

Симметричный анализ молекулярных кристаллов гексагональной и тригональной сингоний, содержащих молекулы с некристаллографической симметрией

Научный руководитель – Чупрунов Евгений Владимирович

Имаева Софья Павловна

Студент (магистр)

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

E-mail: imaevaposs@gmail.com

Хорошо известно, что структура бесконечных кристаллов описывается 230-ю пространственными группами симметрии. Это, однако, не означает, что симметрия конечных структурных фрагментов, которые образуют бесконечный кристалл, обязательно должны описываться кристаллографическими точечными группами симметрии. Кристаллы, которые образованы молекулами с некристаллографическими точечными группами симметрии (НС), могут рассматриваться как промежуточные между кристаллами и квазикристаллами.

Целью настоящей работы являлся систематический поиск и симметричный анализ молекулярных кристаллов гексагональной и тригональной сингоний, содержащих молекулы с НС, в Кембриджском банке структурных данных (CSD, версия 2023) [1], а также оценка возможности описания их структуры в терминах теории плотнейших упаковок.

Метод исследования основан на автоматизированном анализе точечной симметрии молекул с использованием специализированной компьютерной программы. Критерием НС являлось наличие у молекулы осей симметрии порядка 5, 7, 8, ... Молекула считается инвариантной относительно преобразования симметрии g , если максимальное расстояние между соответствующими атомами исходной и преобразованной операцией g моделей не превышало 0.1 Å. Для каждой молекулы выбиралась самая симметричная точка кристаллического пространства, в которой пересекаются элементы точечной симметрии молекулы - геометрический центр молекулы (ГЦМ). Множество таких точек рассматривается как правильная система точек (ПСТ) пространственной группы кристалла. Каждой точке PST ставится в соответствие точечная группа симметрии молекулы. Если PST совпадает с PST шаров одной из плотнейших упаковок, то считаем, что данная орбита может быть описана в терминах плотнейших упаковок.

В результате проведенного скрининга КБСД было обнаружено 1577 молекулярных кристаллов, содержащих молекулы с НС. Наиболее распространенными пространственными группами для таких кристаллов оказались $P-1$, $P2_1/n$ и $C2/c$, что является частью множества «групп Китайгородского». Для молекул с НС наиболее часто встречаются точечные группы 5, 5 m , 8 $m m$, $-10 m 2$, $10/m$, а также икосаэдрическая группа $m -3 -5$.

В результате анализа PST геометрических центров молекул выявлены 35 структур в 9 пространственных группах, которые можно описывать в терминах плотнейших упаковок.

Автор выражает благодарность профессору Н.В. Сомову за предоставление программного обеспечения для анализа симметрии молекул и полезные консультации.

Источники и литература

- 1) Cambridge Structural Database (CSD), Version 2023. <https://www.ccdc.cam.ac.uk/>