

ОБ УПАКОВОЧНЫХ СВОЙСТВАХ ПСТ ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИНГОНИИ

Научный руководитель – Чупрунов Евгений Владимирович

Егорова Анастасия Юрьевна

Студент (магистр)

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний
Новгород, Россия

E-mail: Egorova.anastasiya.2001@mail.ru

До настоящего времени актуальна проблема описания структуры молекулярных кристаллов на основе принципа плотной упаковки составляющих кристалл молекул [1,2]. Одним из направлений решения этой задачи является исследование возможности размещения молекул соответствующей точечной симметрии по правильным системам точек (ПСТ) пространственных групп симметрии плотнейших упаковок шаров [3].

В докладе рассматриваются модификации двухслойной плотнейшей упаковки шаров в связи с возможностью расположения по беспараметрической ПСТ молекул с точечной симметрией не ниже D_{3h} .

Коэффициент упаковки k в этом случае находится из соотношения:

$$k = \frac{\mu \frac{4}{3} \pi r^3}{V},$$

где V - объем элементарной ячейки, μ - кратность беспараметрической ПСТ, по которой располагаются шары, r - радиус молекул.

При изменении радиуса r шаров упаковки и при условии взаимного касания шаров из разных плотноупакованных слоев ... АВАВ ... коэффициент заполнения пространства (коэффициент упаковки) k оказался немонотонной функцией радиуса шара. Аналогичную зависимость от r имеет зависимость отношения параметров c/a гексагональной элементарной ячейки (рис.1).

В докладе подробно анализируется геометрический и кристаллографический смысл таких зависимостей.

Для неплотнейших упаковок шаров исследование функциональной зависимости коэффициента упаковки k от параметров структуры применялись численные методы с кодом на языке Python.

Для гексагональных молекулярных кристаллов органических и элементоорганических соединений предлагаемые выводы иллюстрируются примерами и статистической информацией, полученной на основе Кембриджского Банка структурных данных.

При поддержке Программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Источники и литература

- 1) Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971. 424 с.
- 2) Урусов В.С. Как кристаллохимия предсказывает структуру и свойства кристаллов // Соросовский образовательный журнал. – 1997. – № 12. – С. 41-47
- 3) A. A. Pakuleva, N. V. Somov, and E. V. Chuprunov. Distribution of Molecular Crystals over Cubic Spatial Groups and the “Packing” Properties of Particular Regular Systems of Points // Crystallography Reports, 2023, Vol. 68, No. 7, pp. 12–18. DOI: 10.1134/S1063774523600680

Иллюстрации

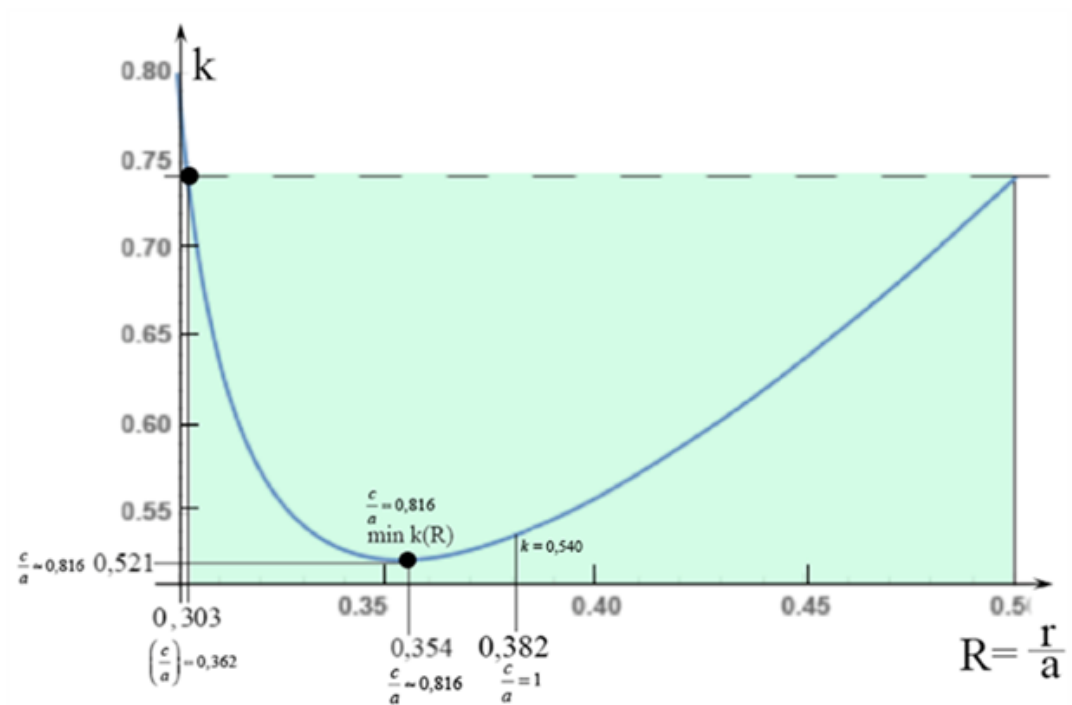


Рис. 1: график зависимости коэффициента упаковки от относительного радиуса шара для ПСТ группы $P6_3/mmc$