

Diamond软件在单形教学中的应用

吴平伟*

中国海洋大学材料科学与工程学院, 山东 青岛 266404

摘要: 介绍了用Diamond软件构造47种晶体单形模型的方法及其在教学中的应用。

关键词: 单形; 晶体学; Diamond软件

中图分类号: G64; O6

Application of Diamond Software in Simplex Teaching

Pingwei Wu *

School of Materials Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266404, Shandong Province, China.

Abstract: The method of constructing 47 crystal simplex models using Diamond software and its application in teaching were introduced.

Key Words: Simplex; Crystallography; Diamond software

单形是晶体学中的一个重要概念。一个面经点群对称动作完整操作后形成的形状就是单形。单形中各面同形、等大。有的单形非常简单, 比如三斜和单斜点群的单面、平行双面和相交双面, 正交、四方和三方、六方中的单锥、双锥、柱; 有些较为复杂, 如复锥、复双锥、复柱、四面体、八面体; 有些则较为难以想象, 比如立方点群的五角三八面体、五角三四面体和五角十二面体等。在教学实践中发现, 这些复杂形状对于很多学生简直是噩梦。因此, 如何让学生更容易且清晰地理解这些形状是单形教学中的一个难点。

Diamond软件是一款功能非常强大的晶体结构绘图软件, 在对称性教学^[1,2]、原子堆积模型教学^[3]、配位化学教学^[4,5]、X射线衍射教学^[6,7], 甚至蛋白质教学^[8]中都有应用。用Diamond软件构造晶体结构模型时, 只能输入点的坐标, 而不能直接输入晶面指数以得到单形。从单形的定义可知, 其顶点常位于对称元素上。因此, 可以通过输入点的坐标, 用Diamond软件中构造多面体的功能来得到单形。而且, 抓住了位于对称元素上的顶点这一关键信息, 在单形教学和理解上也很有帮助。下面以单形五角三四面体的构造来说明相关问题。关于Diamond软件的使用, 可参考文章《晶体结构模型软件Diamond的使用技巧》^[9]。

图1a是已经构造好的一个单形五角三四面体。五角三四面体的对称性点群是23, 但Diamond软件中只提供空间群, 所以首先要选取合适的空间群。如果考虑简单格子的一个晶胞, 则其空间群与点群23相当, 故可选用P23空间群来构造五角三四面体。五角三四面体的顶点有位于三次轴上的, 即图1中的顶点1和3; 也有不位于任何对称元素上的, 即顶点2。顶点1和3虽然都位于三次轴上, 但距离中心的距离并不相同。所以, 在选择坐标时顶点1和3都选位置对称性为 $\bar{3}$ 的等效点系4c, 但坐标取不同的

收稿: 2023-11-15; 录用: 2024-01-15; 网络发表: 2024-01-31

*通讯作者, Email: wupingwei@ouc.edu.cn

基金资助: 2021年度中国海洋大学本科教育教学研究项目(2021JY187)

值。此处用的坐标值分别为 $4e$ (0.255)和 $4e$ (0.705)。而顶点2不位于任何对称元素上，故只能选一般等效点系 $12j$ 。但是，因为要求顶点1、3和三个顶点2共面，所以当顶点1、3的值选定后，顶点2的坐标值并不能随意填写。这需要经过多次尝试，此处确定的顶点2坐标值是 $12j$ (0.63, 0.47, 0.87)。

设置好顶点坐标后，填充一个晶胞，就可以构造五角三四面体多面体。多面体的构造方式有两种：(1) 选中所有的原子，使用Build|Polyhedral|Construct Polyhedron功能，一键构造出整个五角三四面体。(2) 选择共面的顶点1、3和三个2，使用相同的功能构造出一个面，此时在面中心会出现一个Dummy原子。把所有的原子都删除后，再次填充一个晶胞。用Build|Polyhedral|Add Polyhedron功能，以Dummy原子为中心，以1、2、3顶点为配位原子构造多面体。方式(2)的优点是：a) 可以用Objects|Atom Labels功能为每个Dummy原子编号，即相当于为每个面编号。如果不想显示某些或某种原子而只显示编号，把它们的半径设为0.001即可。如果想使得顶点和Dummy等所有原子都不可见而只显示编号，则可使用Picture|Hide|Hide all atoms功能。b) 可以对每个面单独操作，比如设计其颜色、透明度等，以方便观察和区分。图1b显示的就是以方式2构造的五角三四面体，在其中所有Dummy原子均不可见，一个面编号为F1，并将其设计为红色。对于 23 这样不存在对称中心的点群，其单形具有手性，有左右形之分。左右形成对映关系，不能通过旋转等操作重合。在Diamond软件中，构造出一个单形的对映体非常简单，只需把不在对称元素上的顶点的 x 、 y 坐标值互换即可。图1c显示了图1b所示单形的对映体。从中很容易看出它们之间的镜面对称关系。

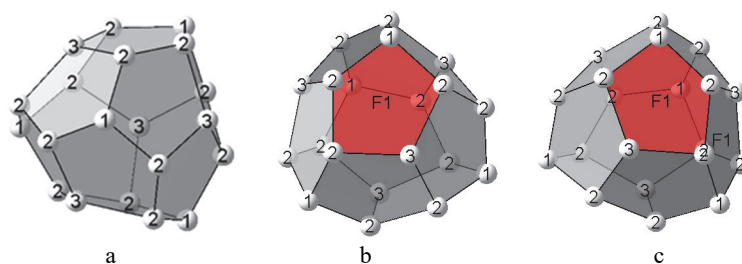


图1 用Diamond软件构造的五角三四面体模型

(a) 单形五角三四面体；(b) 将一个面标记为F1并设计为红色的五角三四面体；(c) 顶点2的 x 和 y 坐标值互换后形成的五角三四面体，其是b图中单形的对映体，二者呈镜面对称关系。电子版为彩图

完成模型制作后，点击File|Save可将模型保存。如果想保存模型的图片，则点击File|Save|Save Graphics As，在弹出框中将文件保存为所需格式即可。按照这种方法，可以构造出所有47种单形，并且根据自己的需要对顶点和面标识，比如标记出顶点所在对称元素并编号。由于可以很清晰地标识位于对称元素上的顶点，在教学过程中，教师在课上可以很方便地解释各面之间的对称关系，学生在课下也可以自己操作，从不同方向观察模型，加深对单形形状及对称性的认识。表1给出了构造各单形所需的空群及相关顶点参数。对于像五角三四面体这种对坐标有特殊要求的情况，表中给出了笔者所确定的坐标供读者参考。在表1中，列出了所有47种单形。但对于单面、平行双面和二面体，因为形状过于简单，并未给出构造相应单形所需的参数。

表1 构造47种单形所用空群及顶点坐标[▽]

序号	单形	所用空群	顶点坐标
1	单面		
2	平行双面		
3	二面体		
4	斜方四面体	$P222$	$4u$
5	斜方锥	$Pmm2$	$1d; 2h; 2f$

(待续)

(续表1)

序号	单形	所用空间群	顶点坐标
6	斜方柱	$Pmmm$	4v; 4x
7	斜方双锥	$Pmmm$	2l; 2p; 2t
8	四方锥	$P4mm$	1b; 4d
9	四方四面体	$P\bar{4}2m$	4n
10	四方柱	$P4/mmm$	8r
11	四方偏方面体	$P422$	2h (0.165); 8p (0.28,0.37,0.45)
12	复四方单锥	$P4mm$	1b; 4d; 4f
13	四方偏三角面体	$P\bar{4}2m$	2h; 4n
14	四方双锥	$P4/mmm$	2h; 4k
15	复四方柱	$P4/mmm$	8r; 8t
16	复四方双锥	$P4/mmm$	2h; 4k; 4o
17	三方锥	$R3m$	1a; 3b
18	三方柱*	$P\bar{6}2m$	12l
19	三方偏方面体	$R32$	2c (0.18); 6f (0.12,0.3,0.82)
20	复三方锥	$R3m$	1a; 3b; 3b ^{&}
21	菱面体	$R\bar{3}m$	1a
22	复三方柱*	$P\bar{6}2m$	12l; 12l ^{&}
23	六方锥 [§]	$P6mm$	1a; 6e
24	三方双锥*	$P\bar{6}2m$	4h; 6k
25	六方柱 [§]	$P6/mmm$	12o
26	复三方偏三角面体	$R\bar{3}m$	2c; 6h
27	六方偏方面体 [§]	$P622$	1a; 12n (0.455,0.12,0.468)
28	复六方锥 [§]	$P6mm$	1a; 6d; 6e; 6d; 6e
29	复三方双锥*	$P\bar{6}2m$	4h; 6k; 6k ^{&}
30	复六方柱 [§]	$P6/mmm$	12n; 12o ^{&}
31	六方双锥 [§]	$P6/mmm$	2e; 6m
32	复六方双锥 [§]	$P6/mmm$	2e; 6k; 6m
33	四面体	$P\bar{4}3m$	8g
34	立方体	$Pm\bar{3}m$	4c
35	八面体	$Pm\bar{3}m$	6f
36	五角三四面体	$P23$	4e (0.255); 4e (0.705); 12j (0.63,0.47,0.87)
37	五角十二面体	$Pm\bar{3}$	8i (1/3); 12k (0.605,0.77)
38	四角三四面体	$P\bar{4}3m$	4e (0.7); 4e (0.215); 6g (0.03)
39	三角三四面体	$P\bar{4}3m$	4e (0.2); 4e (0.9)
40	菱形十二面体	$Pm\bar{3}m$	3c; 8g (0.77)
41	偏方复十二面体	$Pm\bar{3}$	6h (0.15); 8i (0.3); 12k (0.2,0.3)
42	三角三八面体	$Pm\bar{3}m$	6f (0.32); 8g (0.05)
43	四角三八面体	$Pm\bar{3}m$	6f (0.05); 8g (0.25); 12j (0.8)
44	五角三八面体	$P432$	6f (0.095); 8g (0.304); 24k (0.2,0.315,0.45)
45	六四面体	$P\bar{4}3m$	4e (0.23); 4e (0.7); 6g (0.9)
46	四六面体	$Pm\bar{3}m$	6f (0.2); 8g (0.7)
47	六八面体	$Pm\bar{3}m$	3c; 8g (0.2); 12j (0.15)

[∇]所有坐标均按晶体学习惯使用分数坐标, 对特殊等效点系, 只给出待定坐标。*由于所用空间群的格子类型是六方, 故用所给数据在每个晶胞中可做出两个单形。[&]两者的x、y不相等, z坐标相等。[§]因为软件中六方晶胞并不取四轴坐标系, 所以要用到xy平面的四个单胞。

参 考 文 献

- [1] 吴平伟, 朱志斌, 戴金辉. 化学通报, **2008**, No. 3, 236.
- [2] 陈庆洁, 陶玉强, 王国平. 广州化工, **2021**, *49* (13), 154.
- [3] 文桂林, 胡云虎, 潘路. 遵义师范学院学报, **2021**, *23* (1), 89.
- [4] 史崇瑛, 尹志刚, 钱恒玉. 河南化工, **2019**, *36* (4), 57.
- [5] 王冠, 郭晓锦, 赵媛. 广东化工, **2016**, *43* (18), 175.
- [6] 魏祥, 王觉, 彭广威. 广东化工, **2021**, *48* (18), 279.
- [7] 郭腾, 陈君华, 郭雨. 巢湖学院学报, **2012**, *14* (6), 115.
- [8] 李竟才, 陈倩, 刘亚凤. 黄冈师范学院学报, **2020**, *40* (6), 126.
- [9] 吴平伟, 朱志斌, 戴金辉. 化学教育, **2007**, No. 6, 50.