

### Определение симметрии молекул в кристалле.

Научный руководитель – Чупрунов Евгений Владимирович

*Имаева Софья Павловна*

*Студент (бакалавр)*

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

*E-mail: imaevaposs@gmail.com*

Актуальной является задача определения точечной группы симметрии молекулы в молекулярном кристалле по координатам атомов, которые приведены в CIF-файле. В настоящей работе анализируются особенности максимумов синтезов Фурье с квадратами модулей структурных амплитуд в качестве коэффициентов.

Как известно, точечная аппроксимация таких синтезов Фурье представляет собой векторную систему, максимумы которой описывают экстремумы функции Патерсона.

Векторной системой называется совокупность всех векторов вида  $r_{ij} = r_i - r_j \rightarrow (U_{ij}, V_{ij}, W_{ij}) = (x_i - x_j, y_i - y_j, z_i - z_j)$ . Здесь  $i, j = 1, 2, \dots, n$  – номер атома в молекуле.

Для разных точечных элементов симметрии векторные системы могут содержать некоторые характерные значения, которые определяются только соответствующей циклической подгруппой, соответствующей данному элементу симметрии. Множество таких характерных максимумов функции Патерсона может в некоторых случаях делать заключение о точечной группе симметрии структурных единиц кристалла. В данной работе приводятся «патерсоновские портреты» точечных групп симметрии.

Например, для гипотетической молекулы с симметрией  $D_4$ , можно построить векторную систему отрезков и установить, что помимо начального максимума с координатами (000) характерными максимумами функции Патерсона будут являться независимо от координат конкретных атомов молекул  $(0, 2y, 2z)$ .

Все точки ВС можно разделить на четыре типа:

1) Точка с координатами (000). Нетрудно видеть, что таких точек в количестве  $n$  штук, где  $n$  – количество координат в векторной системе, соответственно, ВС будет содержать точку с координатами (000) кратности  $n$ .

2) Точка с координатами типа  $\pm(x \pm y)$  и  $\pm(y \pm x)$ . Координаты этих точек определяются только координатами конкретных атомов конкретной молекулы.

3) Характерные пики с координатами  $\pm 2x, \pm 2y, 0$  и  $\pm 2y, \pm 2x, 0$ , которые характерны для оси второго порядка  $2_z$ . Можно пронормировать их кратность по отношению к точке (000).

4) Характерные пики с координатами  $(\pm 2x, 0, \pm 2z)$ ,  $(\pm 2y, 0, \pm 2z)$ ,  $(0, \pm 2x, \pm 2z)$  и  $(0, \pm 2y, \pm 2z)$ , характерные для оси четвертого порядка.

В докладе приводятся характерные значения координат максимумов свертки Фурье для всех точечных групп симметрии.

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

### Источники и литература

- 1) Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Основы кристаллографии: Учебник для вузов. – М.: Издательство Физико-математической литературы, 2004. – 500 с. – ISBN 5-94052-060-1.
- 2) Белов Н. В., Структурная кристаллография.
- 3) Порай-Кошиц М.А., Практический курс рентгеноструктурного анализа, М., 1960: Китайгородский А. И., Теория структурного анализа.