

Рассмотрим вопрос распространенности пространственных групп симметрии: одинаково ли часты все они в минералах и неорганических соединениях или встречаются такие, которые распространены гораздо больше других, а есть и такие, для которых нет примеров.

Для анализа данного весьма интересного вопроса в работах Н.В. Подберезской, Новосибирск, был проведен анализ структур на основе баз данных ICSD в 2006 году и доложен на чтениях, посвященных памяти акад. Н.В. Белова в Нижегородском университете. Материалы этого обширного доклада и будут представлены в данной лекции.

Прежде всего необходимо отметить, что выборка материала должна осуществляться разумно, поскольку при тотальном без анализа включении данных из базы, например, кубических соединений, получится завышенное нереальное число не отвечающее самим структурным типам, а лишь количеству определений в разных условиях и разными авторами.

Начнем рассмотрение с распределений по кристаллографическим системам

Распределение по системам симметрии **исследований** структур кристаллов неорганических соединений (НС) и минералов

• Триклинная	3894	777
• Моноклинная	16296	3419
• Ромбическая	19721	2712
• Тетрагональная	13820	1321
• Гексагональная	8558	1068
• Тригональная	8858	1621
• Кубическая	17917	3409

А теперь выделим количество представителей структур в кубических и триклинных группах симметрии по мере убывания распространенности, красным отмечены экстремальные – часто и редко встречающиеся группы.

Распределение результатов исследований структур по пространственным группам (кубическая – **НС 17917** и триклинная – **НС 3894** системы, минералов **3409** и **777**)

№ простр. группы	Символ простр. группы	Количество структур НС в целом	Количество структур минералов
<b>227<sup>a)</sup></b>	<b><i>Fd-3m</i></b>	<b>4307</b>	<b>1238</b>
<b>225<sup>a)</sup></b>	<b><i>Fm-3m</i></b>	<b>4885</b>	<b>479</b>
<b>2<sup>a)</sup></b>	<b><i>P-1</i></b>	<b>3594</b>	<b>417</b>
<b>230</b>	<b><i>Ia-3d</i></b>	<b>586</b>	<b>373</b>
<b>221<sup>a)</sup></b>	<b><i>Pm-3m</i></b>	<b>2671</b>	<b>304</b>

продолжение

218 <sup>b)</sup>	<i>P-43n</i>	280	167
203 <sup>a)</sup>	<i>Fd-3</i>	150	136
216 <sup>b)</sup>	<i>F-43m</i>	1008	125
205	<i>Pa-3</i>	488	122
217	<i>I-43m</i>	283	112



<b><i>1</i></b>	<b><i>P1</i></b>	<b><i>258</i></b>	<b><i>75</i></b>
<b><i>229</i></b> <sup>a)</sup>	<i>Im-3m</i>	620	62
198	<i>P2<sub>1</sub>3</i>	343	56
226	<i>Fm-3c</i>	91	28
206	<i>Ia-3</i>	249	26
220	<i>I-43d</i>	258	22
215	<i>P-43m</i>	133	22
197	<i>I23</i>	103	19
204	<i>Im-3</i>	301	17
224	<i>Pn-3m</i>	78	14
196	<i>F23</i>	27	13
223	<i>Pm-3n</i>	465	11
201	<i>Pn-3</i>	83	11
199	<i>I2<sub>1</sub>3</i>	64	11

продолжение

212	<i>P4<sub>3</sub>32</i>	107	9
219	<i>F-43c</i>	42	7
214	<i>I4<sub>1</sub>32</i>	24	6
213	<i>P4<sub>1</sub>32</i>	94	5
228	<i>Fd-3c</i>	23	5
195	<i>P23</i>	14	5
210	<i>F4<sub>1</sub>32</i>	7	3
211	<i>I432</i>	2	1

продолжение

200	<i>Pm-3</i>	72	0
202	<i>Fm-3</i>	44	0
208	<i>P4<sub>2</sub>32</i>	9	0
222	<i>Pn-3n</i>	3	0
209	<i>F432</i>	2	0
207	<i>P432</i>	1	0

Можно сделать вывод, что кубические кристаллы более распространены, чем триклинные. В ряде групп нет представителей минералов, а последняя осевая группа фактически не имеет представителей и в НС – единственный пример – теоретический вариант структуры.

Распределение исследований по  
пространственным группам в моноклинной  
системе

Номер группы	Символ группы	Общее количество данных	Данные по минерал
14	$P2_1/c$	6518	879
15	$C2/c$	3399	872
12	$C2/m$	3073	1013
11	$P2_1/m$	1058	205
4	$P2_1$	493	81
9	$Cc$	425	94
13	$P2/c$	413	78

Дирекция геологического института (ИВТ) ИРГО



продолжение

5	<i>C2</i>	297	68
8	<i>Cm</i>	226	59
7	<i>Pc</i>	212	26
<b>10</b>	<b><i>P2/m</i></b>	<b>116</b>	<b>28</b>
<b>3</b>	<b><i>P2</i></b>	<b>34</b>	<b>8</b>
<b>6</b>	<b><i>Pm</i></b>	<b>32</b>	<b>8</b>

Приоритетны centrosимметричные пр.гр. с динамическими элементами симметрии (по Н.В. Белову), вне конкуренции для синтетических соединений пр.гр.  $P2_1/c$ , для минералов – три первых группы сопоставимы по вероятности реализации. Также предпочтение у более высоких по симметрии групп.

Последние места за группой с поворотной осью и зеркальной плоскостью – совсем нет динамики

Ромбическая система (исследования) – **НС 19721, минералов** (в том числе) **2712** – рассмотрим ее подробно:

Номер группы	Символ группы	Общее количество данных	Данные по минерал
<b>62</b>	<b><i>Pnma</i></b>	<b>6532</b>	<b>1152</b>
<b>63</b>	<b><i>Cmcm</i></b>	<b>1733</b>	<b>167</b>
<b>47</b>	<b><i>Pmmm</i></b>	<b>940</b>	10
<b>61</b>	<b><i>Pbca</i></b>	<b>867</b>	<b>172</b>
33	<i>Pna2<sub>1</sub></i>	831	81
19	<i>P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></i>	672	64
64	<i>Cmca</i>	631	20

продолжение

71	<i>Immm</i>	569	32
58	<i>Pnmm</i>	524	125
55	<i>Pbam</i>	511	81
60	<i>Pbcn</i>	489	96
12	<i>Cmc2<sub>1</sub></i>	489	64
65	<i>Cmmm</i>	483	9
74	<i>Imma</i>	425	37
59	<i>Pmmn</i>	343	34
57	<i>Pbcm</i>	309	31
70	<i>Fddd</i>	286	33

продолжение

31	<i>Pmn2<sub>1</sub></i>	239	44
43	<i>Fdd2</i>	223	62
69	<i>Fmmm</i>	220	9
29	<i>Pca2<sub>1</sub></i>	219	37
22	<i>Ibam</i>	180	6
51	<i>Pmma</i>	162	11
66	<i>Cccm</i>	133	66
38	<i>Amm2</i>	126	6
52	<i>Pnna</i>	123	21
46	<i>Ima2</i>	121	24

продолжение

56	<i>Pccn</i>	117	17
20	<i>C222<sub>1</sub></i>	107	11
18	<i>P2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2</i>	103	26
44	<i>Imm2</i>	103	21
26	<i>Pmc2<sub>1</sub></i>	91	24
41	<i>Aba2</i>	82	12
40	<i>Ama2</i>	60	7
67	<i>Cmma</i>	59	9

продолжение

53	<i>Pmna</i>	56	13
42	<i>Fmm2</i>	54	1
54	<i>Pcca</i>	47	7
68	<i>Ccca</i>	39	8
34	<i>Pnn2</i>	37	9
25	<i>Pmm2</i>	37	7
39	<i>Abm2</i>	36	4
21	<i>C222</i>	34	3

продолжение

32	<i>Pba2</i>	30	4
73	<i>Ibca</i>	28	4
17	<i>P222<sub>1</sub></i>	26	1
22	<b><i>F222</i></b>	25	<b>0</b>
35	<i>Cmm2</i>	25	1
28	<i>Pma2</i>	24	9
50	<i>Pban</i>	19	4
30	<i>Pnc2</i>	18	3

продолжение

37	<i>Ccc2</i>	16	1
45	<i>Iba2</i>	14	1
23	<i>I222</i>	14	6
16	<i>P222</i>	12	2
48	<i>Pnnn</i>	<b>9</b>	<b>1</b>
49	<b><i>Pccm</i></b>	<b>6</b>	<b>0</b>
24	<i>I2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub></i>	<b>4</b>	<b>2</b>
27	<b><i>Pcc2</i></b>	<b>4</b>	<b>0</b>



## В ромбической системе

Лидирующие пр. гр. совпадают для НС и минералов.

Абсолютный лидер – ***Pnma***.

НС: Удивительно 3-е место пр.гр. ***Pmmm***; (1:2:3Y – 391)!!!  
более половины пр.гр. представительны (содержат более сотни записей); представлены все пр.гр.

В минералах :

нет представителей 3-х пр.гр.: 22 – ***F222***; 27 – ***Pcc2***;  
49 – ***Pcct***, в 5-ти пр.гр. по одному представителю

Осевые пр. гр.– мало представлены и в НС и в минералах.

Тетрагональная система: **НС** –  
 13820, **минералы** (в том числе) – 1321  
 (выборка наиболее интересных примеров)

Номер группы	Символ группы	Общее количество данных	Данные по минерал
<b>139</b>	<b><i>I4/mmm</i></b>	<b>3668</b>	33
<b>123</b>	<b><i>P4/mmm</i></b>	<b>1877</b>	23
<b>129</b>	<b><i>P4/nmm</i></b>	<b>1079</b>	53
140	<i>I4/mcm</i>	836	15
<b>136</b>	<b><i>P4<sub>2</sub>/mnm</i></b>	787	<b>205</b>
<b>141</b>	<b><i>I4<sub>1</sub>/amd</i></b>	757	<b>202</b>
127	<i>P4/mbm</i>	535	6

продолжение

130	<i>P4/ncc</i>	135	27
128	<i>P4/mnc</i>	134	16
85	<i>P4/n</i>	115	21
121	<i>I-42m</i>	113	19
135	<i>P4<sub>2</sub>/mbc</i>	86	20
86	<i>P4<sub>2</sub>/n</i>	84	20
107	<b><i>I4mm</i></b>	75	<b>0</b>
100	<i>P4bm</i>	69	9
114	<i>P-42<sub>1</sub>c</i>	66	3

продолжение

84	$P4_2/m$	33	2
83	<b><math>P4/m</math></b>	31	<b>0</b>
118	$P-4n2$	30	1
81	$P-4$	30	3
120	$I-4c2$	29	3
109	<b><math>I4_1md</math></b>	29	<b>0</b>
110	$I4_1cd$	26	4
117	$P-4b2$	22	3
75	<b><math>P4</math></b>	22	<b>0</b>
111	$P-42m$	21	2

продолжение

97	<i>I422</i>	6	1
103	<i>P4cc</i>	6	<b>0</b>
105	<i>P4<sub>2</sub>mc</i>	5	<b>0</b>
106	<i>P4<sub>2</sub>bc</i>	4	<b>0</b>
94	<i>P4<sub>2</sub>2<sub>1</sub>2</i>	4	<b>0</b>
89	<i>P422</i>	<b>3</b>	<b>0</b>
93	<i>P4<sub>2</sub>22</i>	<b>0</b>	<b>0</b>
101	<i>P4<sub>2</sub>cm</i>	<b>0</b>	<b>0</b>

В тетрагональной системе

НС: -Лидируют **высшие** по симметрии пр.гр. (1/2 всех)

- 20 пр.гр. представлены более, чем 100 работами

- 48 пр.гр. имеют менее 100

- Пр.гр. с **динамическими** элементами симметрии представлены слабее.

-Осевые пр.гр. представлены слабо-

- I-решетка более представительна в сравнении с P- (с тем же набором элементов симметрии).

-Не представлено 16 пр.гр. для минералов

-для НС две – № 93 –  $P4_222$  и №101-  $P4_2cm$

Гексагональная система – исследования **НС- 8558 (минералов 1068)**,  
 тригональная – **НС -8858 (минералов 1641 )**

Номер группы	Символ группы	Общее количество данных	Данные по минерал
194	<i><b><math>P6_3/mmc</math></b></i>	<b>2987</b>	<b>251</b>
166	<i><b><math>R-3m</math></b></i>	<b>2212</b>	<b>257</b>
191	<i><b><math>P6/mmm</math></b></i>	<b>1505</b>	31
167	<i><b><math>R-3c</math></b></i>	1485	<b>312</b>
148	<i><b><math>R-3</math></b></i>	1222	<b>266</b>
176	<i><math>P6_3/m</math></i>	959	244
164	<i><math>P-3m1</math></i>	930	137

продолжение

186	<i>P6<sub>3</sub>mc</i>	745	132
160	<i>R3m</i>	611	153
189	<i>P-62m</i>	548	14
173	<i>P6<sub>3</sub></i>	361	111
193	<i>P6<sub>3</sub>/mcm</i>	361	11
161	<i>R3c</i>	308	34
152	<i>P3<sub>1</sub>21</i>	291	104
156	<i>P3m1</i>	286	10
187	<i>P-6m2</i>	186	10
147	<i>P-3</i>	174	29



продолжение

150	<i>P321</i>	172	48
146	<i>R3</i>	155	22
192	<i>P6/mcc</i>	155	128
163	<i>P-31c</i>	138	10
165	<i>P-3c1</i>	138	38
182	<i>P6<sub>3</sub>22</i>	130	18
155	<i>R32</i>	126	23
185	<i>P6<sub>3</sub>cm</i>	119	14
159	<i>P31c</i>	117	21

продолжение

190	<i>P-62c</i>	113	28
174	<i>P-6</i>	112	11
154	<i>P3<sub>2</sub>21</i>	111	79
162	<i>P-31m</i>	102	10
180	<i>P6<sub>2</sub>22</i>	88	28
143	<i>P3</i>	71	24
144	<i>P3<sub>1</sub></i>	71	10
157	<i>P31m</i>	51	23
181	<i>P6<sub>4</sub>22</i>	32	18

продолжение

183	<i><b>P6<sub>mm</sub></b></i>	11	<b>0</b>
170	<i><b>P6<sub>5</sub></b></i>	10	<b>0</b>
179	<i>P6<sub>5</sub>22</i>	6	1
177	<i>P622</i>	4	3
171	<i><b>P6<sub>2</sub></b></i>	3	<b>0</b>
153	<i><b>P3<sub>2</sub>12</b></i>	<b>1</b>	<b>0</b>
168	<i><b>P6</b></i>	<b>1</b>	<b>0</b>
172	<i><b>P6<sub>4</sub></b></i>	<b>1</b>	<b>0</b>

## В гексагональной и тригональной системе

ВЫСОКОСИММЕТРИЧНЫЕ – наиболее представительны  
Осевые - опять в конце списка;  
В 5 группах свыше 1000,  
Следующие 5 пр.гр. – свыше 500,  
В 30 пр.гр. – свыше 100 записей,  
Около 4000 остается на 46-ть пр.гр.(по 10)  
В 9-ти - менее 10 в каждой.  
7 - в мире минералов не представлены .  
В 3 из них – по одному представителю НС.

## Общие выводы

- Пространственные группы – чемпионы исследований:
- ***Pnma*** - 6532, ***P2<sub>1</sub>/c*** - 6518
- Лидируют исследования высших по симметрии кристаллов
- В триклинной и моноклинной системах **НС и минералами** представлены **все** простр. группы.
- В ромбической, гексагональной и кубической системах **минералами не представлены 3, 7 и 6** простр. групп.
- Тетрагональная система - чемпион по количеству пустых пр. гр., т.е. **не имеющих** структурных представителей –
- **2+1(куб.)** для **НС** и **16** - для минералов.