

Член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

## О ПРОИЗВОДНЫХ СТРУКТУРАХ И ПРОИЗВОДНЫХ ГРУППАХ СИММЕТРИИ

В январском выпуске *Journal of Chemical Physics* Бюргер <sup>(1)</sup> 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  $\text{FeS}_2$ — $\text{FeAsS}$ ,  $\text{PtS}$  —  $\text{CuO}$ . Нет ни одного примера на представляющее 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 <sup>(2)</sup> этой заметки, где они приводятся, однако, в совсем другом аспекте, но все иллюстрированы.

К структуре  $\text{NiAs}$  —  $\text{FeS}$  (пирротина-троилита) подчиненным будет тип  $\text{CdJ}_2$  —  $\text{Mg}(\text{OH})_2$ , 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  $\text{NiAs}$  —  $\text{FeS}$ , но в ней сохраняются как раз лишь скользящие вертикальные плоскости, и потому высота ячейки у корунда-гематита в три раза больше, чем у  $\text{NiAs}$ .

В структуре корунда - гематита при полном числе анионов заселены катионами лишь две трети октаэдров. Структура кальцита является также производной от  $\text{NiAs}$ , 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  $\text{FeTiO}_3$ . 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  $\text{TiO}_2$  (касситерита

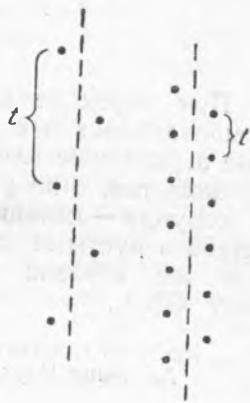


Рис. 1

$\text{SnO}_2$ ) 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 Nb (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  $\text{PtCl}_4 \cdot 2\text{NH}_3$ .

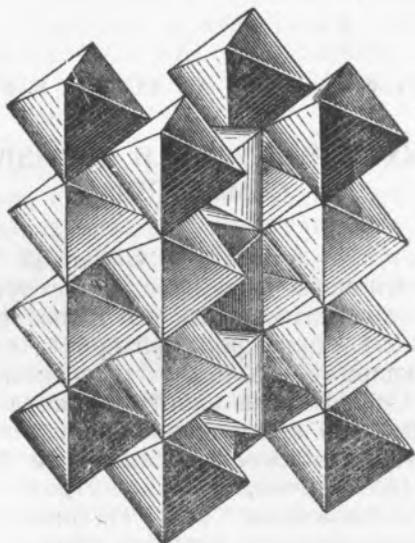


Рис. 2

При переходе от структуры  $\text{NaCl}—\text{PbS}$  (рассматриваемой как ромбоэдрическая с вертикальной тройной осью) к  $\text{NaCrS}_2$  вертикальные зеркальные плоскости симметрии сохраняются и период лишь удваивается, а не утраивается, как то было при переходах от  $\text{FeS}$  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  $\text{CdCl}_2$ .

Институт кристаллографии  
Академии Наук СССР

Поступило  
22 VIII 1947

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

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