



**Лаборатория Неорганической Кристаллохимии  
Кафедра Неорганической Химии, Химический Факультет МГУ**

---

"Разные вопросы, имеющие отношение к  
индицированию"

version 1.5 @ 15.04.2011

---

**Москва 2011**

## Индексирование: постановка задачи

---

$$\frac{1}{d^2} = Ah^2 + Bk^2 + Cl^2 + Dhk + Ehl + Fkl$$

**Для набора линий с неизвестными  $hkl$  необходимо подобрать индексы**

Методы индексирования рентгенограмм

1. Аналитические (вручную)
2. Подбор изоструктурного соединения
3. Автоиндексирование (программы)
4. Метод гомологии

**Indexing is more an art than a science**  
**A. Le Bail**

# Искусственный пример: индцирование дифрактограммы «гипотетического кубического соединения»

примитивная  
кубическая решетка,  
 $a = 10\text{\AA}$

	$2\theta$	$d$	$Q$	$h$	$k$	$l$
1	8.8357	10.0000	100	1	0	0
2	12.5081	7.0711	200	1	1	0
3	15.3345	5.7735	300	1	1	1
4	17.7246	5.0000	400	2	0	0
5	19.8367	4.4721	500	2	1	0
6	21.752	4.0825	600	2	1	1
7	25.1684	3.5355	800	2	2	0
8	26.7225	3.3333	900	2	2	1
9	28.1971	3.1623	1000	3	1	0
10	29.604	3.0151	1100	3	1	1
11	30.9526	2.8868	1200	2	2	2
12	32.2502	2.7735	1300	3	2	0

# Средние сингонии

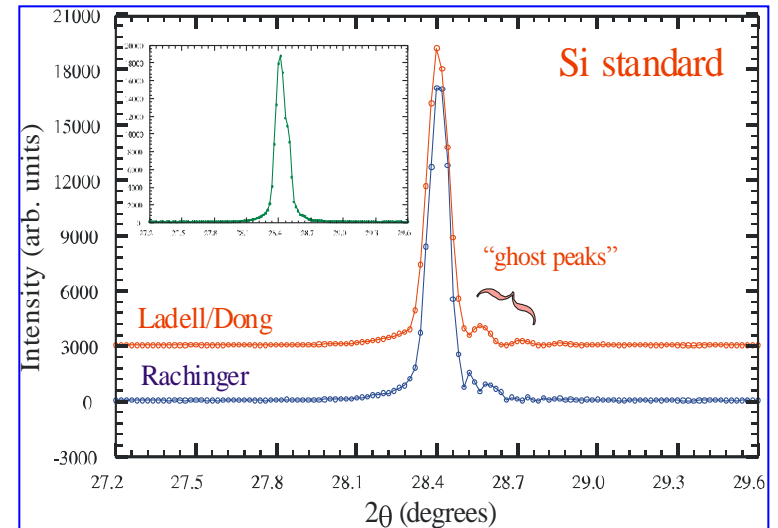
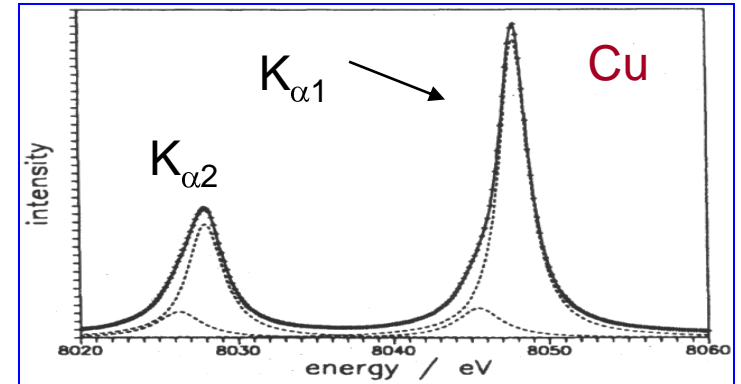
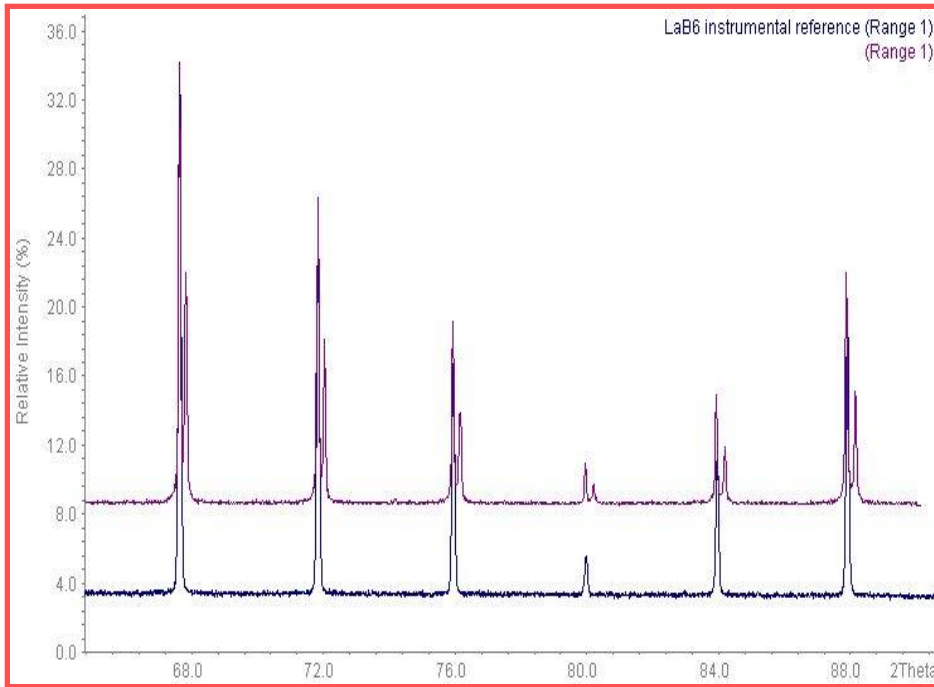
	D[X]	t[Y]	h[Y]	k[Y]	l[Y]	Q[Y]	A[Y]	B[Y]
1	8	11.051	0	0	1	156.25	-	1
2	4	22.206	0	0	2	625	-	4
3	3	29.757	1	0	0	1111.11111	1	-
4	2.80899	31.832	1	0	1	1267.35888	-	-
5	2.66667	33.58	0	0	3	1406.24648	-	8.99998
6	2.4	37.442	1	0	2	1736.11111	-	-
7	2.12132	42.584	1	1	0	2222.22294	2	-
8	2.05046	44.132	1	1	1	2378.46846	-	-
9	2	45.306	0	0	4	2500	-	16
10	1.99309	45.472	1	0	3	2517.36494	-	-
11	1.87409	48.539	1	1	2	2847.20746	-	-
12	1.6641	55.148	1	0	4	3611.11367	-	-
13	1.66011	55.292	1	1	3	3628.49283	-	-
14	1.6	57.559	0	0	5	3906.25	-	25
15	1.5	61.799	2	0	0	4444.44444	4	-
16	1.47431	62.998	2	0	1	4600.68371	-	-
17	1.45521	63.921	1	1	4	4722.24656	-	-
18	1.41176	66.135	1	0	5	5017.39456	-	-
19	1.40449	66.522	2	0	2	5069.47163	-	-
20	1.34164	70.08	2	1	0	5555.56207	5.00001	-
21	1.33333	70.581	0	0	6	5625.02813	-	36.00018
22	1.32316	71.206	2	1	1	5711.83	-	-
23	1.30736	72.201	2	0	3	5850.72403	-	-
24	1.27739	74.174	1	1	5	6128.48286	-	-
25	1.272	74.541	2	1	2	6180.53083	-	-
26	1.21842	78.427	1	0	6	6736.06023	-	-
27	1.2	79.87	2	0	4	6944.44444	-	-
28	1.1985	79.99	2	1	3	6961.83816	-	-
29	1.14286	84.755	0	0	7	7656.21172	-	48.99976
30	1.12887	86.058	1	1	6	7847.15329	-	-
31	1.11417	87.476	2	1	4	8055.5849	-	-
32	1.09431	89.484	2	0	5	8350.63044	-	-

Пример:  
 тетрагональная ячейка  
 $a = 3\text{\AA}$   
 $c = 8\text{\AA}$

два независимых ряда по Q  
 $(hk0) + (00l)$

# Напоминание о немонохроматичности...

“ $\alpha_2$ -stripping”:  
математическое «удаление второго пика»



# Напоминание о немонохроматичности...

альтернатива  $\alpha_2$ -stripping -  
профильный анализ как 2 компоненты

- например, Xfit / профиль FP.  
или WinXPow (с ограничениями)

**Background / Overall Parameters**

Max. order:  Function:  Tchebyshev  Power series

0. order	1. order	2. order	3. order	4. order
<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed

5. order	6. order	7. order	8. order	9. order
<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>
<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed	<input type="checkbox"/> Fixed

Add empirical background

Add Alpha2 Peaks Intensity ratio Alpha2:1   Fixed

Use Asymmetry

(H/L + S/L) / 2  Steps  H/L  Fixed  S/L  Fixed

H/L , S/L

# Напоминание: три основные сложности при индицировании

---

- 1) примеси
- 2) неточное определение положения пиков  
(систематические ошибки)
- 3) "dominant zone"



необходимо постараться минимизировать инструментальные ошибки, приводящие к сдвигу положения пиков (напр.,  $\cos(\theta) / \sin(2\theta)$  в Б-Б геометрии)

предпочтительно использование внутреннего стандарта (Si, Ge...)

необходимо корректное описание профиля («хорошая» профильная функция, асимметрия...)

# Типичные ошибки при индцировании

## Почему это важно?

очень легко проиндцировать рентгенограмму неправильно

- в более низкой симметрии
- с завышенными параметрами элементарной ячейки
- одну фазу как смесь и наоборот

Пример: автоиндцирование по алгоритму Wisser (Treor)  
эталона Si ( $a \sim 5.41 \text{ \AA}$ )

INDEX - User : File : si1CALC.pft

File View Index Refine Help

P W V L R ?

Number of solutions accepted :

	cubic	hexagonal	tetragonal	orthorhombic
	3	0	0	0

Nr	System	a	b	c	FOM	Unind.	Volume
1	Cubic	5.4109	5.4109	5.4109	221.3	0	158.4
2	Cubic	7.6522	7.6522	7.6522	115.3	0	448.1
3	Cubic	9.3720	9.3720	9.3720	79.0	0	823.2

F(7)

$a' = a \cdot \sqrt{2}$

$a' = a \cdot \sqrt{3}$



# Иллюстрация важности точного определения $\{d_i\}$

$$2\theta^{\text{exp}} = 2\theta^{\text{th}} + ZS + x_1 * \cos(\theta) + x_2 * \sin(2\theta)$$

Тот же самый массив данных - Si - стандарт ( $a \sim 5.41 \text{ \AA}$ )  
Заданы произвольные значения  $x_1 + x_2$

INDEX - User : File : qsierr1.pft

File View Index Refine Help

Number of solutions accepted :

cubic	hexagonal	tetragonal	orthorhombic
0	3	0	0

Nr	System	a	b	c	FOM	Unind.	Volume
1	Hexag	6.8276	6.8276	14.6431	10.5	0	591.2
2	Hexag	10.0947	10.0947	13.3153	11.3	0	1175.1
3	Hexag	10.7808	10.7808	6.6225	9.8	0	666.6

# Иллюстрация важности точного определения $\{d_i\}$ : продолжение

$$2\theta^{\text{exp}} = 2\theta^{\text{th}} + ZS + x_1 * \cos(\theta) + x_2 * \sin(2\theta)$$

```
Symmetry      : Cubic P
Initial cell parameters :
Cell_A       : 5.4110

Refined cell parameters :
Cell_A       : 5.4124(5)
Cell_Volume  : 158.55(3)

Number of single indexed lines : 7
Number of unindexed lines      : 0
```

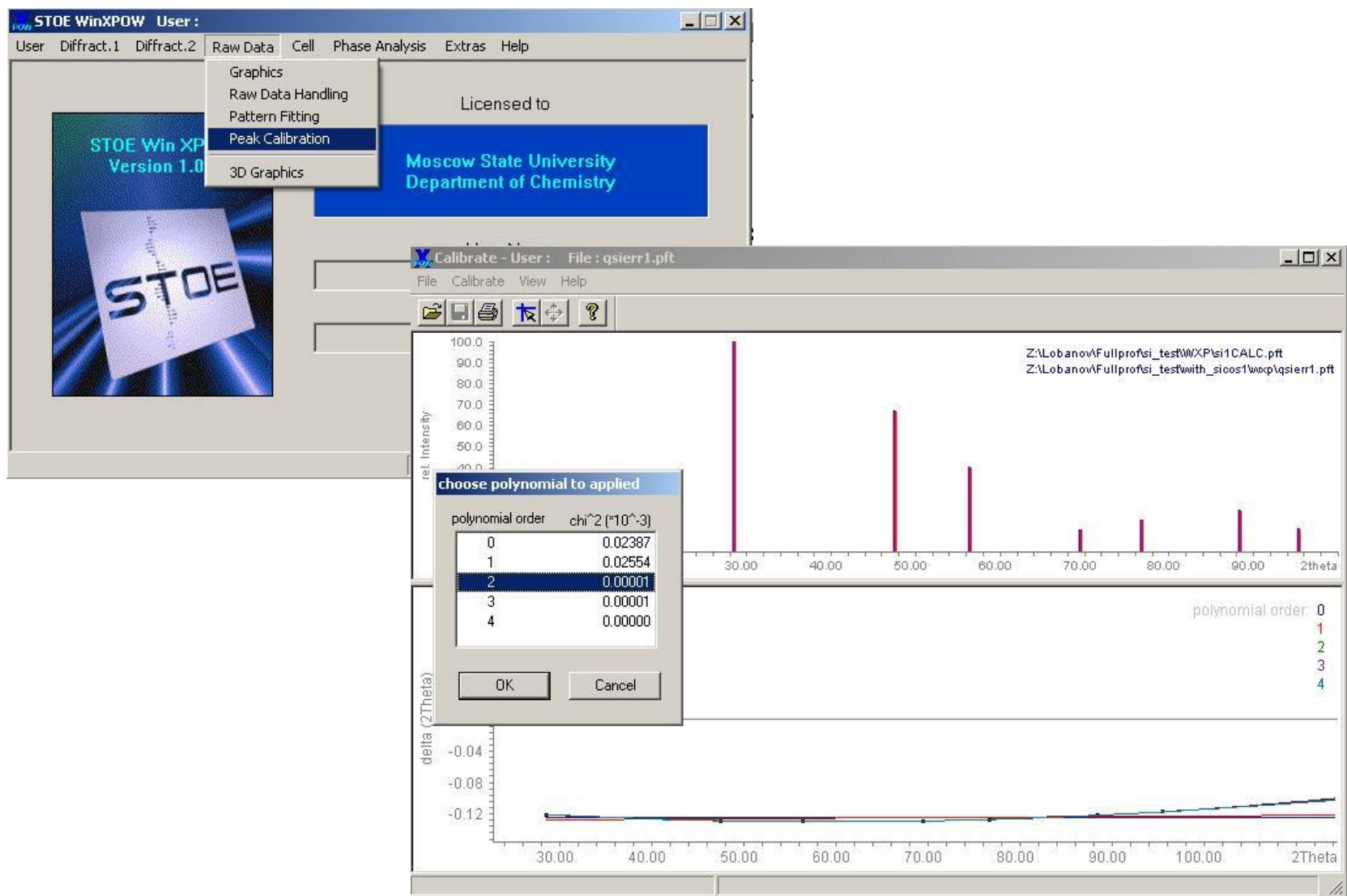
```
2Theta zeropoint : 0.150(8)
```

```
Final 2Theta window : 0.0200
```

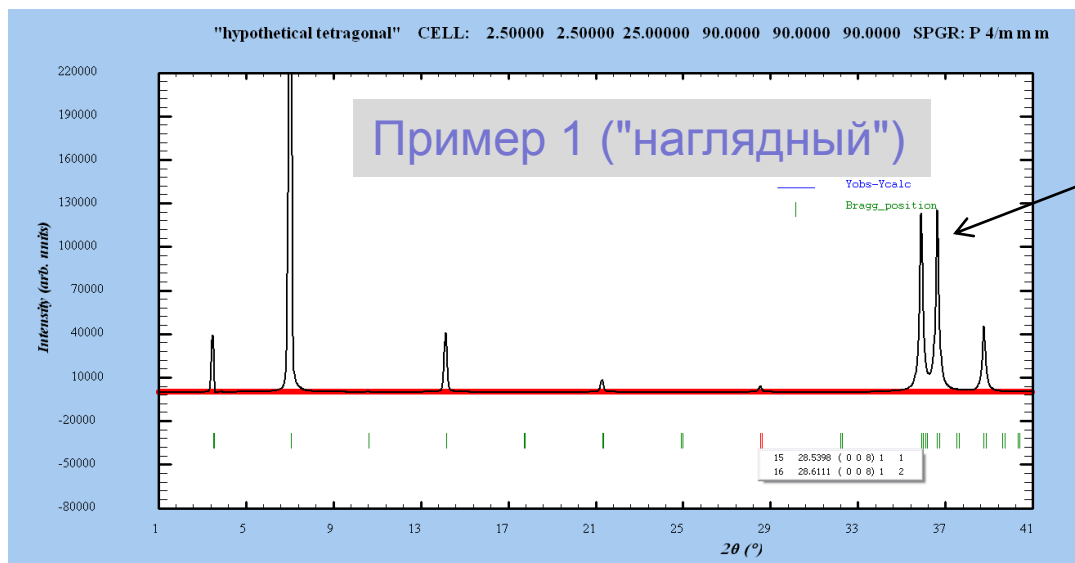
N	2Th[obs]	H	K	L	2Th[calc]	obs-calc	Int.	d[obs]	d[calc]
1	28.531	1	1	1	28.542	-0.0107	100.0	3.1260	3.1249
2	47.479	2	2	0	47.475	0.0044	66.8	1.9134	1.9136
3	56.338	3	1	1	56.332	0.0059	39.8	1.6317	1.6319
4	69.406	4	0	0	69.401	0.0053	10.3	1.3530	1.3531
5	76.688	3	3	1	76.685	0.0032	15.0	1.2416	1.2417
6	88.408	4	2	2	88.410	-0.0018	19.5	1.1048	1.1048
7	95.375	5	1	1	95.381	-0.0061	10.6	1.0417	1.0416

**большинство программ  
поддерживает опцию уточнения  
«сдвига нуля»,  
но мы не знаем его величину до  
индексирования,  
БЕЗ ВНУТРЕННЕГО СТАНДАРТА**

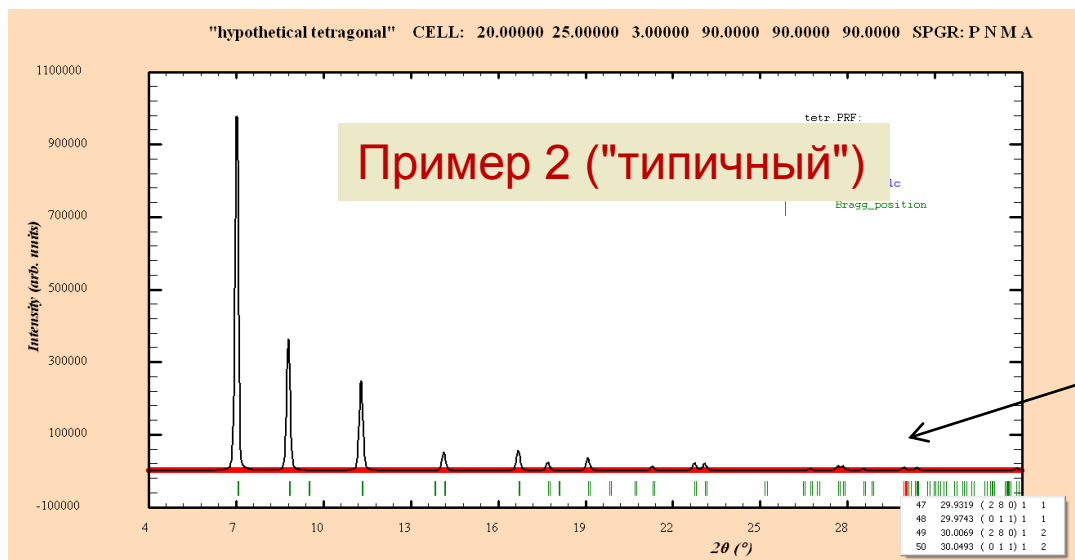
# Метод внутреннего стандарта в WinXPow



# Проблема "dominant zone"



первый рефлекс с (hk)-компонентой - (100)



дополнительно Pnma: 00l: l=2n

первый рефлекс с l-компонентой (011)

# Проблема неоднозначного выбора ЭЯ (geometrical ambiguities)

---

Напомним:

гексагональная сингония

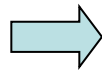
$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2 + k^2 + hk}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

ромбическая сингония

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

частный случай:

$$\begin{aligned} a_o &= a_h/2 \\ b_o &= a_h \sqrt{3}/2 \\ c_o &= c_h \end{aligned}$$



$$1/d^2 = 4h_o^2/a_h^2 + 4k_o^2/3a_h^2 + l^2/c^2$$

$$h' = h+k$$

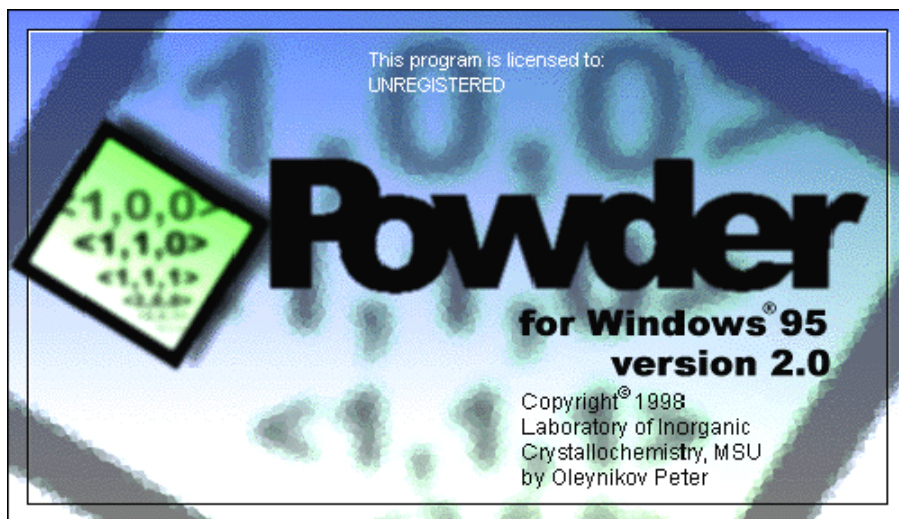
$$k' = h-k$$

$$1/d^2 = 4/3a_h^2 (h'^2 + h'k' + k'^2) + l^2/c^2$$

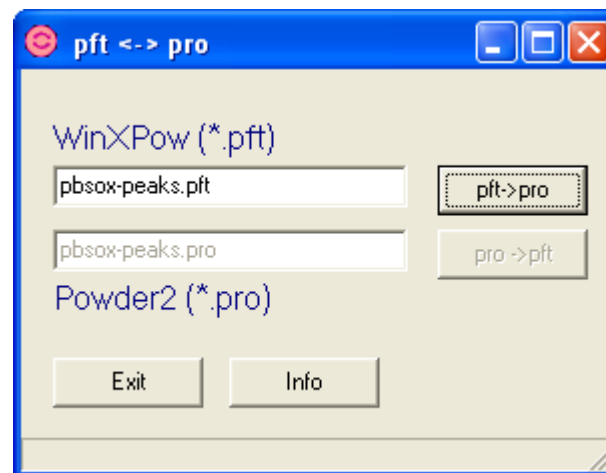
# уточнение параметров ЭЯ: практика

существует огромное количество программ для уточнения параметров ЭЯ

***очень удобная программа «для целей обучения-понимания»  
«Powder 2» (П.Н. Олейников)  
- не поддерживает «zero shift»***

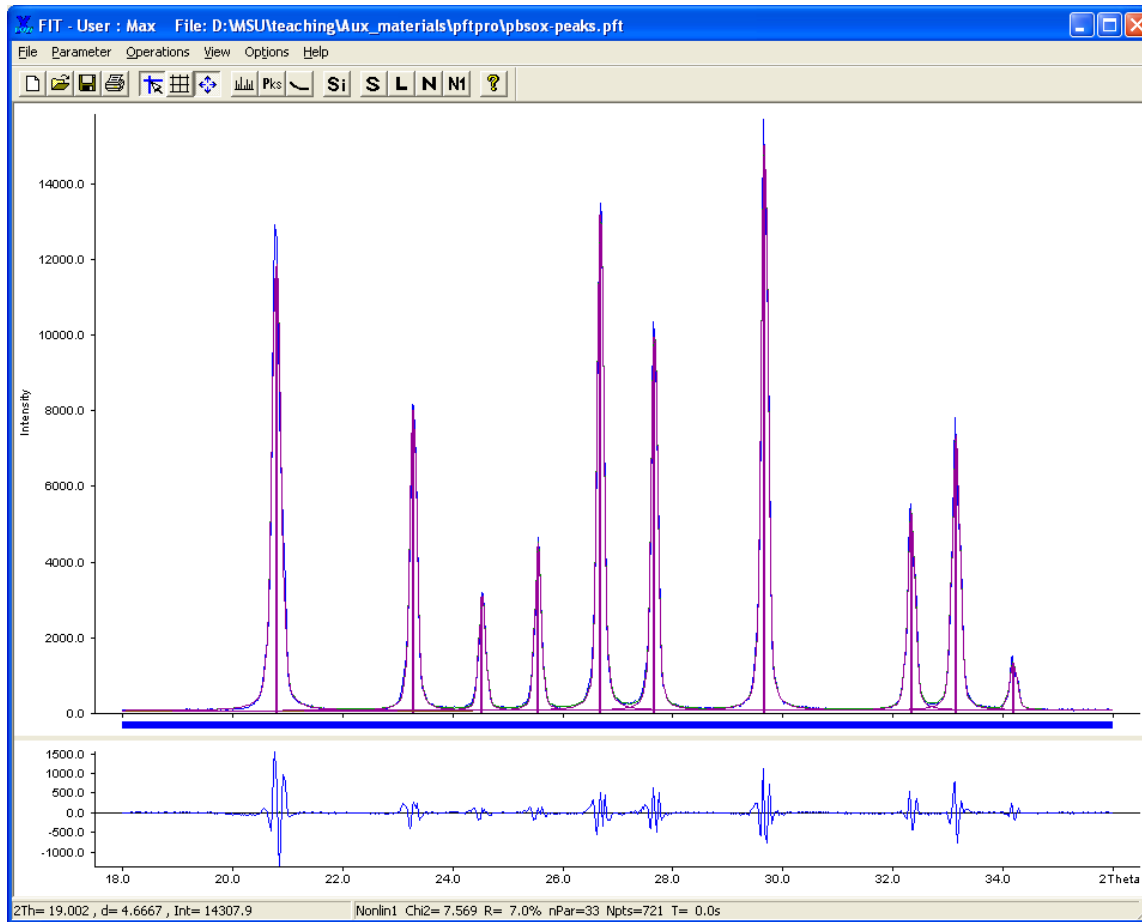


конвертер  
WinXPow -> Powder2



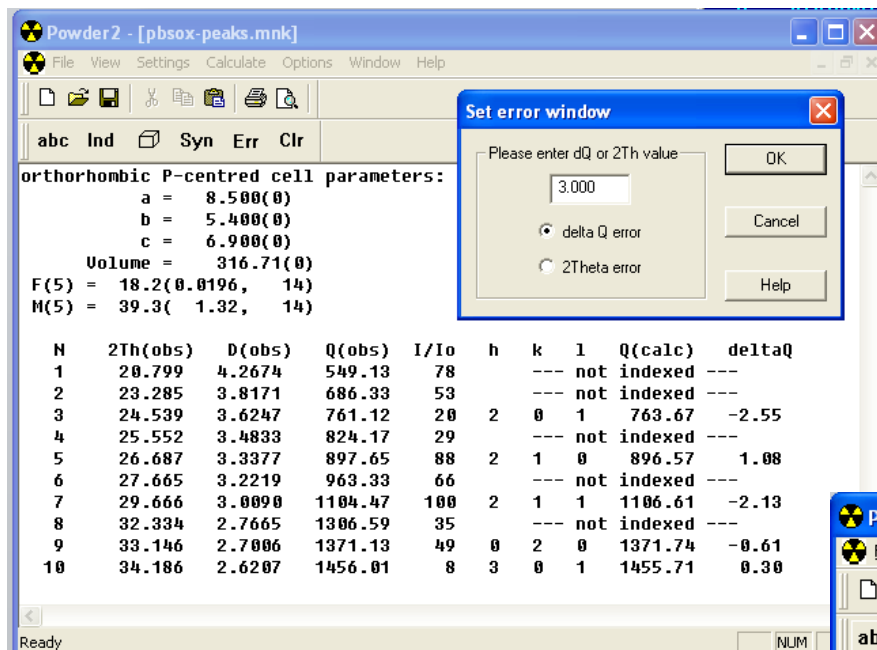
# уточнение параметров ЭЯ: Powder 2

Пример: рентгенограмма  $\text{PbSO}_4$  из комплекта примеров «Fullprof»



наличие  $\alpha_2$ -компоненты игнорировали

# уточнение параметров ЭЯ: Powder 2



orthorhombic P-centred cell parameters:  
a = 8.500(0)  
b = 5.400(0)  
c = 6.900(0)  
Volume = 316.71(0)  
F(5) = 18.2(0.0196, 14)  
M(5) = 39.3( 1.32, 14)

N	2Th(obs)	D(obs)	Q(obs)	I/Io	h	k	l	Q(calc)	deltaQ
1	20.799	4.2674	549.13	78	---	---	---	not indexed	---
2	23.285	3.8171	686.33	53	---	---	---	not indexed	---
3	24.539	3.6247	761.12	20	2	0	1	763.67	-2.55
4	25.552	3.4833	824.17	29	---	---	---	not indexed	---
5	26.687	3.3377	897.65	88	2	1	0	896.57	1.08
6	27.665	3.2219	963.33	66	---	---	---	not indexed	---
7	29.666	3.0090	1104.47	100	2	1	1	1106.61	-2.13
8	32.334	2.7665	1306.59	35	---	---	---	not indexed	---
9	33.146	2.7006	1371.13	49	0	2	0	1371.74	-0.61
10	34.186	2.6207	1456.01	8	3	0	1	1455.71	0.30

Set error window dialog box:  
Please enter dQ or 2Th value: 3.000  
Options:  delta Q error,  2Theta error

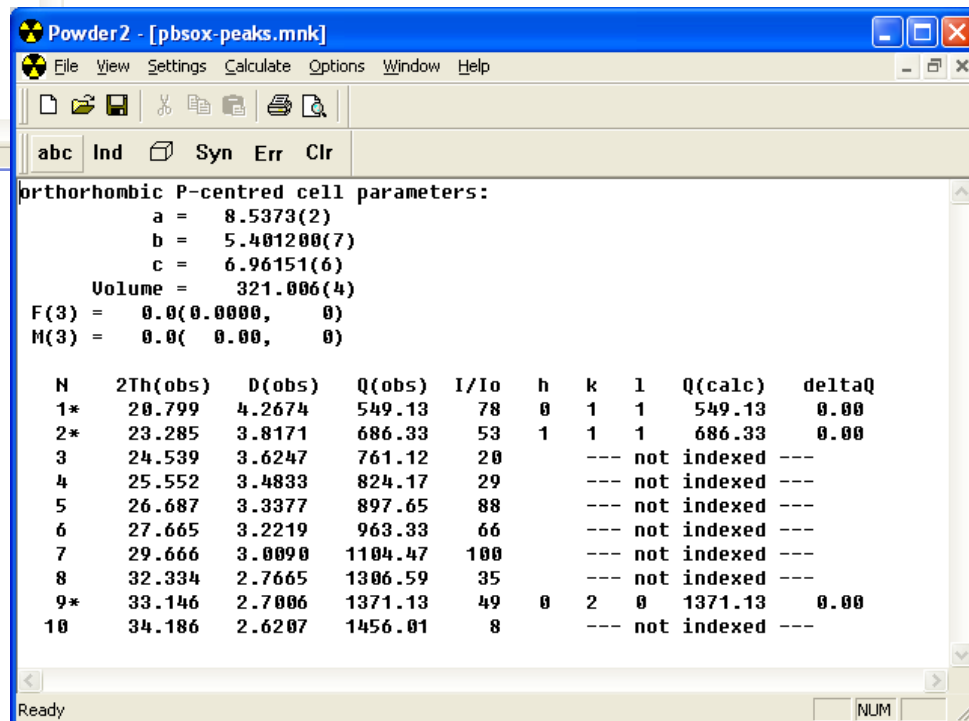
опция 1:

начинаем с примерных значений параметров ЭЯ (напр., данные по изоструктурному соединению)



опция 2:

начинаем с индексов Миллера отдельных рефлексов: (110) перовскита и т.п.



orthorhombic P-centred cell parameters:  
a = 8.5373(2)  
b = 5.401200(7)  
c = 6.96151(6)  
Volume = 321.006(4)  
F(3) = 0.0(0.0000, 0)  
M(3) = 0.0( 0.00, 0)

N	2Th(obs)	D(obs)	Q(obs)	I/Io	h	k	l	Q(calc)	deltaQ
1*	20.799	4.2674	549.13	78	0	1	1	549.13	0.00
2*	23.285	3.8171	686.33	53	1	1	1	686.33	0.00
3	24.539	3.6247	761.12	20	---	---	---	not indexed	---
4	25.552	3.4833	824.17	29	---	---	---	not indexed	---
5	26.687	3.3377	897.65	88	---	---	---	not indexed	---
6	27.665	3.2219	963.33	66	---	---	---	not indexed	---
7	29.666	3.0090	1104.47	100	---	---	---	not indexed	---
8	32.334	2.7665	1306.59	35	---	---	---	not indexed	---
9*	33.146	2.7006	1371.13	49	0	2	0	1371.13	0.00
10	34.186	2.6207	1456.01	8	---	---	---	not indexed	---



# Напоминание: систематические погасания

---

часть теоретически возможных рефлексов может отсутствовать:

- центрировка
- открытые элементы симметрии
- «случайные» погасания

$$\mathbf{F}: h+k; k+l; h+l = 2n$$

$$\mathbf{I}: h+k+l = 2n$$

$$F_{hkl} = \sum f_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \int \rho_{xyz} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r$$

discreet

continuous

electron density

Можно определить пространственную группу на основании анализа систематических погасаний

Два основных алгоритма (по названиям соответствующих программ):

- DASH
- EXPO

# Определение пространственной группы

Условия возникновения рефлексов на дифрактограмме при наличии открытых элементов симметрии

Обозначение элемента	Ориентация	Зона	Условия
<b>Центрировки</b>			
<i>A</i>	—	<i>hkl</i>	$k+l=2n$
<i>B</i>	—	<i>hkl</i>	$h+l=2n$
<i>C</i>	—	<i>hkl</i>	$h+k=2n$
<i>F</i>	—	<i>hkl</i>	$h+k=2n$ $k+l=2n$ $h+l=2n$
<i>I</i>	—	<i>hkl</i>	$h+k+l=2n$
<i>R</i> (в гексагональной установке)	—	<i>hkl</i>	$-h+k+l=3n$
<b>Плоскости скользящего отражения</b>			
<i>a</i>	(010)	<i>h0l</i>	$h=2n$
	(001)	<i>hk0</i>	$h=2n$
	(110)	<i>hhl</i>	$h=2n$
<i>b</i>	(100)	<i>0kl</i>	$k=2n$
	(001)	<i>hk0</i>	$k=2n$
<i>c</i>	(100)	<i>0kl</i>	$l=2n$
	(010)	<i>h0l</i>	$l=2n$
	(110)	<i>hhl</i>	$l=2n$
	(1-10)	<i>h-hl</i>	$l=2n$
<i>d</i>	(100)	<i>0kl</i>	$k+l=4n$ ( $k, l=2n$ )
	(010)	<i>h0l</i>	$h+l=4n$ ( $h, l=2n$ )
	(001)	<i>hk0</i>	$h+k=4n$ ( $h, l=2n$ )
	(110)	<i>hhl</i>	$2h+l=4n$ ( $l=2n$ )
<i>n</i>	(100)	<i>0kl</i>	$k+l=2n$
	(010)	<i>h0l</i>	$h+l=2n$
	(001)	<i>hk0</i>	$h+k=2n$
	(110)	<i>hhl</i>	$l=2n$
<b>Винтовые оси</b>			
$2_1, 4_2$	[100]	<i>h00</i>	$h=2n$
	[010]	<i>0k0</i>	$k=2n$
	[001]	<i>00l</i>	$l=2n$
$4_1, 4_3$	[100]	<i>h00</i>	$h=4n$
	[010]	<i>0k0</i>	$k=4n$
	[001]	<i>00l</i>	$l=4n$
$3_1, 3_2, 6_2, 6_4$	[001]	<i>00l</i>	$l=3n$
$6_1, 6_5$	[001]	<i>00l</i>	$l=6n$

*таблица есть на сайте!!!*

$Pbnm =$

“нестандартная установка”  $Pnma$  (#62)

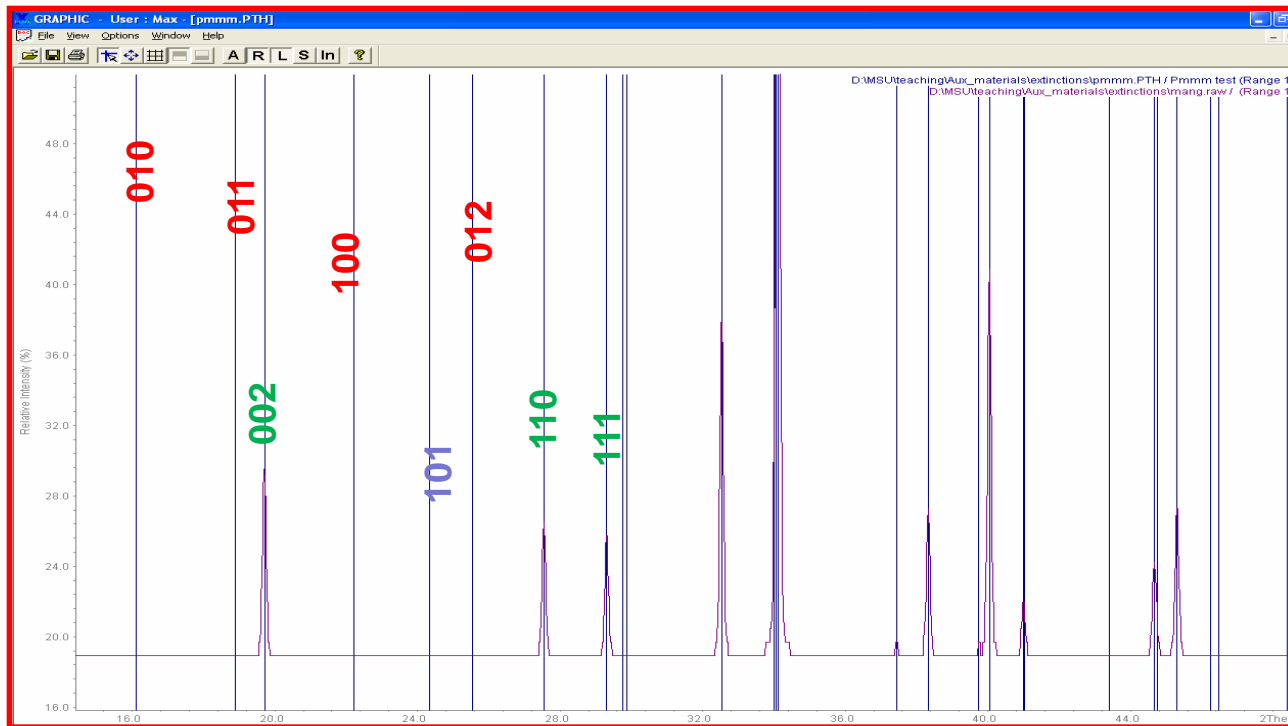
$b: 0kl > k=2n$

$n: h0l > h+l=2n$

часто нестандартные установки используют при описании сверхструктур, чтобы сохранить исходную («субструктурную») ориентацию осей

# Определение пространственной группы: пример

Можно определить пространственную группу на основании анализа систематических погасаний



Pbnm

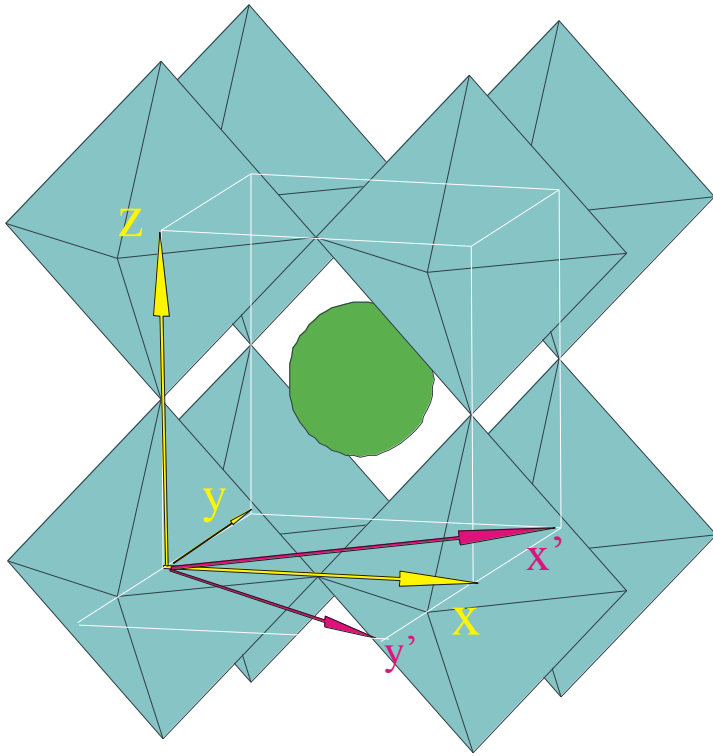
b:  $0kl > k=2n$

n:  $h0l > h+l=2n$

рефлекс 101 разрешен,  
НО ИНТЕНСИВНОСТЬ  
– очень мала!!!

Если >1 возможности: обычно выбирается наиболее симметричная (если нет экспериментальных данных в пользу обратного - напр., сегнетоэлектричество)

# Фазовые переходы и метод гомологии



$$x' = x + y$$

$$y' = x - y$$

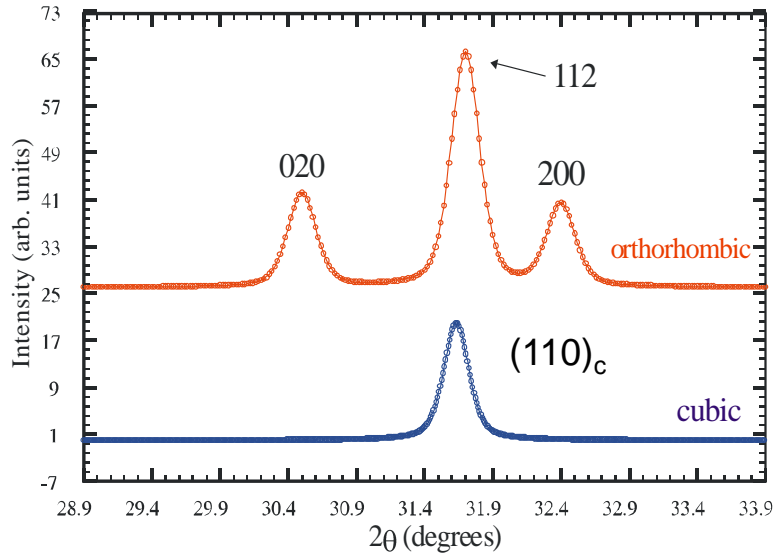
$$z' = 2z$$

$$NEW = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} OLD$$

Это - в частности, самый распространенный тип искажения в перовскитах:  
тип  $GdFeO_3$  (пространственная группа  $Pnma$ )

# Метод гомологии: преобразование различных векторов

обратное пространство:  
преобразование индексов Миллера

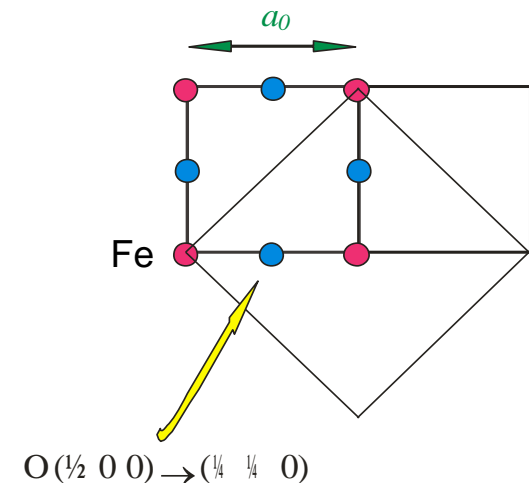


- компоненты вектора  $\alpha$  преобразуются *обратно* к матрице  $A$  = преобразуются **контравариантно** при преобразовании базиса

- компоненты вектора  $\beta$  преобразуются с матрицей преобразования  $A$ , говорят, что эти компоненты **преобразуются ковариантно** при изменении базиса

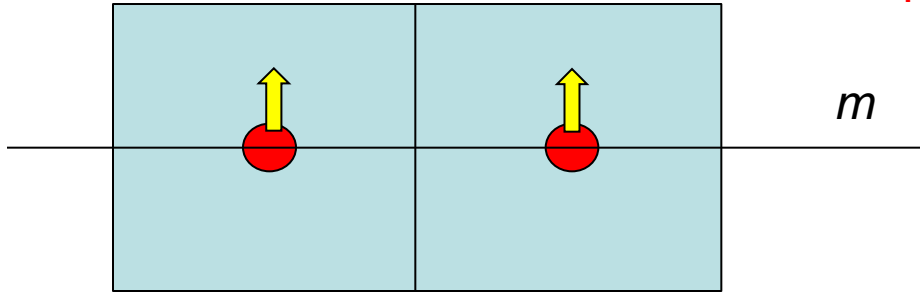
прямое пространство:  
преобразование координат атомов

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$



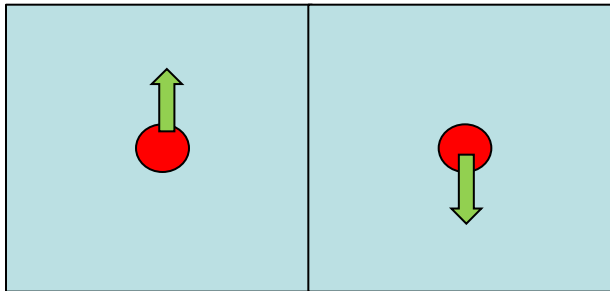
# Сверхструктура без увеличения ячейки???

сегнетоэлектрики



элементарная ячейка не меняется,  
но симметрия – меняется (понижается)

при антисегнетоэлектрическом переходе ячейка удваивается  
*примечание: если уже не была удвоена вследствие других эффектов*



# Переходы группа-подгруппа

---

$\text{La}_{0.85}\text{Ca}_{0.15}\text{MnO}_3$ :  $Pnma \rightarrow P2_1/c$

$Pnma$  (сокращенная запись) =  $P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$  (полная запись)

Три альтернативные установки:

$P 2_1/n 2_1/m 2_1/a$  (стандартная) =  $Pnma$

$P 2_1/b 2_1/n 2_1/m$  (циклическая перестановка - 1) =  $Pbnt$

$P 2_1/m 2_1/c 2_1/n$  (циклическая перестановка - 2) =  $Pmcp$

то есть переход:

$P n m a (P 2_1/m 2_1/c 2_1/n) \rightarrow P 1 2_1/c 1 (P2_1/c)$

# Как найти координаты атомов в сверхструктуре

Пример:  $\text{La}_{0.85}\text{Ca}_{0.15}\text{MnO}_3$ :  $Pnma$  ( $Pm\bar{c}n$ )  $\rightarrow P2_1/c$   
*без изменения размера элементарной ячейки*

3 практических способа

- вручную (интернациональные таблицы++)
- “Cryscon” и т.п.
- программы теоретико-группового анализа ФП (см. ниже)

$Pnma$ :

$\text{Mn} @ 4b \{ (00\frac{1}{2}) + (\frac{1}{2}00) + (0\frac{1}{2}0) + (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \}$

$Pm\bar{c}n$ :

*[для этой позиции так получилось что координаты при цикл. перестановке не изменяются]*

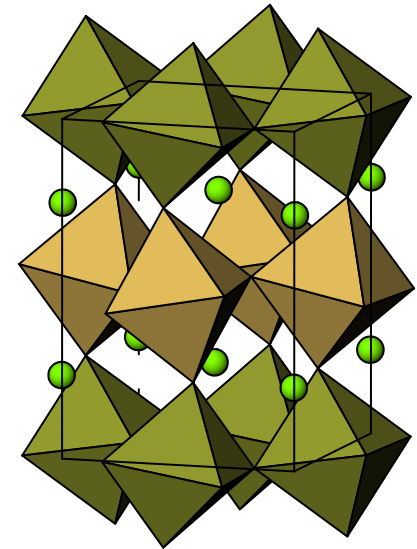
$\text{Mn} @ 4b \{ (00\frac{1}{2}) + (\frac{1}{2}00) + (0\frac{1}{2}0) + (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}) \}$

$P2_1/c$ : **две позиции**

(2b):  $(\frac{1}{2}00) + (\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

(2a):  $(0\frac{1}{2}0) + (00\frac{1}{2})$

аналогично расщепляются позиции кислорода  
(не все)



*При увеличении ячейки в ручном способе появляется дополнительная стадия  
– преобразование координат с помощью обратной матрицы перехода*

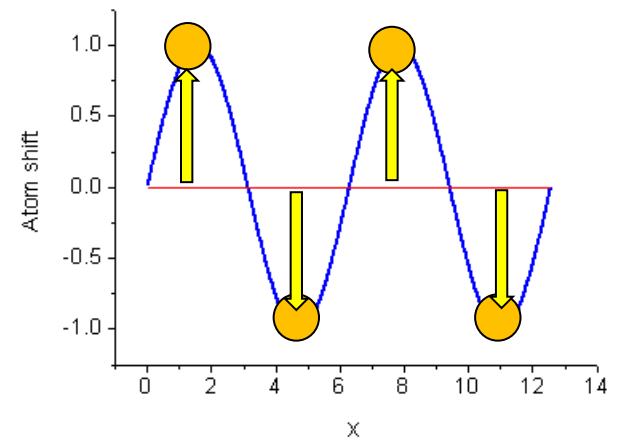
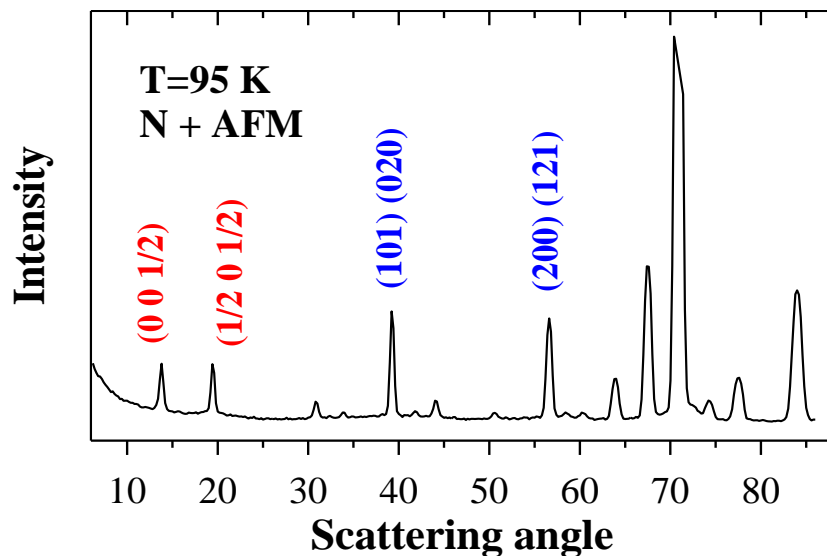
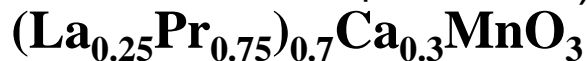


# Концепция "волнового вектора (магнитной) структуры"

можно вместо использования новой ячейки увеличенного объема использовать ту же ячейку и дробные индексы Миллера

$$Q = g + k$$

Пример (дифракция нейтронов –  
из лекций ОИЯИ)



описание – как  
«волна смещений атомов»

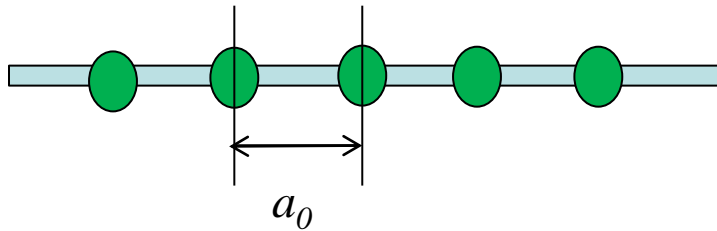
*(единственно возможна  
для несоизмерно  
модулированных структур)*

# Эквивалентность: 1D случай

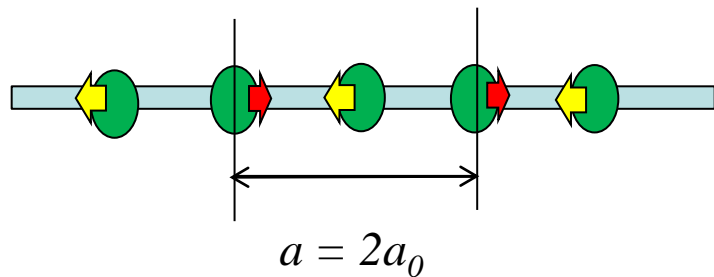
$$1/d^2 = h^2 / a^2$$



$$d = a / h$$



цепочка Пайерлса



Первый рефлекс ( $h=1$ ):

исходная цепочка

$$d = a_0$$

модулированная цепочка

$$h = 1$$

в терминах новой  
«элементарной ячейки»

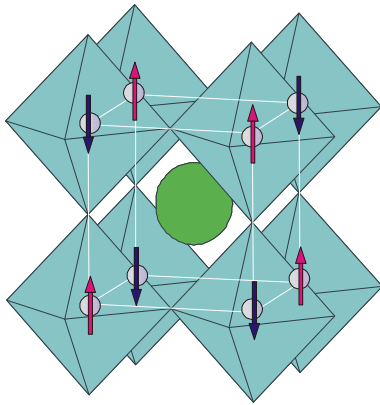
$$d = a = 2a_0 = a_0/h$$

$$h = 1/2$$

в терминах старой  
«элементарной ячейки»

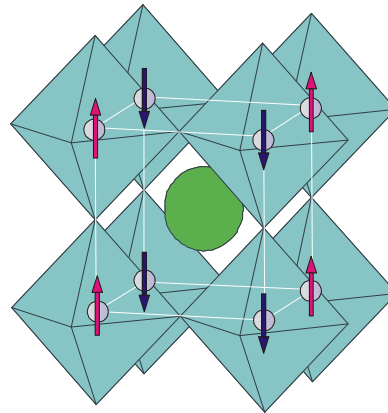
# Примеры

$$Q = g + k$$



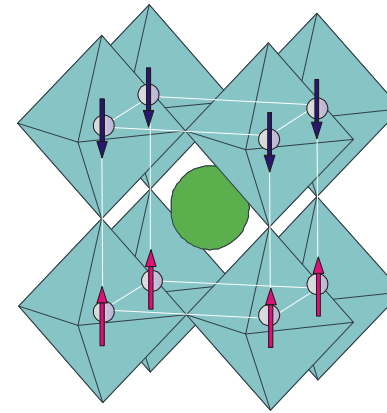
G-type

$$k = ( \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} )$$



C-type

$$k = ( \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 )$$



A-type

$$k = ( 0 0 \frac{1}{2} )$$

рассмотрение для атомных смещений и магнитных моментов аналогично, кроме деталей (вектор / псевдовектор...)

*Аксиальный вектор (англ. axial, осевой) или псевдовектор — величина, преобразующаяся как вектор при операциях поворота, но, в отличие от вектора, не меняющая свой знак при инверсии (обращении знака) координат.*

# Систематический подход к сверхструктуре (фазовые переходы)

---

Строгая математика -  
на теории фазовых переходов Ландау + теории групп

Идея: фазовый переход - по одному неприводимому представлению

Описано в справочнике:  
Isotropy subgroups of the 230 crystallographic space groups  
(Авторы: Harold T. Stokes, Dorian M. Hatch)

методы аналогичны классификации нормальных колебаний для  
ИК (Раман) - спектроскопии

*Harold T. Stokes, Dorian M. Hatch*  
*«Introduction to isotropy subgroups and displacive phase transitions»*

# Систематический подход к сверхструктуре (фазовые переходы)

---

## Компьютерная программа: «Isotropy»

ISODISPLACE is a tool for exploring the structural distortion modes of crystalline materials. It **provides a user-friendly interface** to many of the algorithms used by the Isotropy Software Suite

<http://stokes.byu.edu/isodisplace.html>

Новый термин – «Distortion-Mode Rietveld Refinement»:

refines symmetry-motivated distortion-mode amplitudes  
rather than atomic xyz coordinates

## **ИЗОТРОПИИ ГРУППА**

*множество  $G_x$  таких элементов заданной группы  $G$ , действующей на множестве  $M$  как группа преобразований, которые оставляют неподвижной точку  $x$ . Это множество оказывается подгруппой в  $G$  и называется группой изотропии точки  $x$ .*

*В этом же смысле употребляются термины:*

*стационарная подгруппа, стабилизатор,  $G$ -централизатор*

# Пример: искаженные перовскиты / нотация Глэзера

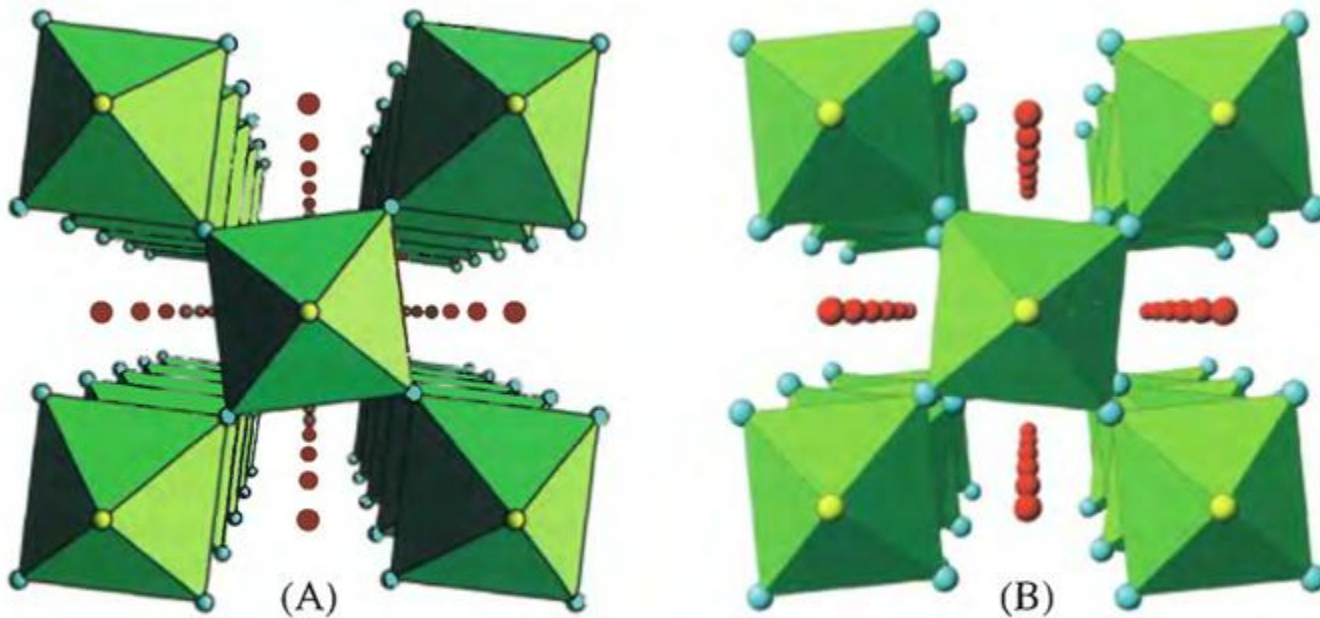
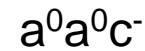
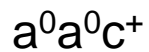


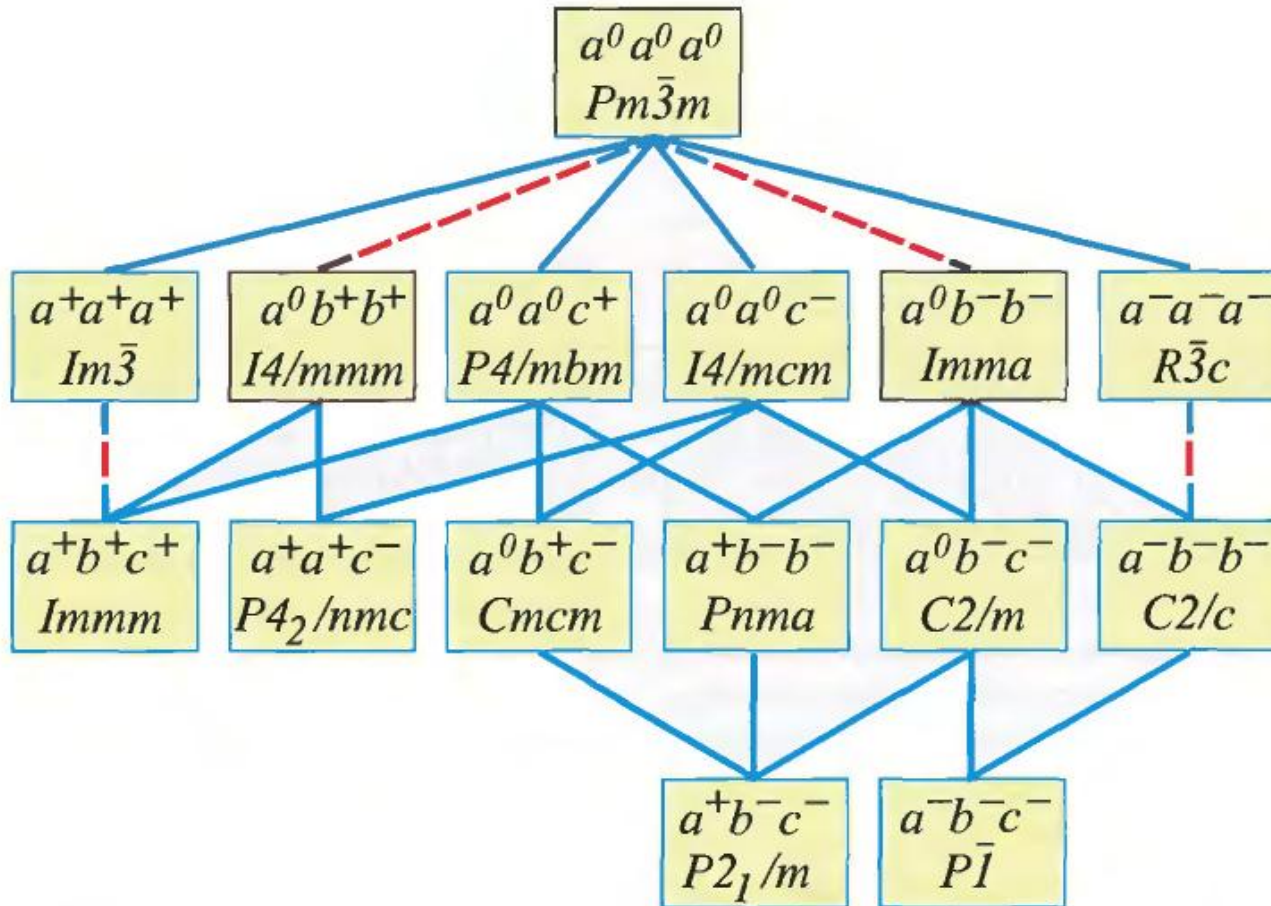
Fig. 2.1. Perspective views of: (A) the tilt system  $a^0a^0c^+$  generating the space group  $P4/mbm$  by in-phase tilting of octahedra; (B) the tilt system  $a^0a^0c^-$  generating the space group  $I4/mcm$  by anti-phase tilting of octahedra. A-site cations shown as red circles, X(1) anions as yellow circles and X(2) anions as blue circles.



23 СИСТЕМЫ

# Применение ТГ методов

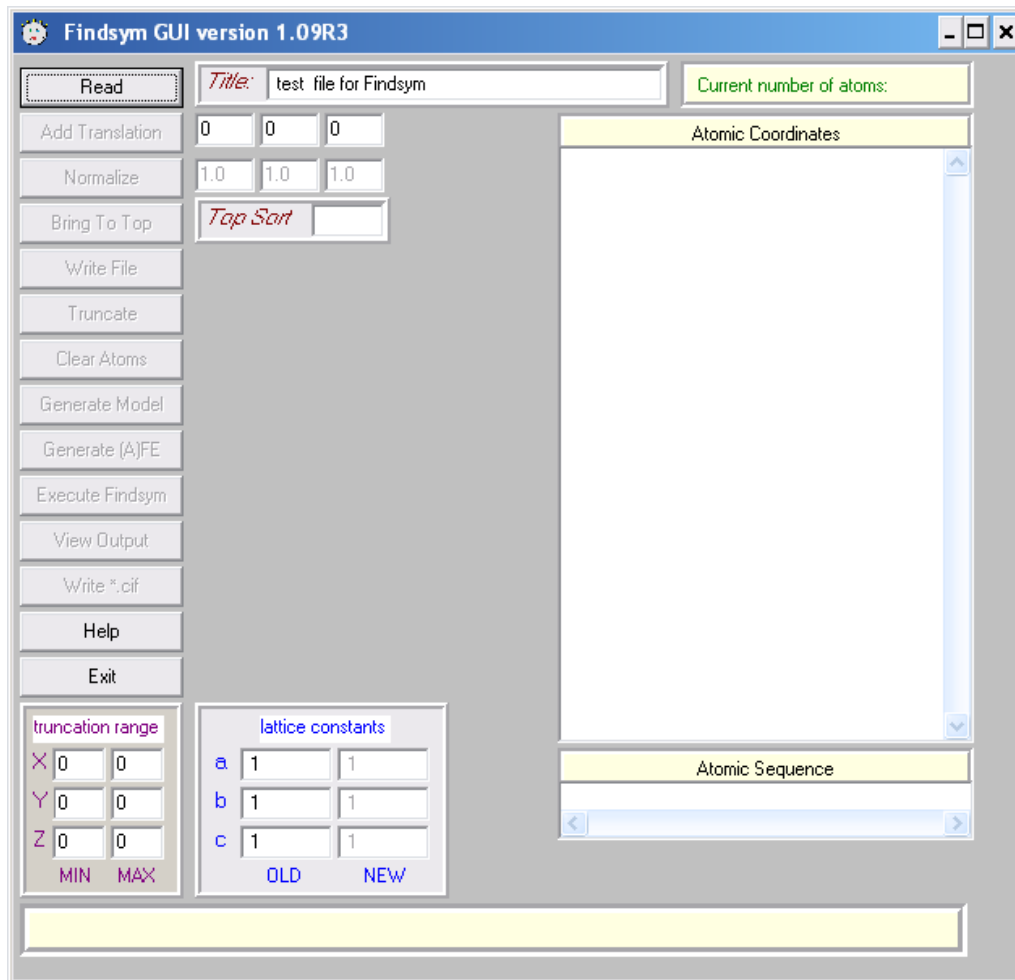
Применение к перовскитам - "разрешенные" Глэзеровские системы



# Другое интересное ПО

## Findsym

определяет пространственную группу по заданным координатам атомов



- написана той же группой в BYU (H.T. Stokes ++)
- есть "скромный" графический интерфейс ("FFS")



## Supercell

для определения ячейки сверхструктуры

- написана разработчиками пакета Fullprof
- синтаксис входного файла - Фуллпрофовский

реализовано два алгоритма:

- 1) "новая элементарная ячейка" ( $a' = ma_0...$ )
- 2) волновой вектор  
(подходит для модулированных структур)

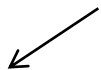
# Метрический тензор в кристаллографии

откуда берется “странная” формула для  $1/d^2$  и как ее вывести?

Very roughly, the metric tensor  $g_{ij}$  is a function which tells how to compute the distance between any two points in a given space. Its components can be viewed as multiplication factors which must be placed in front of the differential displacements  $dx_i$  in a generalized Pythagorean theorem

$$ds^2 = g_{11}dx_1^2 + g_{12}dx_1dx_2 + g_{22}dx_2^2 + \dots$$

метрический тензор в обратном пространстве



$$g^{11} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a}^*; \quad g^{12} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^*; \quad g^{13} = \mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^*;$$

$$g^{21} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a}^*; \quad g^{22} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b}^*; \quad g^{23} = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^*;$$

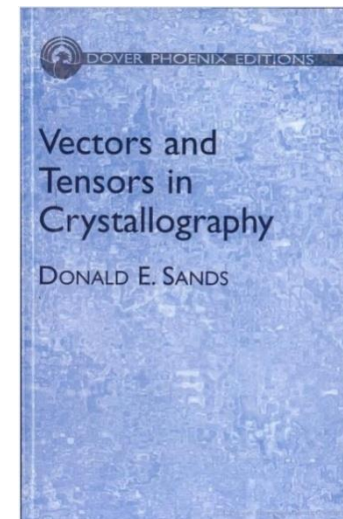
$$g^{31} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a}^*; \quad g^{32} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b}^*; \quad g^{33} = \mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c}^*;$$

$$g^{11} = b^2 c^2 \sin^2 \alpha / V^2; \quad g^{22} = c^2 a^2 \sin^2 \beta / V^2; \quad g^{33} = a^2 b^2 \sin^2 \gamma / V^2;$$

$$g^{12} = g^{21} = (abc^2 / V^2)(\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma);$$

$$g^{23} = g^{32} = (a^2 bc / V^2)(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha);$$

$$g^{31} = g^{13} = (ab^2 c / V^2)(\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)$$



**СПАСИБО  
ЗА ВНИМАНИЕ**