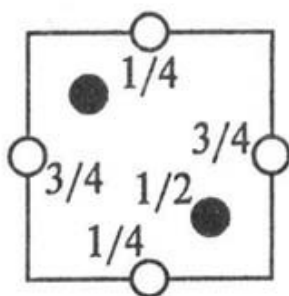
3. Запишите символы Бравэ и Шенфлиса точечных групп, заданных символами Германа – Могена, назовите категорию и сингонию точечной группы:

1 ;
 222 ;
 mmm ;
 $\bar{m}m$;
 $3m2$;
 $62m$;
 $3m$;

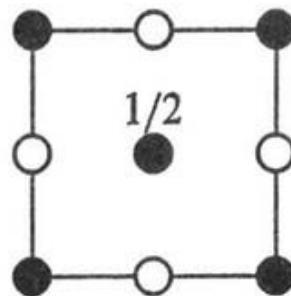
$\bar{3}$
 $2\bar{3}$;
 $43m$.

Симметрия кристаллических структур. Типы решеток Бравэ

1. Изобразите на чертеже плоскости с индексами (121), (013), (201), (120), (001), (200), (030), (112).
2. Определите тип решеток Бравэ тетрагональных кристаллов:

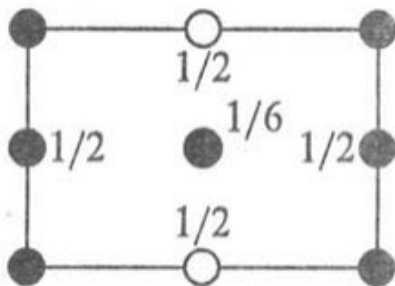


а

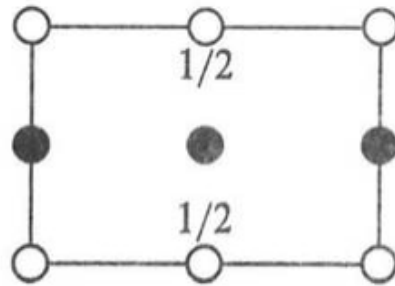


б

3. Определите тип решеток Бравэ ромбических кристаллов:

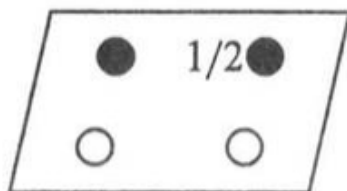


а

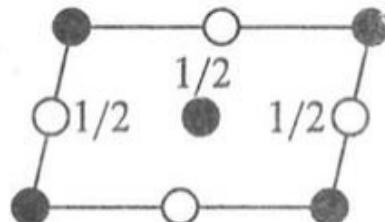


б

4. Определите тип решеток Бравэ моноклинных кристаллов:

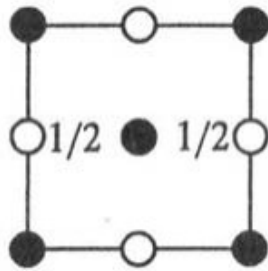


а

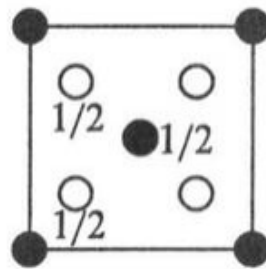


б

5. Определите тип решеток Бравэ кубических кристаллов:

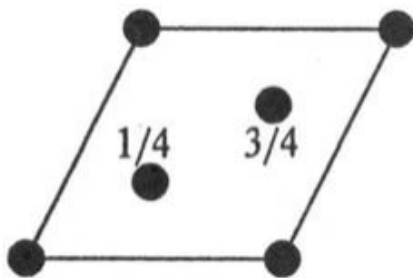


а

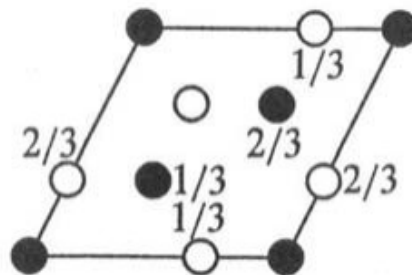


б

6. Определите тип решеток Бравэ гексагональных кристаллов:



а



б

Пространственные (федоровские) группы симметрии

1. Установите категории и сингонии, к которым принадлежат следующие пространственные группы, объясните все обозначения:

$P \bar{3}$;

$I222$;

$C_{mm}2$;

$C \bar{3}$;

$P \bar{4}mm$;

$P4bm$;

$P31m$;

$F42m$;

$I43d$.

2. Дополните символ пространственной группы пропущенными элементами симметрии:

$P \bar{?} m$;

$P6 \ 2?$;

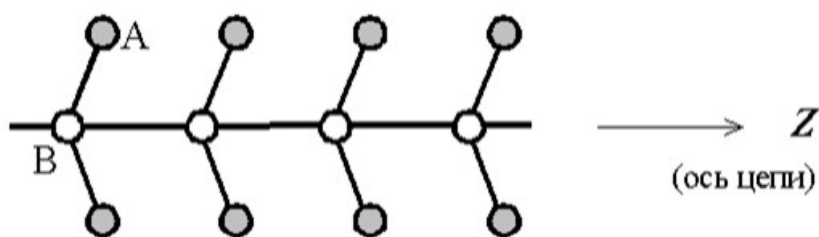
$P \ \overrightarrow{2}$;

$P4 \ 2?$;

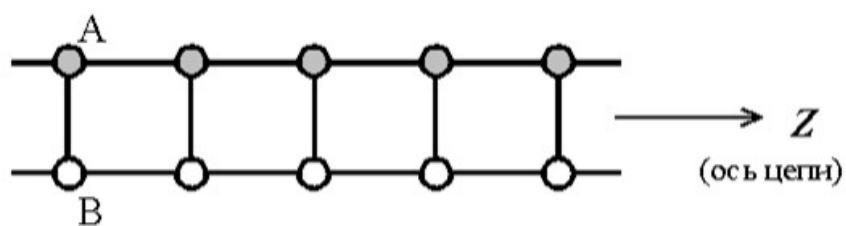
$Fm? \ m.$

Симметрия бесконечных одномерных цепей

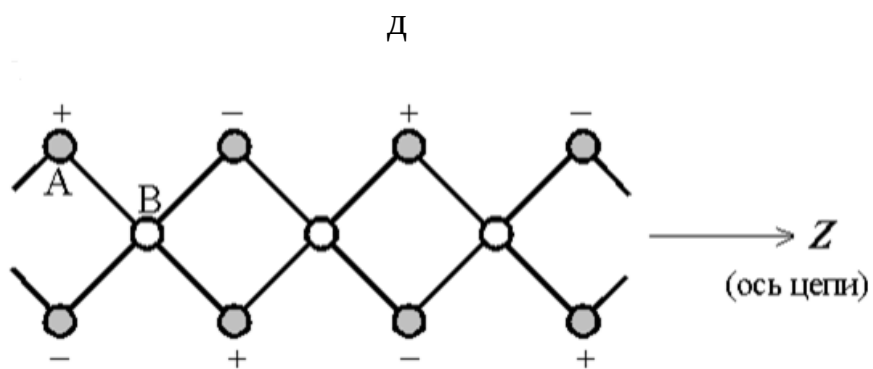
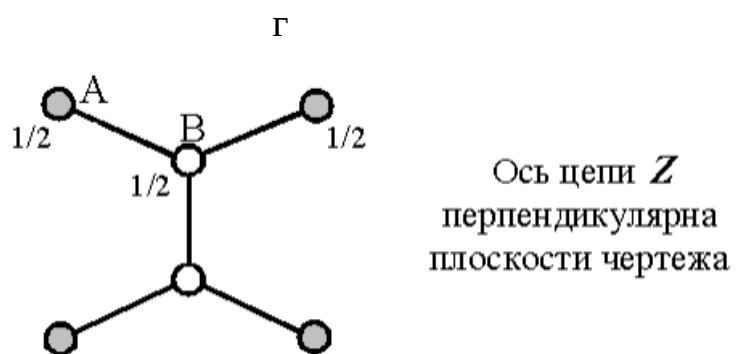
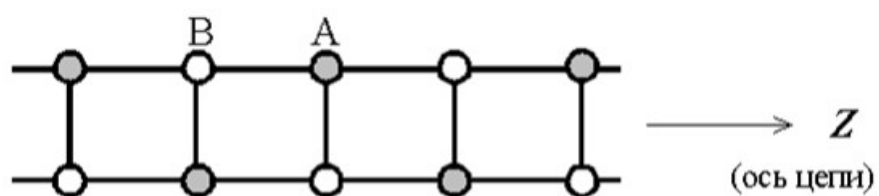
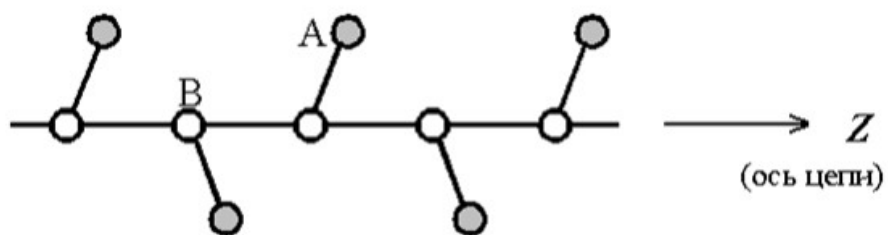
1. Запишите структурный класс цепей, проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



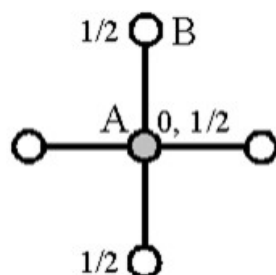
а



б

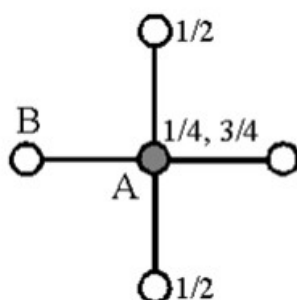


е



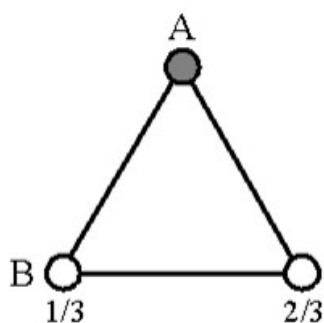
Ось цепи Z
перпендикулярна
плоскости чертежа

Ж



Ось цепи Z
перпендикулярна
плоскости чертежа

З

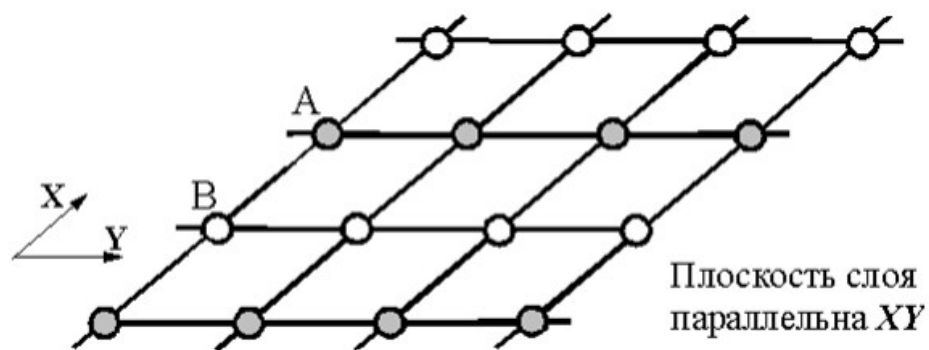


Ось цепи Z
перпендикулярна
плоскости чертежа

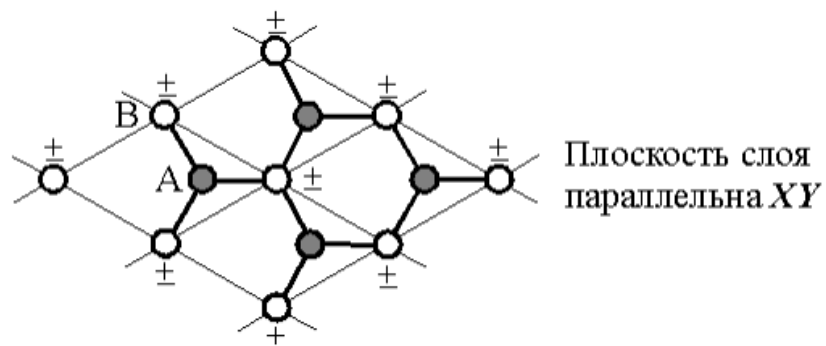
И

Симметрия бесконечных двухмерных слоев

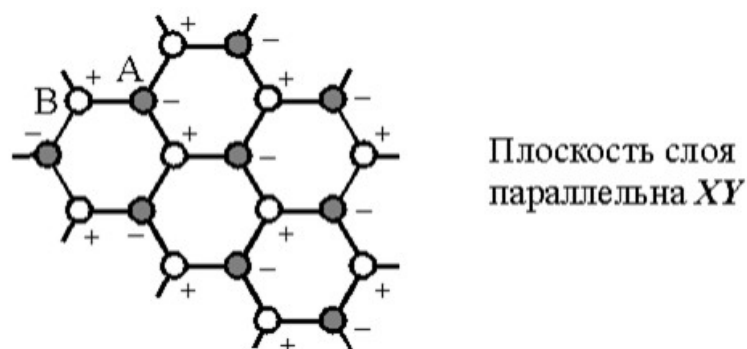
1. Запишите структурный класс слоев, проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



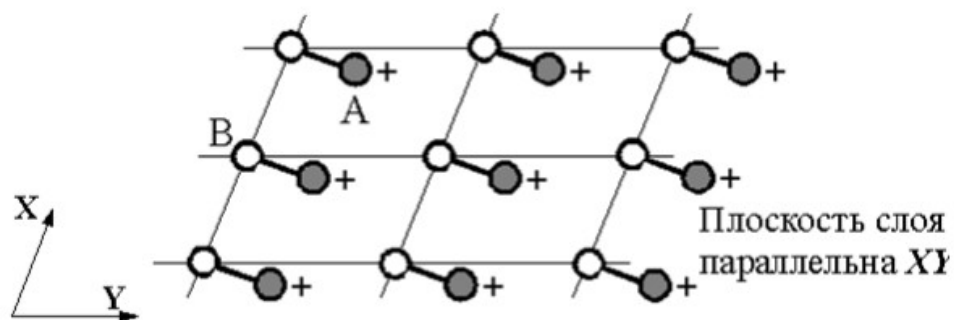
а



б



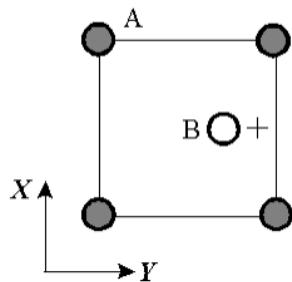
в



г

Симметрия трехмерных бесконечных структур

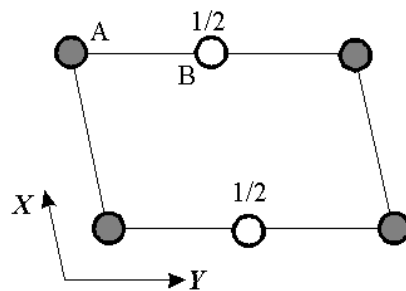
1. Запишите структурный класс трехмерных структур, проекции которых показаны на рисунках. Во всех случаях рассмотрите два варианта: А и В – атомы разных элементов, А и В – атомы одного элемента. Обоснованием решения является изображение расположения важнейших элементов симметрии на фоне расположения атомов.



Параметры
ячейки:
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Координаты
атомов:
А 0, 0, 0
В 1/2, y, z

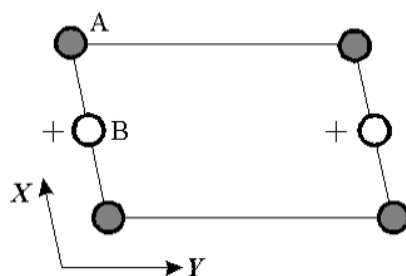
а



Параметры
ячейки:
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma \neq 90^\circ$

Координаты
атомов:
А 0, 0, 0
В 0, 1/2, 1/2

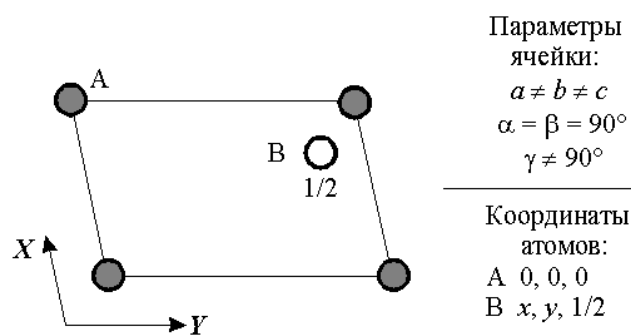
б



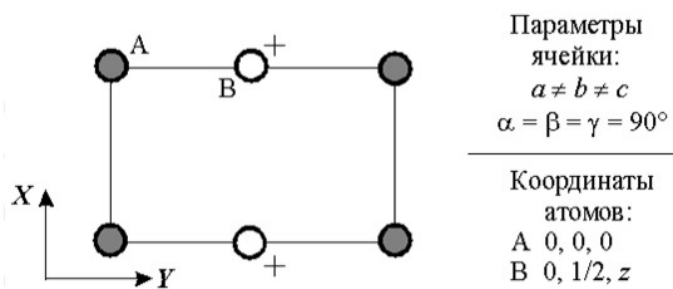
Параметры
ячейки:
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma \neq 90^\circ$

Координаты
атомов:
А 0, 0, 0
В 1/2, 0, z

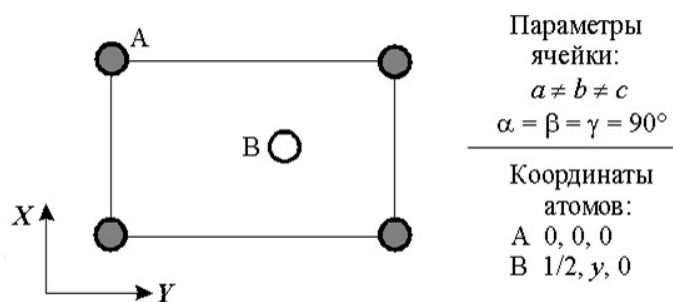
в



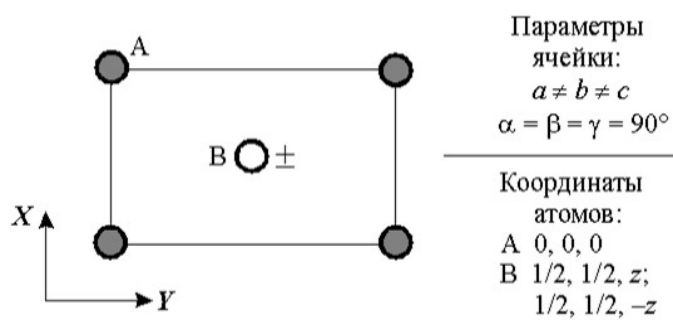
Г



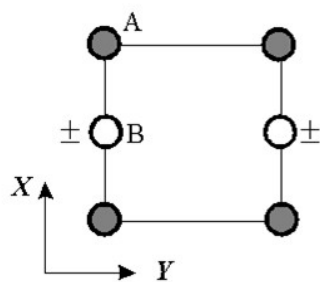
Д



е



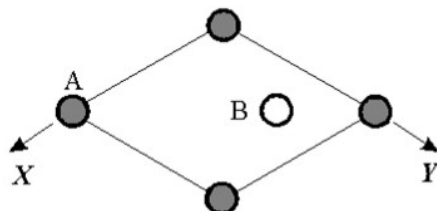
Ж



Параметры
ячейки:
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Координаты
атомов:
A 0, 0, 0
B $1/2, 0, z$;
 $1/2, 0, -z$

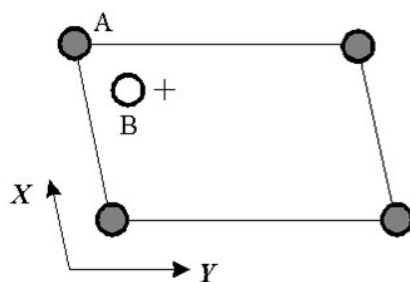
З



Параметры
ячейки:
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$

Координаты
атомов:
A 0, 0, 0
B $1/3, 2/3, 0$

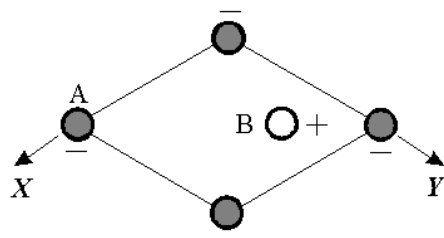
И



Параметры
ячейки:
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma \neq 90^\circ$

Координаты
атомов:
A 0, 0, 0
B x, y, z

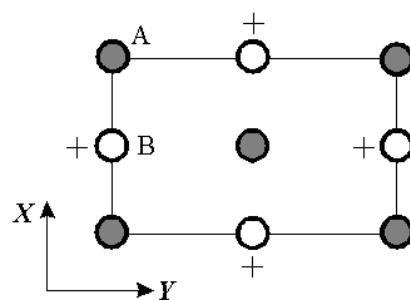
К



Параметры
ячейки:
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$

Координаты
атомов:
A 0, 0, $-z$
B $1/3, 2/3, z$

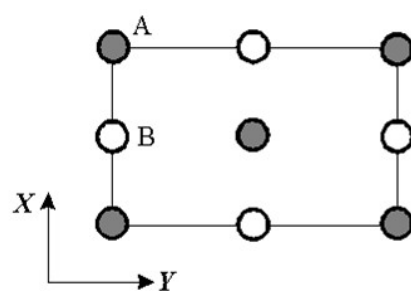
Л



Параметры
ячейки:
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Координаты
атомов:
A 0, 0, 0;
1/2, 1/2, 0
B 1/2, 0, z;
0, 1/2, z

М



Параметры
ячейки:
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Координаты
атомов:
A 0, 0, 0;
1/2, 1/2, 0
B 1/2, 0, 0;
0, 1/2, 0

Н

ЛИТЕРАТУРА

1. Головачев В. П., Сафьянов Ю. Н., Чупрунов Е. В. и др. Задачи по кристаллографии. / Под ред. Е. В. Чупрунова, В. Ф. Хохлова. М.: ИФМЛ, 2003. 208 с.
2. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия. М.: КДУ, 2005. 592 с.
3. Еремин Н. Н., Еремина Т. А. Занимательная кристаллография. М.: МЦНМО, 2013. 150 с.
4. Мюллер У. Структурная неорганическая химия. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. 352 с.
5. Урусов В. С., Ерёмин Н. Н. Кристаллохимия. Краткий курс. М.: МГУ, 2010. 256 с.
6. Учебные материалы для курса «Кристаллохимия» для студентов МГУ. URL: <http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/welcome-crychem.html>