

Член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

О ПРОИЗВОДНЫХ СТРУКТУРАХ И ПРОИЗВОДНЫХ ГРУППАХ СИММЕТРИИ

В январском выпуске *Journal of Chemical Physics* Бюргер ⁽¹⁾ вводит понятия об основных и производных структурах, об основных и производных группах симметрии, но иллюстрирует эти понятия лишь очень малым числом примеров: сфалерит — халькопирит, станнин; вюрцит — энаргит; кальцит — доломит и совсем простые случаи с FeS_2 — FeAsS , PtS — CuO . Нет ни одного примера на представляющее-ся нам очень важным (по применениям) положение, что подчиненной к группе со скользящей плоскостью симметрии будет группа с утроенной трансляцией (и, конечно, с также утроенным компонентом скольжения — рис. 1). Следующие примеры заимствованы главным образом из книги автора ⁽²⁾ этой заметки, где они приводятся, однако, в совсем другом аспекте, но все иллюстрированы.

К структуре NiAs — FeS (пирротина-троилита) подчиненным будет тип CdJ_2 — $\text{Mg}(\text{OH})_2$, в котором сохраняются все анионы, но заселена только половина октаэдров против заселенного полного числа их в исходной структуре. Сохраняются вертикальные зеркальные плоскости симметрии, и объем ячейки производной структуры тот же, что и у исходной. Структура корунда также производная от структуры NiAs — FeS , но в ней сохраняются как раз лишь скользящие вертикальные плоскости, и потому высота ячейки у корунда-гематита в три раза больше, чем у NiAs .

В структуре корунда - гематита при полном числе анионов заселены катионами лишь две трети октаэдров. Структура кальцита является также производной от NiAs , с сохранением только скользящих плоскостей и с увеличением вертикального параметра в 3 раза, но заселены те одиночные октаэдры, которые пустуют в корунде, и наоборот. Атомы С располагаются в общих горизонтальных гранях каждой пары пустующих октаэдров.

К структуре корунда производной будет структура ильменита FeTiO_3 . В каждой паре заселенных октаэдров первого один катион Al заменяется на Fe и другой на Ti. Плоскости симметрии остаются теми же и габариты двух ячеек одинаковы.

Наиболее замечательный пример сохранения скользящей плоскости с утроением трансляции дают структуры рутила TiO_2 (касситерита

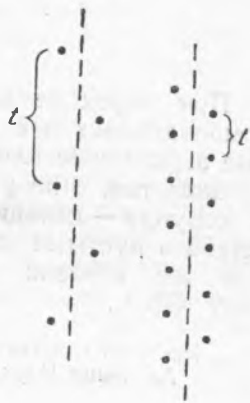


Рис. 1

SnO_2) и полирутилов $\text{Fe}(\text{Nb}, \text{Ta})_2\text{O}_6$. Вертикальные колонки из стоящих на ребре октаэдров и способ их сочленения одни и те же, но тогда как в рутиле все октаэдры заселены одними атомами Ti , в полирутилах чередуется пара $\text{Nb}(\text{Ta})$ с одним Fe , и утроение переноса скользщей плоскости особенно ярко выражено (рис. 2).

Все соображения, относящиеся к подчиненности структур, сохраняются, если октаэдры структуры рутила парами пустуют и заселены третьи. Такова (подчиненная к рутилу) структура соли Жерара $\text{PtCl}_4 \cdot 2\text{NH}_3$.

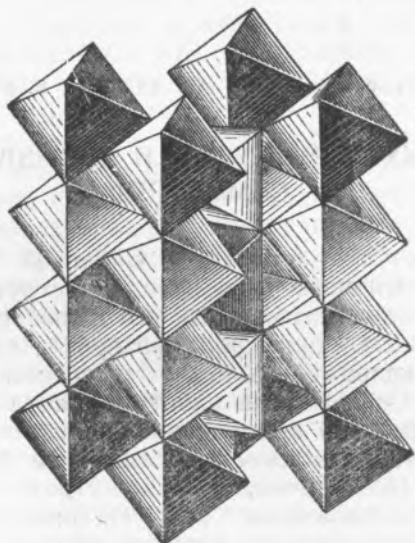


Рис. 2

При переходе от структуры $\text{NaCl}—\text{PbS}$ (рассматриваемой как ромбоэдрическая с вертикальной тройной осью) к NaCrS_2 вертикальные зеркальные плоскости симметрии сохраняются и период лишь удваивается, а не утраивается, как то было при переходах от FeS к корунду—кальциту. Если в октаэдрах $\text{NaCl}—\text{NaCrS}_2$ половину оставить пустыми (слоями, поочередно), то мы приходим к формально той же степени подчиненности хорошо известному слоистому типу CdCl_2 .

Институт кристаллографии
Академии Наук СССР

Поступило
22 VIII 1947

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ M. J. В u e r g e r, J. Chem. Phys., 15, 1—16 (1947). ² Н. В. Белов, Структура ионных кристаллов и металлических фаз, изд. АН СССР, 1947.