

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА**

ГЕОМЕТРИЧНА КРИСТАЛОГРАФІЯ

НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК

ЧАСТИНА 1

ЛЬВІВ – 2015

Геометрична кристалографія. Ч. 1: навч. посібник для студентів ОКР «Бакалавр» напряму 6.040103 – геологія / укл.: Н.О. Словотенко, І.Т. Бакуменко. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2015. – 96 с.

Укладачі: кандидат геологічних наук, доцент *Н.О. Словотенко*
кандидат геолого-мінералогічних наук,
доцент *І.Т. Бакуменко*

Рецензент: доктор геолого-мінералогічних наук,
професор *О.І. Матковський*

Відповідальний за випуск: завідувач кафедри мінералогії,
доцент *Л.З. Скакун*

Редактор: *Лариса Сідлович*

Відповідальний за друк: *Олена Старунько*

*Затверджено
на засіданні Вченої ради
геологічного факультету
(протокол №22/6 від 10.06.2015 р.)*

Від авторів

При написанні цього посібника була поставлена мета подати короткий і стислий виклад кристалографії, котрий все ж містив би весь той матеріал, який входить у програму курсу, що читається на геологічному факультеті Львівського національного університету. Коло питань, яке охоплює дане видання, стосується переважно макросиметрії кристалів.

Кристалічна речовина відіграє першочергову роль у будові земної кори, де кристалічна будова властива мінералам гірських порід. До кристалів належить величезна кількість твердих хімічних продуктів, як неорганічних, так і органічних. Історично кристалографія виникла в рамках мінералогії як наука, що описує ідеальні кристали. Про практичне застосування їхніх властивостей, заснованих на знанні елементів симетрії, можна говорити безконечно.

Генеральна Асамблея ООН на своїй 66-й сесії проголосила 2014 рік Міжнародним роком кристалографії. В обґрунтуванні прийнятого рішення в резолюції Генеральної Асамблеї було підкреслено роль вивчення та прикладного застосування кристалографії в сучасному світі та вказувалося важливе значення наукових досягнень у сфері кристалографії.

Новий україномовний навчальний посібник з геометричної кристалографії необхідний для подальшого успішного вивчення наступних розділів кристалографії та курсів сучасної мінералогії й суміжних геологічних дисциплін. У ньому розглянуто всі необхідні розділи з геометричної макрокристалографії у відповідності до затвердженої програми курсу «Кристалографія» для студентів напряму 6.040103 – геологія, освітньо-кваліфікаційний рівень – бакалавр. Кожен розділ супроводжується контрольними завданнями та списком літератури.

ТЕМА 1

ПРЕДМЕТ, ЗАВДАННЯ ТА ЗВ'ЯЗОК КРИСТАЛОГРАФІЇ З ІНШИМИ НАУКАМИ

Кристалографія – одна з фундаментальних наук про кристалічну речовину. Це наука про зовнішню форму, внутрішню будову, зародження, ріст і перетворення кристалів, а також про взаємозв'язки їхнього хімізму та фізичних властивостей з особливостями будови і змінами зовнішніх умов. Найважливішою відмінністю кристалічної речовини від аморфних тіл, рідин і газів є закономірне впорядковане розташування атомів, іонів і молекул у її внутрішній структурі. Буквально слово “кристалографія” означає опис кристалів.

Спочатку увагу людей привертала зовнішня форма (морфологія) огранених кристалів. Пізніше дійшла черга до внутрішньої будови кристалів (кристалічної структури), особливостей хімічного складу, фізичних властивостей і кристалогенезу (утворення й перетворення кристалів). Отже, *кристалографія – наука про морфологію, атомно-молекулярну будову, симетрію, фізичні властивості, процеси зародження, росту і змін кристалів.* Уперше термін “кристалографія” був запропонований для назви “науки про кристали” швейцарським ученим М. Капеллером у 1723 р.

Кристалографія як самостійна гілка науки почала окреслюватись у XVII – XVIII ст., коли були відкриті головні закони огранування кристалів та відкрите в них двозаломлення світла. Виникнення кристалографії та її розвиток довгий час були тісно пов'язані з мінералогією, найбільш досконалими об'єктами досліджень котрої були саме кристалічні тіла – мінерали. Пізніше почалося зближення кристалографії з хімією, оскільки було виявлено безпосередню залежність зовнішньої форми кристалів від їхнього складу і стало зрозумілим, що пояснити форму і властивості кристалів можна лише на основі атомістичних уявлень. У кристалах знаходили дедалі більше нових фізико-хімічних і фізичних явищ. Так відбувалося зближення з фізикою. Почали приходити у кристалографію і математичні методи. Це теорія симетрії, котра наприкінці XIX ст. отримала класичне завершення у теорії точкових і просторових груп, і використання апарату тензорної кристалографії.

На початку ХХ ст. була відкрита дифракція рентгенівських променів у кристалах. Це стало революцією не лише у кристалографії, а й у всій науці про атомну будову речовини. Почали свій розвиток сучасна кристалохімія і фізика твердого тіла. Кристалографічні методи, і в першу чергу рентгенографія, розповсюджувались у багатьох інших галузях науки – фізичному матеріалознавстві, вивченні неорганічних і органічних молекул, полімерів, біологічних структур і т.п.

У подальшому важливими методами стали структурна електроннографія, нейтроннографія, спектроскопія, котрі не лише доповнюють дані рентгеноструктурного аналізу, але й привносять низку нових відомостей про атомну будову кристалів. Суттєві результати дає застосування електронної мікроскопії, а також інших сучасних методів дослідження речовини – оптичних, резонансних та ін. Тому надзвичайно інтенсивний розвиток одержала кристалофізика: у кристалах були відкриті нові явища, що відбуваються на атомно-молекулярному рівні. Вони знайшли різноманітне застосування в науці й техніці.

Іншим важливим фактором, який вплинув на всебічний розвиток кристалографії, був розвиток теорії кристалогенезу й онтогенії мінералів (утворення, перетворення та взаємодії кристалів), що зблизило кристалографію з термодинамікою і фізичною хімією.

Експериментальні дослідження фазових перетворень за участю кристалів дають змогу робити обґрунтовані висновки про процеси, які відбуваються не тільки на поверхні Землі, але й у глибинах геосфер. Вони сприяють розвитку геодинамічних і геохімічних концепцій.

Синтетичні (штучні) кристали поряд із природними стають дедалі необхіднішими для проведення фізичних досліджень. Їх активно використовують у сучасній техніці. Створення й виробництво синтетичних кристалів із наперед заданими властивостями мають велике значення для традиційних галузей – прецизійного будівництва приладів, ювелірної промисловості. Нині вони визначають розвиток таких важливих галузей техніки, як радіоелектроніка, напівпровідникова та квантова електроніка, технічна оптика й акустика. Пошук кристалів із цінними для практики фізичними властивостями, вивчення їхньої структури, розвиток нових методів синтезу є однією з головних проблем сучасної науки, важливим фактором науково-технічного прогресу.

Кристалографія в сучасному розумінні – це базовий предмет для мінералога. У даному підручнику ми переважно розглядатимемо лише різні аспекти так званої *мінералогічної кристалографії*. Морфологічні особливості, внутрішні особливості будови, утворення й фізичні властивості кристалів розглядають як єдину комплексну проблему. Ці чотири сторони сучасної кристалографії доповнюють одна одну. Вивчення не лише ідеальної, але й реальної структури кристалів зі всіма її макро- і мікрodefектами дає можливість вести цілеспрямований пошук нових кристалів із цінними властивостями й удосконалювати процеси їхнього синтезу, використовуючи різні можливості керування їхнім складом, морфологією та реальною структурою.

У всьому світі кристалографічні знання набувають дедалі більшого значення. Практично всі наукові й технічні досягнення останнього часу (комп'ютерна техніка, електронна мікроскопія, квазікристали, високотемпературні надпровідники і т.д.) безпосередньо пов'язані з кристалографією. Без знання кристалографічних законів важко зрозуміти й оцінити новітні наукові відкриття.

Своїм зародженням кристалографія зобов'язана спостереженню та вивченню природних об'єктів: мінералів і складених ними гірських порід. Тому можна вважати, що у становленні кристалографії як науки більшу роль відіграла геологія, вірніше, геологи. Дійсно, довгий час ця дисципліна була невід'ємною частиною геології, а точніше – мінералогії. Однак у подальшому кристалографія виділилась у самостійну ділянку знань, і неможливо навіть уявити собі жодну з геологічних наук без знання та широкого використання законів кристалографії.

Слід підкреслити, що сучасна кристалографія – це самостійна наука. Як і кожна наука, вона має унікальний, лише їй притаманний метод – стосовно кристалографії це *метод симетрії*, який є загальним методом пізнання закономірностей розвитку Землі, її речовини.

Симетрія може бути замаскована випадковою дисиметрією форми об'єкта і недоступною для безпосереднього спостереження. Але вона є в тій чи іншій формі у всіх матеріальних об'єктах! Таким чином, симетрія є головною властивістю кристалів. Застосування законів симетрії становить основу всіх кристалографічних методів, що й робить кристалографію самостійною наукою.

ПОНЯТТЯ ПРО КРИСТАЛІЧНИЙ СТАН. БУДОВА ПРОСТОРОВОЇ ТА КРИСТАЛІЧНОЇ ГРАТОК. ПАРАМЕТРИ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ КОМІРКИ

В основу сучасної теорії структури кристалів покладено два положення: атомістична гіпотеза і закон однорідності кристалів. Атомістична гіпотеза полягає в тому, що вся речовина складається з окремих частинок – атомів або їхніх груп. Геометрична кристалографія розглядає при цьому атоми або молекули як дещо ціле та неподільне. Закон же однорідності кристалів, як ми вже знаємо, полягає в тому, що в об'ємі кристала і в паралельних напрямках властивості кристалічної речовини однакові, однорідні. А в інших напрямках загалом може проявлятися закономірна анізотропія. Таким чином, закон однорідності кристалів поширюється на розподіл речовини у просторі, тобто треба вважати, що в паралельних напрямках у будь-яких ділянках речовина кристала побудована тотожно, а в непаралельних побудова його може бути різною.

Розміщення будь-яких мікрочастинок, що утворюють кристал (атомів чи іонів або молекул чи радикалів), підкоряється закону тривимірної просторової періодичності. Таким чином, шляхом абстрагування від особливостей внутрішньої будови атомів і молекул дослідники створили уявлення про тривимірну *просторову ґратку* кристалів, найпростішим геометричним образом якої є тривимірно-періодична система точок (рис. 1). Слід зауважити, що *просторова ґратка* є закономірною системою абстрактних точок, а *кристалічна ґратка* – системою матеріальних частинок, розташованих за принципом просторової ґратки. Елементарний паралелепіпед (*елементарна комірка*), тривимірним повторенням котрого й утворюється вся кристалічна структура, може утримувати різну кількість атомів або їх груп – від одного (при розміщенні атомів лише у вершинних вузлах елементарного паралелепіпеда: $1/8 \times 8 = 1$) до мільйонів. Взаємне розміщення атомів у комірці може характеризуватися тією чи іншою симетрією. Якщо така компактна група атомів загалом нейтральна, то її називають *молекулою* (в молекулярних кристалах), якщо ж вона заряджена – *радикалом*. При цьому вершини, ребра і грані кристалів відповідають вузлам, рядам і плоским сіткам просторової ґратки (рис. 1–4). Зауважимо, що реальні ребра кристалів відповідають *рядам*, густо зайнятим матеріальними частинками, а реальні грані – *сіткам*, густо вкритим частинками (як кажуть, мають

більшу *ретикулярну густину*) (ретикулярна щільність сітки – кількість вузлів, що припадає на одиницю її площі).

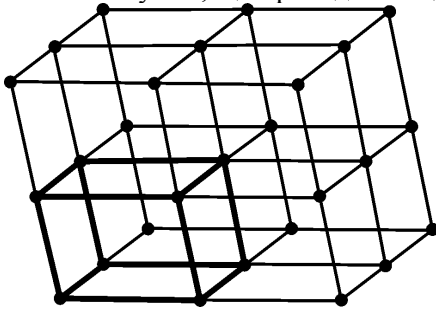


Рис. 1. Тривимірна просторова гратка



Рис. 2. Ряд просторової гратки: a – проміжок ряду

Слід пам'ятати, що просторова гратка – це точкова побудова. Ми уявляємо її як геометричний образ нескінченно великої протяжності, що не має ні початку, ні кінця в будь-якому напрямку. Це може здаватися дивним, адже реальні кристали не лише мають границі, але й є порівняно невеликими. Однак, якщо порівняти справжню відстань між двома сусідніми матеріальними частинками кристала з його розміром, то виявиться, що на 1 см припадають десятки мільйонів таких відстаней.

Окремі точки, які складають просторову гратку, називаються її *вузлами*. Пряма, проведена через будь-які два вузли, пройде через нескінченну множину ідентичних вузлів. Такий напрямок називають *рядом* гратки. Ряд характеризує одна величина – відстань між сусідніми точками, проміжками ряду a (рис. 2). Через будь-який вузол за межами даного ряду можна провести паралельний ряд, ідентичний даному. Два ряди просторової гратки, які розташовані в одній площині, визначають *плоску сітку*. Розміщення вузлів на плоскій сітці характеризується трьома величинами: двома проміжками рядів a , b і кутом між цими рядами γ (рис. 3). Плошка сітки вкрита вузлами таким чином, що їх можна розглядати як вершини нескінченно великого числа рівних паралелограмів, прикладених один до одного без проміжків. Елементарний паралелограм із найменшим периметром називають *головним утворюючим паралелограмом* даної плоскої сітки. Для того, щоби побудувати тривимірну *просторову гратку*, треба знати шість величин: три ребра *елементарної комірки* a , b , c і три міжреберні кути α , β , γ (рис. 4). Браве довів, що є лише 14 типів просторових ґраток, побудованих із щільно укладених елементарних комірок.

Вибирають комірки мінімального об'єму з міжосьовими кутами, максимально наближеними до прямих.

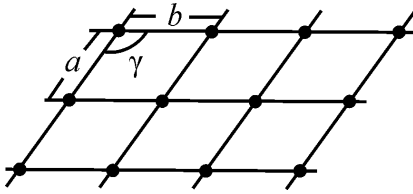


Рис. 3. Двовимірна плоска сітка

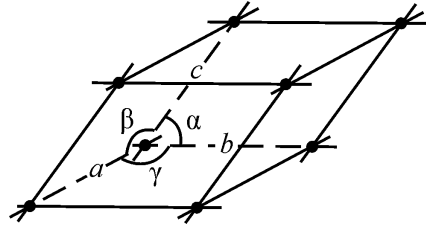


Рис. 4. Елементарний паралелепіпед (елементарна комірка) просторової ґратки: a, b, c – проміжки рядів; α, β, γ – кути між осями

Розташування атомів у кристалічних ґратках підпорядковане розташуванню вузлів у просторових ґратках. Слід підкреслити, що просторова ґратка не є просто системою точок, “вузлів”, у яких розміщені центри тих чи інших атомів або молекул. Вона є геометричним образом симетричних операцій дискретних переносів – трансляцій. Якщо у структурі кристала наявні атоми різного сорту, то кожний різновид атомів підпорядкований відповідним кристалічним ґраткам, які паралельно вставлені одна в одну.

Енергетична вигідність виникнення тривимірної періодичності настільки велика, що ідеальна кристалічна ґратка “допускає” в собі найрізноманітніші точкові, лінійні та інші дефекти навіть до макровключень. Цікаво, що у деяких випадках багато дефектів самі тяжіють до певного впорядкованого періодичного розміщення з великими періодами, ніби “імітуючими” кристалічну ґратку. Очевидно, тут проявляється енергетична вигідність періодичності, яка виявляється вже не на “атомному”, а на субмікроскопічному рівні.

Унаслідок закономірного розміщення та впорядкування атомів кристалічний стан характеризується наявністю *дальнього порядку*. Останній проявляється в однаковому (паралельному) взаємному оточенні ідентичних частинок у будь-якому місці об'єму кристала.

У кристалах є також і *ближній порядок* у розташуванні найближчих сусідніх атомів (у межах їх безпосередньої взаємодії). Ближній порядок характеризується однаковими координаційними поліедрами атомів, однаковими міжатомними кутами і довжинами хімічних зв'язків.

На відміну від кристалів, у аморфних, склуватих і рідких тілах є тільки ближній порядок розташування найближчих сусідніх частинок. А в газовому стані взагалі відсутні і дальній, і ближній порядки, тому що атоми або молекули в газах рухаються хаотично і майже не взаємодіють.

Унаслідок виділення енергії при вистроюванні атомів у структуру кристалів і максимальному впорядкуванні структури за даних умов кристалічний стан характеризується мінімальною внутрішньою енергією та є термодинамічно рівноважним станом при певних параметрах – тискові, температурі, хімічному складові (у разі твердих розчинів) та ін. Строго кажучи, повністю впорядкований ідеальний кристалічний стан унаслідок коливання і дифузії атомів реально не може бути здійснений. Наближення до нього має місце лише при температурах, близьких до 0 °К (так званий ідеальний кристал). Крім того, реальні кристалічні тіла завжди містять певну кількість дефектів, що порушують як ближній, так і дальній порядки. Особливо багато дефектів спостерігається у твердих розчинах, в яких окремі частинки та їх угруповання статистично займають різні положення у просторі. Спочатку ми будемо розглядати бездефектні, так звані *ідеальні кристали*.

Кожній кристалічній фазі фіксованого хімічного складу при даних термодинамічних умовах відповідає одна кристалічна структура. Ця поліморфна структурна модифікація на *PT*-діаграмах має своє поле стійкості.

Здатність кристалів самоогранятись, утворюючи під час росту плоскі грані, є найбільш виразною зовнішньою ознакою кристалічності речовини. Однак ця зовнішня ознака – лише один із макроскопічних проявів його специфічної атомної структури. Кристал у зернистих агрегатах може й не мати форми поліедра (багатогранника), але й зерна, також як і уламки кристала, мають низку макроскопічних фізичних властивостей, які дають змогу відрізнити тверду кристалічну речовину від аморфної та склуватої речовини.

Поряд із окремими ограненими *індивідами* багато природних і синтетичних кристалічних речовин, таких як мінерали, різноманітні синтетичні сполуки, метали, сплави і т.п., утворюють *полікристалічні* агрегати кристалів різного розміру і неправильної форми. Найдрібніші мікроскопічні кристали називають кристалітами й мікролітами. Коли зерна кристалів в агрегатах мають те чи інше переважне орієнтування, тоді (у вузькому сенсі) в матеріалознавстві

говорять про наявність “текстури”. Структурно-текстурні особливості гірських порід (у ширшому сенсі) розглядають у курсі петрографії. Звичайно під структурою розуміють сукупність ознак окремих складових частин породи, мінералів, скла, а під текстурою – особливості співвідношень мінеральних агрегатів в окремих ділянках породи. Особливості агрегатів у структурах гірських порід визначаються особливостями розташування кристалів, із котрих породи утворені: розміром, формою та взаємним розміщенням індивідів, особливостями взаємодії цих кристалів під час росту. Для того, щоби підкреслити відмінність від мозаїчних кристалів і полікристалів, окремі бездефектні ділянки великих кристалів звичайно називають монокристалами, або моноблоками.

Кристалічний стан звичайно відрізняють від інших різновидів “твердого” стану (склоподібного, аморфного) за рентгенограмами речовини. Скло замість кристалів можна отримати шляхом пришвидшеного охолодження розплавів. Аморфізація кристалів можлива під впливом іонізуючого випромінювання (з переходом у метамікний стан). Ізотропізація кристалів і утворення діаплектичного скла може відбуватися ще внаслідок надтонкого подрібнення, деформації та переплавлення кристалів при ударному метаморфізмі в астроблемах.

Останнім часом дуже багато уваги приділяється ультрамікроскопічним об’єктам, так званим **нанокристалам** (нанофазам) із розміром індивідів близько 1–20 нм (у кожному разі менше 100 нм). Нанометр дорівнює 10^{-9} м, 10^{-6} мкм (мікронів), 10^{-3} мм або 10 Å. Такі нанооб’єкти як **квазікристали** суттєво відрізняються своєю внутрішньою структурою від кристалів і мікрокристалів.

У звичайних кристалах їх зовнішня форма підпорядкована тяжінню до мінімуму поверхневої енергії при періодичній *трансляційній* внутрішній будові кристалічної структури. Строго витримана трансляційна будова суперечить появі в кристалах осей симетрії L_5 , L_7 та вищих порядків і утворенню таких геометрично правильних простих форм, як додекаедр (дванадцятигранник) й ікосаедр (двадцятигранник) з осями L_5 .

Зі зменшенням розміру мікрокристалів до нанорівня при тій же масі речовини відбувається суттєве збільшення питомої поверхні квазікристалів і з’являється надлишкова поверхнева енергія. Вона змінює навіть закономірності розташування атомів у структурі квазікристалів. У них порушуються класична трансляційна періодичність в деяких напрямках. У цих напрямках періоди ідентич-

ності змінюються і коливаються (модулюються), закономірно то збільшуючись то зменшуючись. У таких рядах структура стає *аперіодичною*, хоча й ідеально впорядкованою зі збереженням дальнього порядку. Як наслідок, плоскі сітки у структурі квазі-кристалів будуються не з ідеально підігнаних один до одного паралелограмів різної форми, а в сітках з'являються прогалини: сітки будуються з незвичної комбінації правильних *пентагонів* із прилеглими ромбами двох сортів. Ці фрагменти закономірно повторюються у просторі з появою заборонених у кристалах осей L_5 , і несподіваним утворенням додекаедрів та ікосаедрів, неможливих у звичайних кристалах. Відомі також квазікристали з осями L_8 , L_{10} , L_{12} .

Таким чином, тепер поряд із звичайними макро- та мікро-кристалами з **періодичною** трансляційною структурою стали відомі квазікристали нанорозмірів з **аперіодичною**, але закономірною структурою. Квазікристали та інші наноб'єкти з їх несподіваними фізичними властивостями тепер широко застосовуються поряд із кристалами у новітніх інноваційних нанотехнологіях (нанорозмірні джерела лазерного випромінювання, сонячні батареї та інше, а в майбутньому – суперкомп'ютери та нанороботи).

НАЙВАЖЛИВІШІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ

Кристалами називають тверді тіла, які мають трансляційну тривимірну-періодичну атомну структуру і здатні самоогранятися в умовах вільного росту (коли їхньому росту не заважають сусідні кристали). Ограновані кристали й зернисті агрегати виникають у ході мінералотвірних процесів у природних умовах (на Землі й інших космічних об'єктах), або як синтетичні кристали, які вирощують у лабораторіях.

Головні макроскопічні ознаки кристалічної речовини в кінцевому результаті є наслідком тривимірної-періодичної атомної будови. Такими найбільш загальними макроскопічними властивостями, окрім *здатності самоогранятись* та *однорідності*, є *анізотропія* і *симетрія* кристалічної речовини.

Ще однією особливістю кристалів є мінлива швидкість росту граней, яка залежить від кінетики процесів адсорбції атомів (поглинання їх поверхнею кристала з мінералотвірного середовища). Атоми осаджуються в місцях із максимальною енергією адсорбції. Тут важливими є *кінетичні властивості* різних дефектів у реальних

кристалах і деталей мікрорельєфу (скульптурних ускладнень, зломів у двограних сходинках і різних дислокацій). У кристалах мають місце теплові коливання атомів, котрі підсилюються зі зростанням температури, що суттєвим чином впливає на фізичні властивості кристалів. При деяких температурах теплові коливання стають настільки великими, що призводять до фазових переходів у твердому стані або до плавлення чи переходу в газову фазу. Фазовий стан залежить, звичайно, і від зовнішнього тиску. Властивості кристала визначаються також його електронами, тобто електронним енергетичним спектром, взаємодією електронів з фотонами і т.д.

Однорідність кристалічної речовини. Поняття макроскопічної однорідності означає, що в будь-яких ділянках кристалічної речовини певного складу всі її властивості тотожні. Якщо в будь-якому місці монокристала вирізати однаково орієнтований зразок певної форми та розмірів, то будь-які його властивості – фізичні (оптичні, механічні, теплові та ін.), фізико-хімічні (розчинність поверхні, адсорбція на ній тих чи інших речовин) та інші – будуть однаковими.

З умови однорідності кристалічної речовини випливає сталість в об'ємі кристала його хімічного складу і фазового стану. Поняття макроскопічної однорідності дає змогу розглядати кристалічну речовину як безперервне однорідне середовище (континуум). Однорідність є неминучим наслідком ґратчастої будови кристалів. Необхідно, однак, мати на увазі, що однорідність кристалів дуже часто може бути порушена сторонніми забрудненнями й ізоморфними домішками, адсорбованими під час росту кристалів, або включеннями, перекритими наростаючими на грані пізнішими шарами. У включення нерідко може бути захоплений розчин або розплав, у якому росте кристал. Включення створюють у кристалі плями і прошарки – “фантоми”. Сторонні включення та несумірні атомні домішки часто навіть викривлюють кристалічну ґратку. Виникає неповна паралельність шарів, наростаючих один на одного. Все це створює відхилення від однорідності, викликає недосконалість кристалів і різні типи дефектів.

Важливим є, звичайно, вивчення різних форм відхилень від досконалості *реальних* кристалів, але вивчення і дослідження цих дефектів можливе лише після ознайомлення з головними властивостями *ідеальних* кристалів. Та чи інша локальна неоднорідність реальних кристалів не є характерною властивістю і рисою кристалів

загалом. Таким чином, *кристалічна однорідність є специфічною властивістю ідеальних кристалів.*

Поняття однорідності реальних кристалів у наш час використовують не лише в теорії кристалографії, але й на практиці. Однорідність майже завжди є головним критерієм якості синтетичних кристалів. При цьому залежно від технічного призначення кристалів беруть до уваги конкретні показники потрібної однорідності, наприклад, за домішками, блоковістю, дислокаціями. Поняття макроскопічної однорідності застосовують не лише до кристалів, але й до рідин, аморфних тіл і газів.

Анізотропія кристалічної речовини. Специфічність кристалічної речовини і відмінність її від інших станів проявляються, якщо розглядати їхню векторну характеристику – анізотропію. Деякі властивості кристалів скалярні, тобто не залежать від напрямку (питома вага, щільність, температура та інші). У той же час багато властивостей (наприклад, теплопровідність, діелектрична і магнітна сприйнятливність, спайність, твердість, показник заломлення світла та інші) суттєво залежать від напрямку, стосовно якого вони визначені. Якщо є залежність властивостей від напрямку, то така залежність називається *анізотропією*. Усі кристали стосовно хоча б деяких їхніх властивостей обов'язково анізотропні.

Якщо властивість речовини не змінюється залежно від напрямку, то кажуть, що речовина *ізотропна* щодо цієї властивості. Звичайні рідини й гази ізотропні щодо всіх властивостей, а кристали можуть бути ізотропними лише щодо деяких властивостей. Наприклад, кристали кубічної сингонії оптично ізотропні, але механічні й інші властивості в різних напрямках у них проявляють анізотропію.

Анізотропія проявляється вже у зовнішній формі багатьох кристалів, наприклад, у їхньому видовженні або сплюсненні. Вона наочно проявляється у механічних властивостях, наприклад, у різній поперечній і повздовжній твердості кіаніту (дістену) або у спайності слюд, польових шпатів, кальциту, флюориту – здатності цих кристалів легко розколюватись уздовж певних площин. Деформація кристалів також суттєво залежить від напрямку.

Відмітимо, що анізотропія властива не лише кристалам. Вона зберігається в кристалічних “текстурах”, притаманна рідким кристалам, природним і синтетичним полімерним речовинам, виникає в деформованому склі. Наприклад, анізотропія спостерігається у мезоморфних рідинах (рідких кристалах), структура яких побудована

з видовжених молекул, певним чином орієнтованих в об'ємі рідких кристалів. Уздовж і поперек цих молекул показники заломлення в цих рідинах різні. Анізотропія цих речовин, як і кристалів, переважно визначається їх атомною або молекулярною будовою і не обов'язково потребує відмінності всіх властивостей у всіх напрямках.

Здатність до самоогранування кристалів. Крім “внутрішніх” властивостей однорідності й анізотропії, як згадувалося вище, кристалічна речовина має ще одну найбільш наочну макроскопічну властивість: кристали у процесі вільного росту при рівноважних умовах набувають форми багатогранників із плоскими гранями. Розглядаючи цю макроскопічну властивість, ми переходимо від кристалічної речовини як неперервного нескінченного середовища (континууму) до кінцевого тіла – огранованого кристалічного індивідуума, побудованого з цієї речовини. Згідно з правилом Браве, утворювані реальні грані кристалічних поліедрів відповідають плоским сіткам структури з максимальною ретикулярною щільністю, тобто з максимальною кількістю атомів на одиниці площі. При адсорбції атомів на поверхню кристала виділяється енергія. Тому кристали мають **мінімальну внутрішню енергію** (порівняно з рідинами й газами).

Якщо вирізати з кристала кулю і помістити її у пересичений розчин даної речовини, куля буде рости. Але у зв'язку з її гратчастою будовою сферична форма кулі не зберігається. Ділянки поверхні кулі, що збігаються з плоскими сітками малої ретикулярної густини, швидко заростають. На поверхні з'являється порівняно невелика кількість ділянок, які відповідають граням із більшою ретикулярною густиною. Більшість із них у подальшому під час вільного росту кристала також швидко заростають. Куля перетворюється на багатогранник аналогічно тому, як на рис. 5 у перетині кристала коло перетворюється на багатокутник. Здатність кристалів самоогранюватись є наслідком їхньої гратчастої будови і сил міжатомної взаємодії у поверхневому шарі кристала. Залишаються грані з мінімальною поверхневою енергією в даних умовах росту.

Відновлення в умовах росту багатогранної форми кристала – обточеного, зламаного або частково розчиненого – називається *регенерацією* кристалів.

Оскільки зовнішня форма кристалів у першу чергу є відображенням їхньої внутрішньої кристалічної структури, було зроблено багато спроб пояснити виникнення на кристалі тих чи інших

граней. Найбільше визнання дістало припущення О. Браве про те, що *грані кристалів ростуть зі швидкостями, обернено пропорційними густині їхніх вузлових сіток – ретикулярній густині* (закон Браве). Тому грані з малою ретикулярною щільністю швидко заростають і виклинюються, а грані, густо зайняті атомами, залишаються.

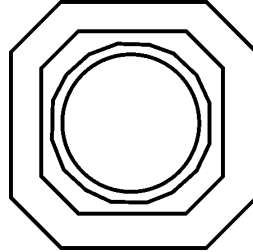


Рис. 5. Куля, вирізана з кристала, під час росту в розчині перетворюється на багатогранник

Згідно цьому законові, мінімальні швидкості росту мають грані, паралельні тим атомним сіткам у структурі кристала, міжплощинна відстань d між котрими найбільша, а відповідно, сила зв'язку між цими сітками найменша (рис. 6). Саме ці грані частіше утворюють огранування кристала, тому що адсорбція ними атомів із кристалоутворювального середовища відбувається повільніше. Саме ці грані, утворені найбільш щільно упакованими атомними сітками, і мають найбільшу ретикулярну щільність.

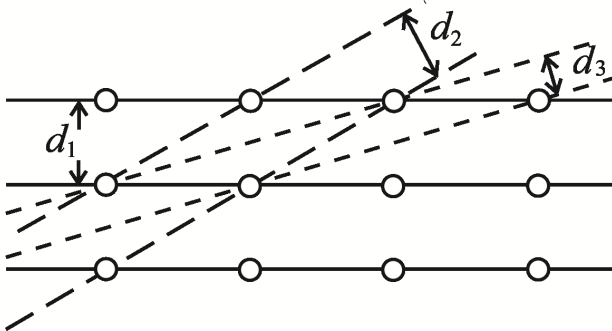


Рис. 6. Схема, яка ілюструє різні міжплощинні віддалі d у структурі кристала: $d_1 > d_2 > d_3$. Вірогідніше утворення граней, які відповідають сіткам з d_1

На поверхні кристала між частинками діють два типи сил: *тангенційні*, тобто сили між частинками в межах атомарного шару, та *нормальні*, що діють у напрямку, перпендикулярному до шару.

Швидкість росту грані, де переважають тангенційні сили, невелика. Грані, які характеризуються меншою ретикулярною щільністю, ростуть із більшою швидкістю за рахунок переважання в них нормальних сил. Звідси можна зробити висновок про те, що кристал ограняється гранями з найбільшою ретикулярною густиною (це інше формулювання закону *Браве*).

Поряд із тим, огранування кристалів залежить не тільки лиш від особливостей внутрішньої структури. У процесі росту суттєву роль відіграє взаємодія поверхні кристала з зовнішнім середовищем, з якого він був утворений або в яке був перенесений. Унаслідок зміни умов кристалізації (температури, тиску, складу мінералотвірного середовища, появи домішок) часто змінюється й форма кристалів. Тому один і той самий мінерал може набути різного огранування. В енергетичному плані реальні грані кристала відповідають плоским сіткам структури з мінімальною поверхневою енергією (закон Кюри-Вульфа).

Самоогранування кристалічних індивідів відбувається у рамках збереження принципів однорідності, анізотропії та симетрії. Як і ці принципи, огранування є проявом внутрішньої атомної будови кристалічної речовини.

Симетрія кристалів – це симетрія їхньої трансляційної внутрішньої будови. Оскільки будова кристалів підпорядкована просторовій ґратці, а остання завжди симетрична, то всі кристали – тіла симетричні. Є низькосиметричні кристали, яким притаманні лише трансляції, а є більш високосиметричні кристали з іншими додатковими елементами симетрії.

Усі суттєві особливості симетрії кристалів узгоджені з геометричними законами кристалографії. Морфологічні особливості кристалів підпорядковані таким геометричним законам кристалографії: закону сталості відповідних гранних і реберних кутів, законам симетрії кристалів, закону цілих чисел, закону зон (або поясів), які викладені у відповідних розділах. Геометричним законам кристалографії підкоряються всі без винятку кристали і тільки лиш кристали. *Ці закони відображають специфічні особливості кристалів.*

Питання для самоконтролю

У чому полягає тривимірна періодичність у будові кристалів?
Чим відрізняється просторова ґратка від кристалічної?

У чому полягає закономірність розташування вузлів у рядах, плоских сітках і елементарних комірках (паралелепіпедів повторюваності) структури кристалів?

У чому полягають особливості дальнього та ближнього порядку в будові кристалів?

Що таке нанофази і квазікристали? У чому полягає аперіодичність і закономірність будови квазікристалів?

Які найважливіші властивості характеризують кристалічні тіла? Які речовини називають ізотропними й анізотропними?

Чому кристали мають мінімальну внутрішню енергію?

Які грані залишаються при самоогрануванні кристалів?

ТЕМА 2 ЗАКОН СТАЛОСТІ КУТІВ

Під час росту кристала на гранях відкладаються паралельні шари, і грані переміщуються паралельно самим собі. Швидкість наростання навіть однакових за будовою граней унаслідок нерівномірного живлення з різних боків може змінюватись. Залежно від цього змінюється відносний розмір граней, їх форма і навіть число. Якись грані виклинюються, а якись розростаються. Як наслідок, змінюється (спотворюється) зовнішній вигляд (обрис) самого кристала. Але при всіх цих змінах взаємний нахил граней залишається незмінним. Завдяки паралельному переміщенню граней кути між двома *відповідними* гранями є постійними.

Різні кристали однієї речовини з однаковою структурою неоднакові як за розміром, так і за зовнішньою формою. На рис. 7 показані деякі форми кристалів природного кварцу. Ми бачимо, які вони різноманітні. Але в різних кристалах однієї речовини й однієї ж будови, незважаючи на розмаїття зовнішніх форм і розмірів, міжгранні кути між відповідними гранями залишаються сталими. *Відповідними* гранями у різних кристалах називають грані, що відповідають однаково орієнтованими плоскими сітками кристалічної структури. Кут між вертикальними сусідніми гранями m і m (рис. 7) у всіх кристалах кварцу однаковий (дорівнює 120°). Також постійними є кути між гранями m і r , r і z і т.д. Залишаються постійними також кути між відповідними ребрами кристалів.

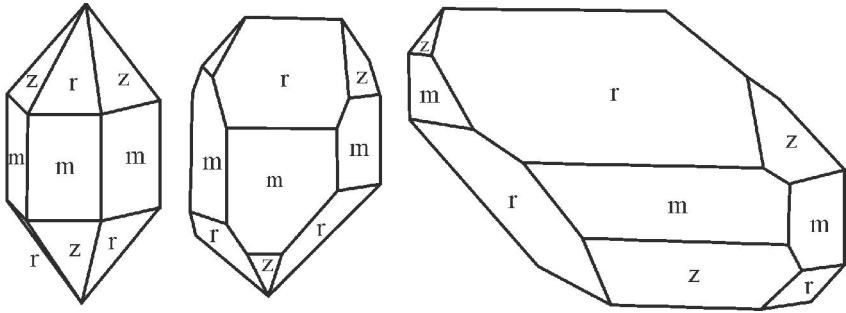


Рис. 7. Три кристали кварцу з різним розвитком відповідних граней

У цьому й полягає закон сталості гранних і реберних кутів. Він формулюється таким чином:

У всіх кристалах даної речовини і даної будови (структурної модифікації) кути між відповідними гранями (і ребрами) за даних умов постійні.

Закон сталості гранних і реберних кутів є наслідком кристалічної будови речовини. Оскільки грані кристалів паралельні плоским сіткам просторових ґраток і просторові ґратки у всіх кристалах однієї і тієї ж будови однакові, то мають бути однаковими, постійними й кути між гранями, що відповідають однаковим плоским сіткам у різних кристалах. Ребра кристала паралельні рядам просторових ґраток, а тому і кути між однаковими ребрами також постійні для всіх кристалів даної речовини з даною структурою.

Необхідність говорити про дану будову кристалічної речовини впливає з того, що одна й та сама речовина може кристалізуватись не в одній, а у двох або кількох структурних (поліморфних) модифікаціях, які утворюються в різних термодинамічних умовах. Зрозуміло, що форма і кутові співвідношення між гранями будуть різними у різних мінералах вуглецю (графіту й алмазу) або у кварцу, тридиміту й кристобаліту (SiO_2). Для кристалів різної будови рівність кутів можлива лише в деяких випадках (наприклад, у різних кристалах кубічної сингонії).

Під час зміни температури і тиску кристали проявляють анізотропію коефіцієнтів розширення та стискування. Тому відстань між частинками в непаралельних рядах просторових ґраток може змінюватися неоднаково. Це викликає деякі коливання в кутах між відповідними гранями залежно від температури й тиску. Такі коливання є дуже незначними. Наприклад, у кристалах кварцу кут між гранями позитивного та негативного ромбедрів зменшується

лише на 13' внаслідок підвищення температури від -166 до $+575$ °C. Наявність цих коливань зобов'язує вказувати на сталість кутів лише за однакових температур і тиску.

Закон сталості міжреберних (і, відповідно, міжгранних) кутів був встановлений вперше у 1669 р. датським вченим Н.Стено (Nicolaus Steno, 1638–1687), який вивчав форму кристалів двох мінералів – кварцу SiO_2 і гематиту Fe_2O_3 . У 1783 р. французький мінералог Роме де Ліль (Romé de L'Isle, 1736–1790) на прикладі багатьох інших кристалів різних речовин довів справедливість цього закону. При цьому Роме де Ліль встановлював рівність кутів не на око, як це робив Стено, а за допомогою особливого приладу для вимірювання кутів – *дотичного гоніометра*, який винайшов його помічник механік М. Каранжо. Роме де Ліль назвав закон сталості гранних кутів законом Стено. Ця назва й залишилась у науці.

Закон сталості кутів є першим законом геометричної кристалографії. Він відіграв видатну роль в історії розвитку кристалографії. Цей закон і пов'язане з ним вимірювання кутів кристалів дали змогу застосовувати до кристалів закони геометрії, котрі лягли в основу всієї геометричної кристалографії. Відкриття такої характерної особливості кристалічних багатогранників, спільної для всіх кристалів даної речовини, спрямувало думку дослідників на пошук внутрішніх факторів утворення кристалічних багатогранників, на залежність їх форми та властивостей від внутрішньої будови кристалів. У цьому зв'язку закон сталості гранних кутів відіграв видатну роль, що сприяло подальшому розвитку науки про кристали.

Безпосередньо після того, як Роме де Ліль довів правильність закону сталості кутів, вже у наступному, 1784 р. його співвітчизник Р.Ж. Аюї (1743–1822) відкрив другий, важливіший закон геометричної кристалографії – закон цілих чисел, відомий як закон Аюї.

ГОНІОМЕТРИЯ. ГОНІОМЕТРИ ТА ЇХ ТИПИ

Дослідження морфологічних особливостей ще не вивчених кристалів починають із гоніометричного обстеження, тобто з вимірювання кутів між його гранями за допомогою спеціальних приладів – *гоніометрів*. Вимірювання кутів між гранями кристалів є першим кроком для визначення їхньої симетрії та взаємо-

відношення параметрів елементарної комірки кристалічної ґратки. Дані щодо симетрії кристалів, доповнені іншими даними, послідовно призводять до визначення речовини й пізнання її будови на атомному рівні.

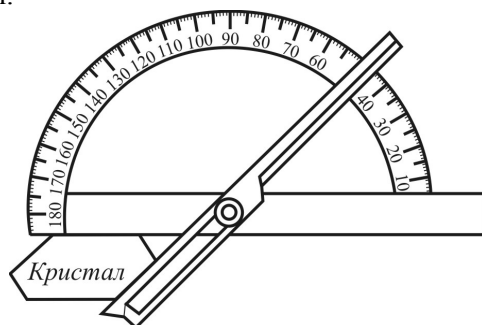


Рис. 8. Дотичний (прикладний) гоніометр

У 1772 р. механік Каранжо сконструював прилад для вимірювання кристалів. Гоніометр (кутомір) Каранжо, або *прикладний (дотичний) гоніометр* (рис. 8) складається з двох металевих лінійок, з'єднаних шарніром. Для вимірювання міжгранних кутів кристала, його затискають так, щоби лінійки щільно прилягали до певних граней. Площина лінійок при цьому має розміщуватися перпендикулярно до ребра на перетині цих граней. Кут між гранями відраховують між правим краєм горизонтальної лінійки транспортира та оберненим до неї краєм похилої шарнірно з'єднаної лінійки.

Дотичним гоніометром можна вимірювати лише кристали достатньої величини (приблизно не менше сантиметра в перетині). Точність вимірювань не перевищує $0,5^\circ$.

У 1809 р. У.Х. Волластон (1766–1828) винайшов *відбивний гоніометр*. Грані кристалів, особливо дрібних, які, як правило, більш досконалі, ніж крупні, чудово відбивають видимі промені світла. На здатності граней відбивати світло і заснований пристрій відбивних гоніометрів.

Принцип вимірювання кутів за допомогою відбивних гоніометрів полягає у такому (рис. 9). До середини металевого кола з градуйованими поділками (лімба) прикріплюють кристал. Лімба разом із кристалом може обертатися на будь-який кут. За допомогою ноніуса проводять підрахунки кутів обертання. На кристал падає промінь світла від джерела (лампи). Промінь, відбитий від однієї з граней, потрапляє в зорову трубу. Після того,

як відбитий від грані промінь потрапляє в зорову трубу, беремо відлік по ноніусу. Такі ж відліки беремо після відбиття проміння від інших граней. Ребро між ними суміщується з віссю обертання гоніометра. Далі розраховуємо кути між нормальми до граней.

Точність вимірювань на відбивних гоніометрах досягає 1'. Для вимірювань доступні дрібні та ускладнені скульптурно кристали розміром менше головки шпильки.

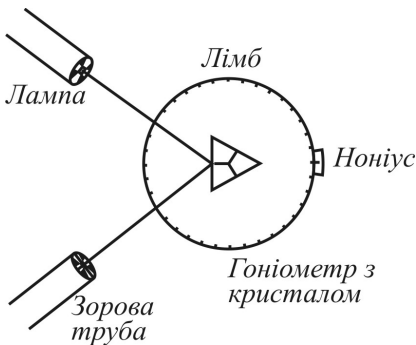


Рис. 9. Принцип вимірювання кутів між нормальми до граней одноколовим відбивним гоніометром

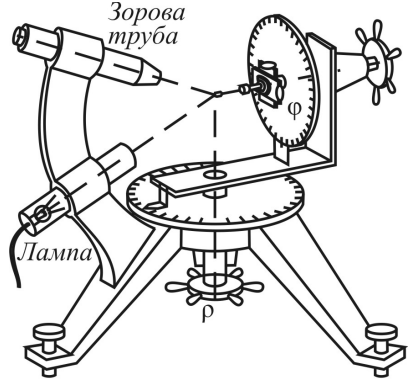


Рис. 10. Двоколовий відбивний гоніометр

Теодолітні (двоколові) відбивні гоніометри були винайдені в 1889 р. видатним кристалографом і петрологом Є.С. Федоровим (1853–1919). До Є.С. Федорова подобу двоколового гоніометра сконструював У. Міллер (1801–1880) із двох однакових гоніометрів. Схематичне зображення двоколового відбивного гоніометра подано на рис. 10. Тут є два лімби – вертикальний і горизонтальний. Вертикальний лімб обертається навколо осі φ , котра сумісно з горизонтальним лімбом обертається навколо осі ρ . Обертанням навколо двох осей будь-яку грань кристала (крім граней, обернених до кристалоносця) можна поставити в таке положення, при якому промінь, відбитий від грані, потрапляє в зорову трубу. Таке положення кожної грані відмічають по вертикальному й горизонтальному лімбах двома сферичними координатами – кутами φ і ρ . Кут φ називається довготою (подібний географічній довготі). Кут ρ називають полярною відстанню, це кутова відстань від полюса. Він замінює географічну широту. За цими двома координатами положення кожної грані (точніше – положення перпенди-

кулярів до граней, тобто полюсів граней) може бути відмічене на глобусній сітці або спроектоване на екваторіальну площину. За даними φ і ρ визначають графічно або обчисленнями кути між гранями та інші геометричні властивості кристалів.

У наш час головним методом геометричної кристалографії є рентгенівський, а гоніометрію, яка відіграла провідну роль до відкриття рентгенівської дифракції, застосовують переважно лише для опису зовнішньої форми кристалів і особливостей скульптури граней. Особливості ускладнень мікрорельєфу граней виявляють також за допомогою *фотогоніометрії*. Цей метод дає змогу за допомогою світлових картин, відбитих від кристала на фотоплівку, додатково фіксувати особливості плоскогранних і викривлених мікроповерхонь, які утворюють штрихування, пагорбки, ямки та інші мікроскульптурні ускладнення граней.

СФЕРИЧНІ, СТЕРЕОГРАФІЧНІ ТА ГНОМОСТЕРЕОГРАФІЧНІ ПРОЕКЦІЇ

Після вимірювання кристалів на гоніометрії результати звичайно зображують на площині у вигляді тієї чи іншої проекції. Це значно полегшує вивчення геометричних властивостей кристалів – визначення їхньої симетрії, форм та інше. Є багато різних проекцій, котрі використовують залежно від поставленої мети. Для наочного зображення зовнішнього вигляду кристала на листку паперу використовують центральні та паралельні *перспективні проекції*, подібні до фотографій і малюнків кристалів. Але на таких зображеннях спотворюються реальні кутові співвідношення між ребрами фігур. Щоб визначити справжні кутові співвідношення між ребрами та гранями кристалів, використовують *графічне проектування* (сферичні, стереографічні, гномостереографічні та гномонічні проекції).

У *сферичній проекції* передбачається, що центр кристала розміщують у центрі сфери, як показано на рис. 11. Із загального центру проводять лінії, перпендикулярні (нормальні) кожній грані кристала. Ці лінії продовжують до перетину зі сферою. Кожна з нормалей до граней кристала представлена на сфері відповідною точкою, яка називається *полюсом грані*. Всі грані, полюси котрих лежать на одному великому колі сферичної проекції, належать до однієї *зони (поясу)* кристала (рис. 11). Зауважимо, що грані одного поясу перетинаються по паралельних, дійсних (та можливих)

ребрах. Кутів взаємовідносини між гранями кристала повністю зберігаються на сферичній проекції. Кути на сфері між полюсами граней відповідають кутам між перпендикулярами до граней. Вони є додатковими до внутрішніх кутів між гранями кристала.

Сферична проекція кристала наочна, але для практичного застосування вона незручна. Головна незручність сферичної проекції – це те, що її поверхня об'ємна. Тому зручніше її показати на площині за допомогою якоїсь іншої проекції. Для перетворення сферичної проекції на плоску користуються звичайно двома методами: одним із них є стереографічна, а другим – гномостереографічна проекція.

Сферична проекція може бути перетворена на плоску (двовимірну) **стереографічну проекцію** таким чином. Спочатку розсікаємо сферу екваторіальною площиною (рис. 12). Вона слугуватиме площиною стереографічної проекції. Проектування здійснюють за допомогою променів, проведених з північного або південного полюса до конкретної точки на сфері. У даному випадку (для точок, розміщених у північній півкулі) задіяний південний полюс S . Промені, які поєднують точку S із полюсами граней на сфері, перетинаючи екваторіальну площину стереографічної проекції, дають на ній відповідну кількість точок, котрі й становлять стереографічну проекцію полюсів граней або інших напрямків кристала.

Полюси вертикальних граней потрапляють на лінію екватора. Як наслідок, ці полюси на сферичній проекції тут збігаються з полюсами на стереографічній проекції. Кожна точка на стереографічній проекції відповідає конкретному напрямкові (вектору).

Отже, *нормаль* до горизонтальної грані й інші вертикальні лінії (наприклад, вертикальна вісь симетрії та вертикальні ребра кристала) проектується в центрі стереографічної проекції. Нормалі до вертикальних граней та інші горизонтальні напрямки виявляються на екваторіальній лінії. А нормалі до похилих граней та інших нахилених ліній проектується в полі стереографічної проекції. Полюси більш круто орієнтованих граней будуються ближче до лінії екватора, а пологіші грані – ближче до центра стереограми.

Полюси граней, розташованих у південній півкулі, проектується за допомогою променів, які йдуть з північного полюса N на їх перетинах з екваторіальною площиною. Ці напрямки на стереографічній проекції відмічаються хрестиками. Стерографічна

проекція горизонтальної площини збігатиметься з екваторіальним колом проекції.

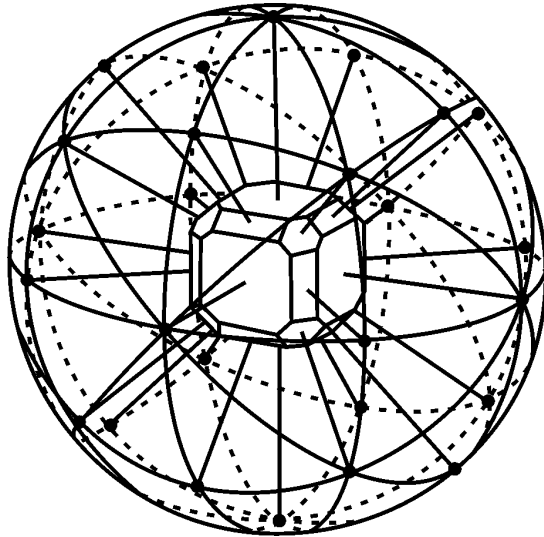


Рис. 11. Сферична проекція граней (точки) і поясів (великі кола) на поверхні сфери

Стереографічною проекцією похилої *площини*, що проходить через центр сфери, буде якась дуга великого кола, яка спирається на певний діаметр екваторіального кола. По мірі збільшення кута нахилу даної площини до екваторіальної кривизна відповідних дуг буде зменшуватись. У граничному випадку з вертикальною площиною одержимо пряму лінію, яка є діаметром екваторіального кола проекції.

За законом Стено, найбільш суттєвим у зовнішньому огрунванні кристала є не розмір граней і не їх окреслення, а кути між гранями й ребрами, котрі зберігаються й на стереографічних проекціях кристалів.

Відомо, що стереографічна проекція має дві властивості, котрі відіграють важливу роль під час проектування кристалів:

1) коло, проведене на сфері, зображується на стереографічній проекції також колом;

2) кут між двома дугами великих кіл на сфері дорівнює куту між відповідними стереографічними проекціями тих самих дуг.

Проектувати грані кристала у вигляді дуг і прямих ліній незручно, оскільки така стереограма виявиться перевантаженою лініями, особливо для багатогранних кристалів. Вона буде недо-

статньо інформативною за рахунок перекривання дуг верхніх і нижніх граней та елементів симетрії кристала. У цьому випадку на допомогу приходить **гномостереографічна проекція** (від грецького γῶμων (*гномон*) – перпендикуляр). Гномостереографічною проекцією *граней* є проекція перпендикулярів (нормалей) до них, тобто будується проекція полюсів граней, а не їхніх площин. А гномостереографічною проекцією *ребер* (та інших напрямків) є проекція нормальних до них площин. Але для проектування осей і площин симетрії завжди використовують лише стереографічні проекції.

Таким чином, для побудови власне стереографічної проекції кристала спочатку його грані та ребра подумки суміщають із центром сфери. Далі знаходять лінії й точки їхнього перетину з поверхнею сфери. Тобто спочатку отримують їхні сферичні проекції. Після цього за допомогою променів зору на стереографічній проекції будують відповідні точки граней і лінії ребер та інших площин і напрямків.

У разі гномостереографічної проекції грані замінюють нормалями до них, а ребра замінюють нормальними до них площинами. При продовженні цих нормалей і площин до перетину зі сферою грані дають на сфері точки (полюси граней), а ребра – лінії. Точки та лінії проектується на горизонтальну площину стереографічної проекції, яка збігається з екваторіальною площиною сфери. Отже, гномостереографічна проекція граней – те саме, що стереографічна проекція нормалей до граней (полюсів граней).

Таке проектування граней, засноване на законі сталості кутів, дає змогу фіксувати не лише положення кожної грані (її нормалі) сферичними координатами φ і ρ , але й розміщення граней кристалів щодо його елементів симетрії. Справді, під час росту кристала грані переміщуються паралельно самим собі. При цьому змінюється розмір грані, що росте. Сталим під час росту залишається напрямок її росту, тобто напрямок нормалі до грані. Нормаль до грані фіксує її при побудові гномостереографічної проекції.

В обох випадках для позначення грані достатньо вказати її широту і довготу (рис. 13). Довгота – кристалографічна координата φ – відповідає куту, який вимірюють за годинниковою стрілкою у градусах величиною екваторіальної дуги між нульовим меридіаном ($\varphi = 0$) і меридіаном, що проходить через сферичну проекцію полюса грані (рис. 13, *б*). Широта – координата ρ , яку називають *полярною відстанню* й відраховують від “північного полюса” N по

меридіану, що проходить через нашу точку, у напрямку до “південного полюсу” S . Координата φ змінюється у межах $0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$, а координата ρ – в межах $0^\circ \leq \rho \leq 180^\circ$. При цьому на “північному полюсі” $\rho = 0^\circ$, на екваторі $\rho = 90^\circ$, на “південному полюсі” $\rho = 180^\circ$.

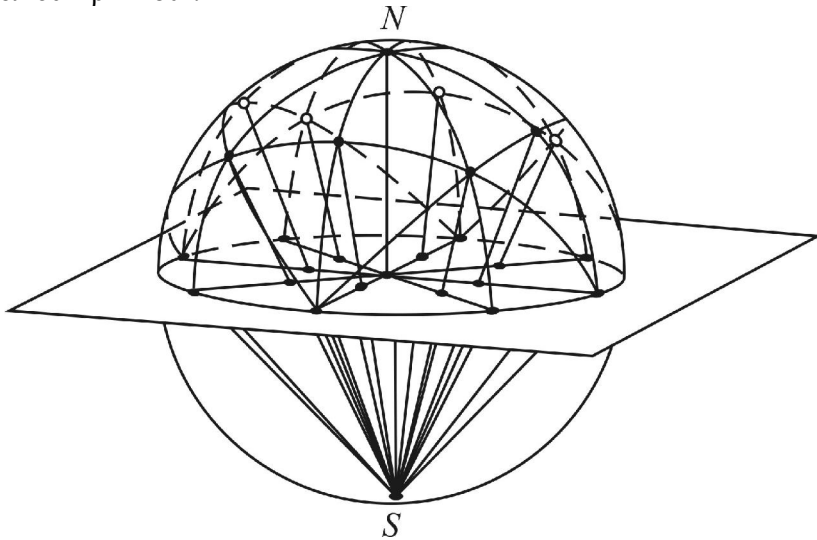


Рис. 12. Побудова стереографічної проекції напрямків у верхній напівсфері

Побудовані стереограми напрямків (полюсів граней) показані на рис. 13 знизу. Тут стереографічна проекція вектора, що виходить у верхній напівсфері, відмічена маленьким кружечком (\circ), а вектора у нижній напівсфері – хрестиком (\times). При цьому горизонтальні грані (нормалі до них вертикальні!) проєктують у центр кола проєкцій ($\rho = 0^\circ$ і 180°), а вертикальні грані (нормалі до них горизонтальні, $\rho = 90^\circ$) – на коло. Проєкції нахилених граней розміщують усередині кола. Чим грань ближча до вертикальної ($\rho \rightarrow 90^\circ$), тим точка (проєкція грані) виявляється ближчою до екваторіального кола; і навпаки, чим грань більш полого ($\rho \rightarrow 0^\circ$), тим її проєкція виявляється ближчою до центру кола.

Слід ще раз підкреслити, що полюси всіх вертикальних граней (вони не верхні й не нижні!) розміщуються на лінії екватора; їх позначають лише кружечками. Якщо проєкції верхньої та нижньої граней на стереограмі потрапляють в одну точку, то кожна з них позначають відповідним значком: верхню – кружечком, нижню – хрестиком.

Таким чином, проектування кристалів проводять у два етапи: спочатку будують стереографічну проекцію його елементів симетрії, а потім на неї наносять гномостереографічні проекції граней (полюси граней).

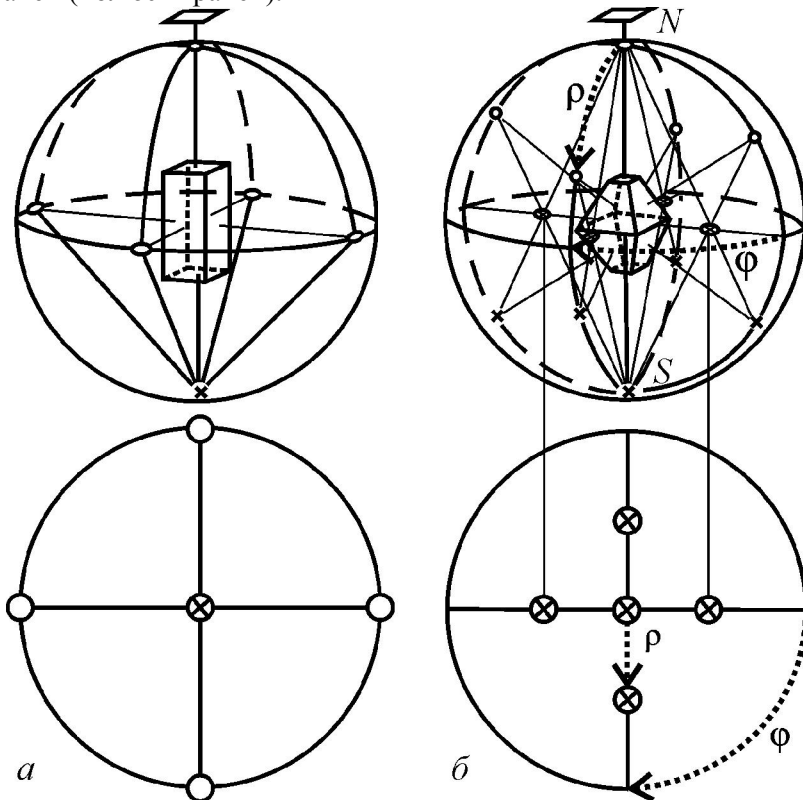


Рис. 13. Зверху сферичні проекції нормалей до граней кристалів. Знизу – відповідні гномостереографічні проекції граней (стереограми) комбінацій простих форм: *a* – тетрагональної призми й пінакоїда; *б* – тетрагональної дипіраміди й пінакоїда (ρ – полярна відстань і ϕ – довгота)

На рис. 13 для прикладу наведені стереограми кристалів зі симетрією L_4L_25PC ($4/mmm$). Гномостереографічні проекції чотирьох вертикальних граней тетрагональної призми (рис. 13, *a*) з горизонтальними нормалями до них потрапляють на екваторіальне коло проекції та позначаються кружечками. Проекції двох горизонтальних граней пінакоїда збігаються і виявляються в центральній точці. Кожна грань при цьому позначена своїм знаком: кружечком – грань верхньої напівсфери, хрестиком – грань нижньої напівсфери.

На рис. 13, б гномостереографічні проекції обох горизонтальних граней пінакоїда також потрапляють у центр кола проекції ($\rho = 0^\circ$ для полюса верхньої грані та 180° для нижньої). Але, оскільки нижня грань пінакоїда розміщена в нижній напівсфері, на стереограмі її позначають хрестиком, а верхню – кружечком. Нахилені грані тетрагональної дипіраміди проектуються всередині кола проекції. Нахил дипірамідальних граней щодо осі L_4 однаковий. Тому проекції верхніх і нижніх граней збігаються і перебувають на однаковій відстані від центра проекції. Четвірка верхніх граней тетрагональної дипіраміди позначена кружечками, а четвірка нижніх – хрестиками.

СІТКИ БОЛДИРЕВА ТА ВУЛЬФА

Для нанесення стереографічних проекцій полюсів граней з найбільшою графічною точністю (близько 1°) і графічного вирішення інших кристалографічних задач звичайно користуються так званими стереографічними сітками (рис. 14). На цих сітках методом стереографічного проектування нанесені лінії, які відповідають лініям паралелей і меридіанів глобусної сітки.

Якщо взяти точку зору в одному з полюсів глобусної сітки, то отримаємо *полярну сітку А.К. Болдирева* (рис. 14, а). На зображеній сітці лінії меридіанів і паралелей проведені через 10° . Сітка Болдирева зручна для безпосереднього нанесення полюсів граней та інших напрямків із відомими координатами φ і ρ . Відлік кута φ ведеться від нульового меридіана за годинниковою стрілкою до меридіана, на якому розташований даний напрямок. Відлік полярного кута ρ ведеться від північного полюса по меридіану до точки даного напрямку. На жаль, сітка Болдирева не дає змоги визначити кути між довільно розташованими полюсами граней та іншими напрямками. Тому для кристалографічних розрахунків використовують не полярну, а екваторіальну сітку, запропоновану Г.В. Вульфом.

Для побудови *екваторіальної сітки Вульфа* (рис. 14, б) точку зору розміщують на екваторі. Далі будують стереограму системи ліній, що утворюють звичайну глобусну сітку, тобто систему меридіанів і паралелей. Сітку проектують у вигляді стереографічної проекції на одну з меридіональних площин. Усі ці лінії проведені на стандартній сітці Вульфа через кожні 2° . На рис. 14, б представлена сітка Вульфа, в якій меридіани й паралелі проведені через 10° .

Прямими лініями на сітці Вульфа є лише проєкції екватора й одного з меридіанів. Полярний кут ρ відраховують від центру шаблону, якщо $0 \leq \rho \leq 90^\circ$, і від периферії шаблону до центру, якщо $90^\circ < \rho \leq 180^\circ$. Азимут φ відраховують на колі за годинниковою стрілкою від позначки $\varphi = 0^\circ$.

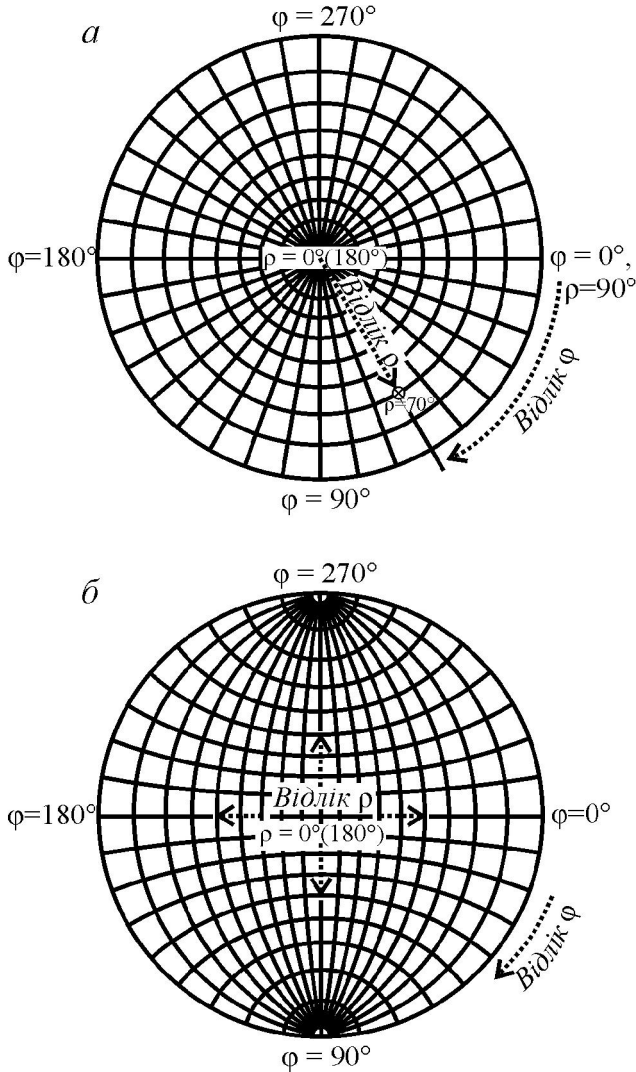


Рис. 14. Стереограма градусних сіток з точками зору на полюсі або на екваторі сфери: *a* – полярна сітка Болдирева; *б* – екваторіальна сітка Вульфа з напрямками відліку сферичних координат (φ, ρ)

Сіткою Вульфа користуються як допоміжним транспарантом, накладаючи на неї для нанесення проєкцій кальку або інший прозорий папір. На кальці фіксують коло проєкції, його центр – для початку відрахунку координати ρ і засічку біля нульового меридіана сітки (де $\varphi = 0^\circ$ і $\rho = 90^\circ$) – для відліку координати φ . Треба зауважити, що реальні меридіани й паралелі проходять так, як зображено на сітці Болдирева. Лінії меридіанів і паралелей, зображені на сітці Вульфа, є допоміжними. Тому нульовий меридіан в установці сітки Вульфа збігається з реальною екваторіальною лінією з $\varphi = 0^\circ$. Реальний меридіан з кутом $\varphi = 45^\circ$ на рис. 14, *a* зображений штриховою лінією.

Вирішення кристалграфічних задач на сітці Вульфа

Задача 1. Побудова стереографічної проєкції точки, заданої сферичними координатами φ і ρ .

На кальці, накладеній на сітку Вульфа, відмічають центр проєкції та відмітку позиції з $\varphi = 0^\circ$. Координату φ відраховують по колу сітки Вульфа за годинниковою стрілкою від нульового меридіана, після чого на кальці роблять відповідну відмітку на колі (на рис. 15, *a* кут $\varphi = 45^\circ$). Після цього, обертаючи кальку (без порушення центрування), суміщають відмітку, яка відповідає координаті φ , з горизонтальним або вертикальним діаметром сітки. Далі відкладають кут ρ від центру сітки по діаметру в бік відмітки (рис. 11, *б*), якщо координата $\rho \leq 90^\circ$ (на рис. 15, *б* кут $\rho = 60^\circ$). Аналогічним чином знаходять точку *b* (рис. 16, *б*). Якщо ж $\rho > 90^\circ$, то значення додаткового кута, що перевищує 90° , відкладають від кола (де $\rho = 90^\circ$) до центру проєкції (до точки *c* на рис. 16, *a*). Після цього кальку повертають у вихідне положення (рис. 15, *в* і 16, *б*).

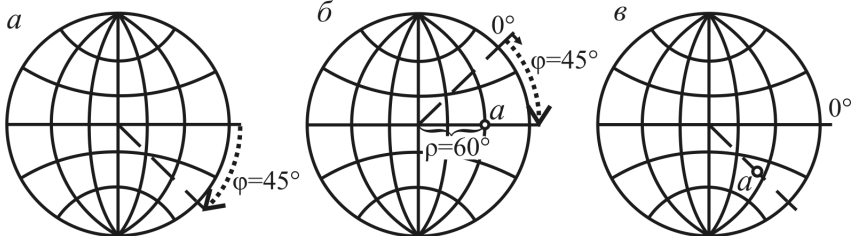


Рис. 15. Проектування напрямку *a* з заданими координатами φ і ρ , де *a* (45° , 60°), в полі проєкції: *a* – відлік координати φ ; *б* – відлік координати ρ ; *в* – знаходження точки *a* в полі проєкції у початковій орієнтації

Одержані таким чином точки *b* і *c* (рис. 16, *б*) є або стереографічними проєкціями напрямків, або гномостереографічними проєкціями граней, заданих їхніми сферичними координа-

тами. При цьому слід пам'ятати, що проекцію грані верхньої напівсфери (наприклад, грані b) позначають кружечком, а нижньої (грані c) – хрестиком. Вертикальні грані проектують на коло, – кружечками. Крім того, кожній точці (грані) присвоюють номер або позначення літерою.

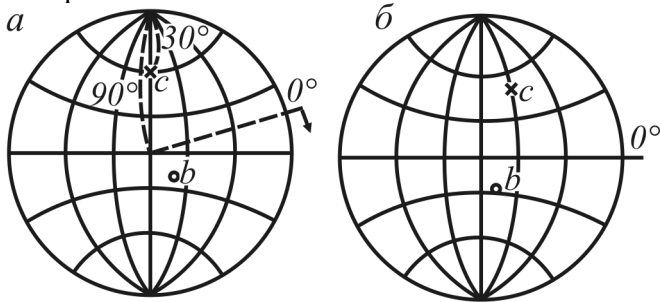


Рис. 16. Проектування напрямку c з заданими координатами φ і ρ , де c (287° , 120°): a – відлік координати ρ_c ($90^\circ + 30^\circ$); b – стереограма напрямків b і c

Задача 2 (зворотна). *Визначення сферичних координат точки, заданої своєю стереографічною проекцією.*

Обертанням кальки (з фіксованим центром і початком підрахунку кута φ) розташовуємо задану точку на один із діаметрів сітки Вульфа. Відраховуємо її координату ρ від центру сітки по діаметру і ставимо на колі відмітку положення ρ у напрямку даної точки. Далі повертаємо кальку у вихідне положення і відраховуємо координату φ по колу сітки від нульового меридіана ($\varphi = 0^\circ$) за годинниковою стрілкою до відмітки.

Задача 3. *Дано проекції полюсів двох граней. Знайти пояс, до якого вони належать.*

Проводимо головне коло, відмічаємо центр шаблону й будуємо на кальці обидві задані проекції полюсів граней. Потім обертаємо кальку доти (без порушення центрування!), поки обидва полюси граней не потраплять на один меридіан сітки Вульфа. Ця лінія є шуканим поясом (рис. 17).

Задача 4. *Дано два полюси граней. Визначити кут між ними.*

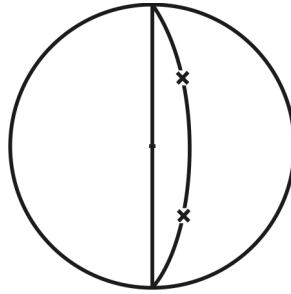


Рис. 17. Стереографічні проекції двох граней і їхній пояс

Для розв'язання цієї задачі слід, обертаючи кальку щодо центру сітки Вульфа, привести обидві задані точки на один меридіан сітки, якщо точки належать одній напівсфері (рис. 18, *а*), і на два симетричних меридіани щодо вертикального діаметра сітки, якщо точки є у різних напівсферах ($\rho > 90^\circ$ і $\rho < 90^\circ$) (рис. 18, *б*). Відлік кутової відстані між точками в першому випадку роблять по відрізку меридіана сітки Вульфа, що проходить через них (рис. 18, *а*). У другому випадку до значення кутової відстані відрізка одного меридіана додають значення кутової відстані відрізка симетричного меридіана (рис. 18, *б*).

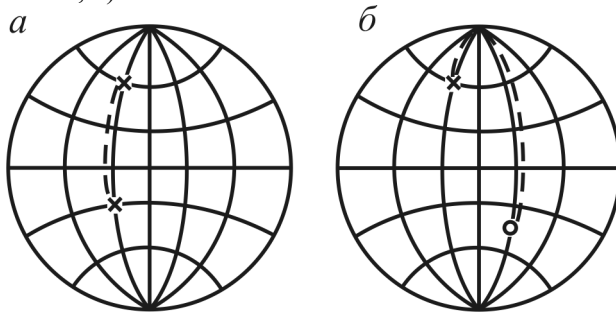


Рис. 18. Відлік кутів нормалей між двома гранями: *а* – однієї півсфери; *б* – різних півсфер

Задача 5. Дано лінію поясу якихось граней. Визначити його полюс.

На кальці будують заданий пояс. Обертанням кальки суміщують пояс із меридіаном сітки Вульфа і відраховують від нього по діаметру 90° (рис. 19). Ця точка й буде полюсом зони.

Задача 6. Дано полюс поясу. Знайти відповідний пояс.

Обертанням кальки суміщують полюс поясу (вісь даної зони) з лінією екватора сітки Вульфа і відраховують від осі зони по цій

лінії 90° . Меридіан, що буде проходити через цю точку, є шуканим поясом (рис. 19).

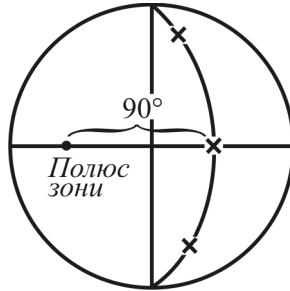


Рис. 19. Шуканий полюс зони віддалений на 90° від поясного меридіана

Задача 7. Дано два пояси (кожен із них задано двома гранями). Знайти грань, спільну для обох поясів.

Обертанням кальки переводимо полюси обох граней (що належать до першого поясу) на меридіан, який є їхнім поясом, і окреслюємо його. Те саме робимо з полюсами двох інших граней другого поясу. Точка перетину обох поясів буде проекцією шуканої грані (рис. 20).

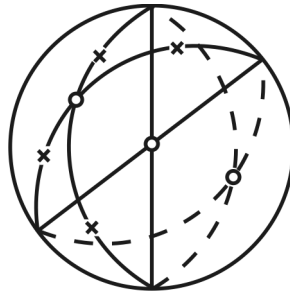


Рис. 20. Проекція грані, що належить одночасно двом зонам

Задача 8. Дано проекцію полюса грані. Знайти полюси всіх граней, що утворюють з першою проекцією кут 30° .

Полюси цих граней розміщуються на проекції по малому колу біля заданого полюса грані. Щоби знайти шукане коло, переносимо точку полюса заданої грані на будь-який меридіан і від неї відкладаємо в обидва боки по цьому меридіану заданий кут (у даному випадку 30°). Потім обертаємо кальку до будь-якого іншого меридіану і знову від полюса грані відкладаємо в обидва боки точки заданого кута і т.д. Таким способом одержуємо потрібну кількість точок, котрі й утворюють шукане мале коло (рис. 21). Побудова значно полегшується, якщо полюс заданої грані лежить на

головному колі. У цьому випадку його суміщають з північним або південним полюсом сітки Вульфа й одразу одержують по паралелі сітки Вульфа шукане мале коло із заданою кутовою відстанню. У нашому випадку полюс грані суміщений з південним полюсом сітки Вульфа (рис. 21).

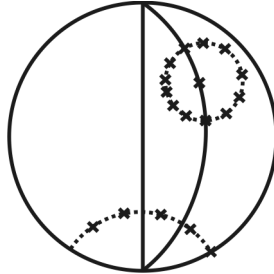


Рис. 21. Проекції граней, які лежать під одним кутом до заданої

Задача 9. Дано дві грані I і II. Знайти третю, яка утворює з першою гранню кут α , а з другою – кут β .

Навколо проекції першої грані проводимо мале коло з кутом α , а навколо другої грані – мале коло з кутом β (спосіб побудови цих кіл аналогічний тому, що застосовується в задачі 8). Точки перетину обох кіл є проекціями двох граней, що відповідають заданій вимозі (рис. 22).

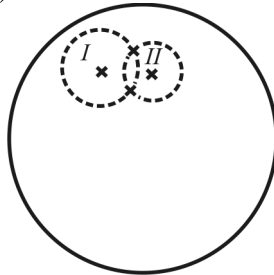


Рис. 22. Проекція грані, яка лежить під певним кутом до двох інших граней

Задача 10. Дано два пояси. Визначити кутову відстань між ними.

Як і в п'ятій задачі, знаходимо полюси цих поясів (зон): полюси зон 1 і 2 утворюють кут 90° з лініями зон. Далі відраховуємо кутову відстань між полюсами зон 1 і 2 (рис. 23).

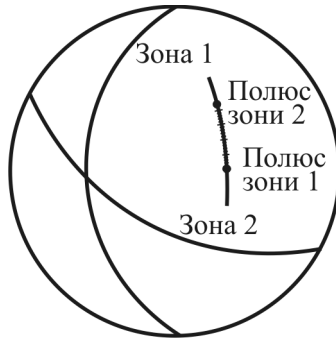


Рис. 23. Вимірювання кутів між полюсами двох зон

Задача 11. Дано два пояси. Знайти пояс, який розділяє навпіл кут між ними.

Знаходимо полюси зон 1 і 2 (рис. 24) і переносимо їх на одну дугу сітки Вульфа. Кут між полюсами зон ділимо навпіл і точку поділу з'єднуємо з точкою перетину заданих поясів. Далі переносимо обидві точки на один меридіан, котрий і буде шуканим поясом (бісектрисою).



Рис. 24. Спосіб знаходження поясу, що розділяє навпіл кут між двома іншими поясами

Задача 12. Дано полюси трьох граней, які перетинаються в одній вершині кристала. Знайти плоскі міжреберні кути при вершині цього кристала.

Будуємо сферичний трикутник, утворений полюсами цих трьох граней (рис. 25, а). Кути α , β , γ між поясами є додатковими до шуканих міжреберних кутів.

Є інший спосіб розв'язку. Будуємо полюси поясів (квадратики на рисунку 25, б). Вони утворюють сферичний

трикутник. Вимірюємо кути між полюсами поясів. Ці кути і будуть плоскими кутами між ребрами кристала.

Для пояснення другого способу розв'язку відмітимо таке. Поліус поясу (його вісь) дає напрямок ребра цього поясу. Кут між двома осями поясів є плоским кутом між відповідними двома ребрами. Якщо маємо три полюси поясів, то їхні міжосьові кутові відстані безпосередньо показують плоскі кути між ребрами.

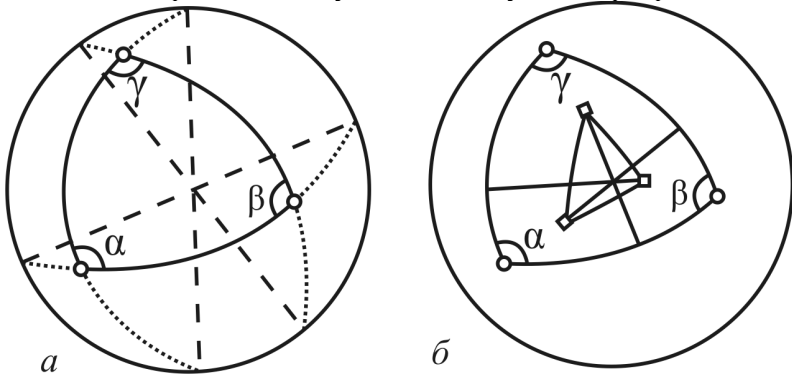


Рис. 25. Знаходження міжреберних кутів при вершині кристала, заданого полюсами трьох його граней (позначені кружечками): *a* – кути α , β , γ між поясами є додатковими кутами до шуканих плоских кутів між ребрами; *б* – міжреберні кути є кутами між осями поясів (позначені маленькими квадратиками)

Питання для самоконтролю

У чому полягає закон сталості гранних і реберних кутів?

Чим відрізняються ідеальні форми кристалів від спотворених і що є спільним для них?

Які типи гоніометрів Ви знаєте і що вони дають змогу вимірювати?

Як будуються сферичні, стереографічні та гномостереографічні проекції напрямків і площин?

Як спроектувати напрямок із відомими координатами (φ , ρ) за допомогою сітки Болдирева й сітки Вульфа?

Як побудувати вісь поясу, заданого полюсами двох граней?

Які завдання можна вирішувати за допомогою сітки Вульфа?

Як розташовані стереографічні проекції площин, координати полюсів яких $(30^\circ, 0^\circ)$, $(0^\circ, 60^\circ)$, $(270^\circ, 30^\circ)$, $(270^\circ, 120^\circ)$?

ТЕМА 3 СИМЕТРІЯ КРИСТАЛІВ

Симетрія – властивість тіл повторювати свої частини.

Вивчення кристалів доцільно почати з розгляду симетрії та їх зовнішньої форми (морфології), оскільки ці особливості є своєрідним ключем до розуміння складної внутрішньої будови кристалів, їх структурних особливостей. Часто вони дають змогу пояснити і навіть передбачити низку фізичних властивостей кристалічних речовин, а інколи – навіть виявити умови утворення кристалів. Особливості огранування кристалів можуть бути успішно використані також для спрямованих пошуків і оцінки корисних копалин.

Однак на першому етапі, під час вивчення симетрії, нас цікавлять кристали, не спотворені зовнішніми впливами, а утворені в умовах, близьких до ідеальних, тобто ідеальні за формою багатогранники. А оскільки у природі ідеальні за формою кристали трапляються рідко, то закони симетрії зручно вивчати на ідеалізованих моделях.

Спочатку треба з'ясувати, *що ж таке симетричний об'єкт (кристал)*. Симетричним об'єкт можна назвати лише тоді, коли він може бути суміщений сам зі собою поворотами або (і) відбиттями. Якщо в результаті таких перетворень об'єкт (або його частини) сумістяться самі з собою, то він є симетричним, а перетворення, за допомогою якого досягнуто це суміщення, називається *симетричним перетворенням*. Перетворення об'єкта в себе передбачає, що його частини, які перебувають в одному місці, сумістяться після перетворення з частинами, що перебувають в іншому місці. А це означає, що в об'єкті є рівні частини, які можна сумістити. Звідси походить слово *симетрія*, яке по-грецьки означає «співрозмірність» (сумірність). Наприклад, ідеально огранений кристал кварцу може бути суміщений сам зі собою поворотами на 120° навколо вертикальної осі. Суть симетрії полягає у можливості зробити перетворення об'єкта, яке сумістить його самого зі собою у новому положенні.

Геометричні образи (площини, прями лінії або точки), за допомогою яких задають або здійснюють симетричні перетворення (операції), називають *елементами симетрії*. При цьому елементи симетрії виявляються нічим іншим, як геометричним місцем

інваріантних точок, тобто точок, які залишаються нерухомими при заданій симетричній операції.

Розглянемо докладніше елементи симетрії та, відповідно, симетричні перетворення, які можна здійснити за їх допомогою. Залежно від характеру перетворення розрізняють елементи симетрії *I* й *II* роду. Елементи симетрії *I* роду пов'язують одну з одною *конгруентно рівні* фігури (або їх частини), тобто фігури, які суміщаються під час накладання: праві (П) – з правими, ліві (Л) – з лівими. Елементи симетрії *II* роду пов'язують один з одним *енантіоморфні*, тобто дзеркально рівні, фігури або їх частини (П з Л). Якщо умовно назвати фігуру (або її частину) за якоюсь її ознакою правою, то, очевидно, слід правими назвати всі форми конгруентно рівні, а лівими – форми, *енантіоморфно* рівні правим (рис. 26).

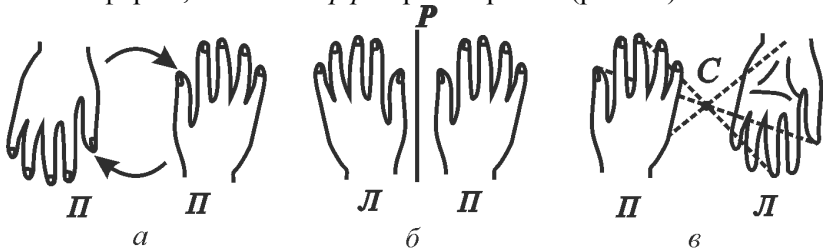


Рис. 26. Приклади конгруентної (а) і дзеркальної (енантіоморфної) (б, в) рівності фігур

Елементами симетрії *I* роду є поворотні осі симетрії – прямі, при обертанні навколо яких на певний кут фігура (або кристал) суміститься сам зі собою. Найменший кут обертання навколо такої осі, що приводить фігуру до самосуміщення, називається *елементарним кутом обертання осі симетрії* та позначається як α . Величина обертання кута α визначає *порядок осі симетрії* – n , що дорівнює числу самосуміщень n при повному обертанні фігури на 360° : тобто $n = 360^\circ/\alpha$ (рис. 27 а, б). Фігура, що має вісь симетрії n -го порядку, може бути розсічена на n конгруентно рівних частин нескінченною кількістю способів (рис. 27).

У навчальній символіці (*символіці Браве*) осі симетрії позначають як L_n , де підрядковий індекс n вказує на порядок осі. Графічно осі симетрії позначають багатокутниками (рис. 28): осі L_3 , L_4 , L_6 позначають правильними трикутниками, чотирикутниками, шестикутниками. Графічним позначенням осі L_2 є сферичний двокутник (фіузо). Вісь першого порядку L_1 графічного знаку не

має. Будь-який напрямок у кристалі є віссю L_1 : тому що під час повного обертання на 360° навколо L_1 довільна фігура самосуміщується. За міжнародною символікою (символікою Германа-Могена) поворотні осі позначають цифрою, що відповідає їхньому порядку. Прості осі симетрії такі: 1, 2, 3, 4, 6.

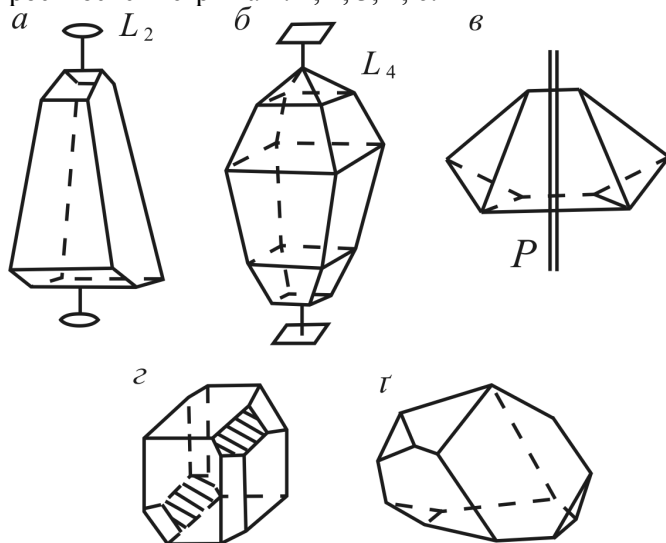


Рис. 27. Дія елементів симетрії першого ($a, б$) і другого ($в, г$) роду та їхня реалізація у кристалах: a – дією поворотної осі симетрії 2-го порядку – L_2 ; $б$ – дією поворотної осі симетрії 4-го порядку – L_4 ; $в$ – дією дзеркальної площини симетрії – P ; $г$ – дією центру інверсії – C (розміщеного у центрі фігури); $е$ – кристал без будь-яких елементів симетрії (у кристалі є лише осі 1-го порядку – L_1)

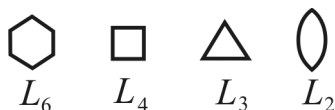


Рис. 28. Графічні позначення елементів симетрії

У геометричних фігурах можливі осі симетрії будь-якого порядку. У кристалічних багатогранниках порядок осей обмежений числами $n = 1, 2, 3, 4, 6$, тобто у кристалах неможливі осі 5-го та вище 6-го порядків. У цьому суть **головного закону симетрії** кристалів, встановленого емпірично, але в подальшому підтвердженого “гратчастою” будовою структури кристалів.

Доказом цього закону може слугувати те, що будь-яка вузлова сітка просторової гратки, котра, як відомо, являє собою щільну

систему паралелограмів, що стикаються своїми сторонами (рис. 29, а). Така паралелограмна сітка не може мати вісь п'ятого або більше шостого порядку. Ясно, що неможливо правильними п'яти- або n -кутниками (де $n > 6$) виповнити весь простір без залишку, тобто без зайвих додаткових вузлів поза вершинами паралелограмів (рис. 29, б, в). Таким чином, просторова ґратка кристала може бути інваріантною лише щодо оборотів навколо осей, притаманних кристалічним речовинам, тобто допускає лише осі симетрії 1-го, 2-го, 3-го, 4-го і 6-го порядків. У цьому полягає головна відмінність симетрії кристалічних речовин від симетрії живих організмів і квазікристалів, у яких можливі осі 5-го порядку. Присутність осей L_5 у квазікристалах пояснюється тим, що вони побудовані за складнішими законами періодичності, ніж кристали з їхньою сталою трансляційною будовою. У деяких організмах можливі навіть осі 7-го, 8-го і 10-го порядків.

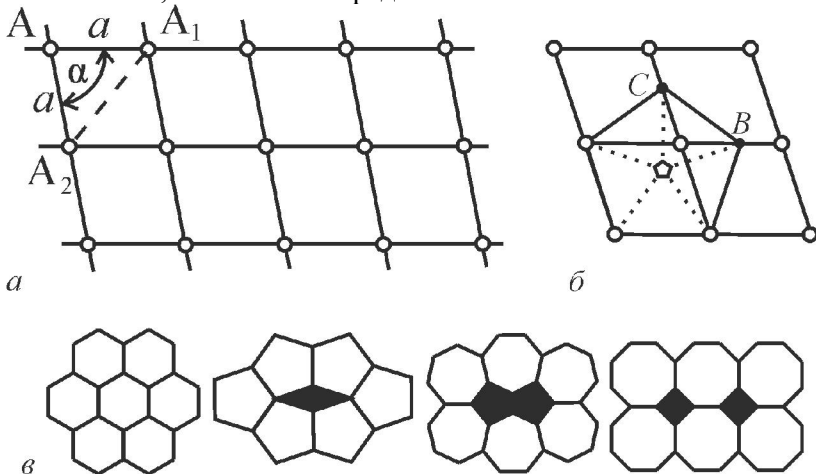


Рис. 29. Неможливість наявності у просторовій ґратці кристалів осей симетрії 5-го і вище 6-го порядків: а – паралелограмна плоска сітка, в якій теоретично осі вище шостого порядку неможливі ($A_1A_2 \geq a$ і кут $\alpha \geq 60^\circ$); б – осі п'ятого порядку неможливі, бо вони суперечать паралелограмній сітці; в – осі п'ятого і вище шостого порядків не можуть бути побудованими з правильних п'яти-, семи- або восьмикутників без проміжків

Таким чином, просторова ґратка кристала, а відповідно, і кристалічний багатогранник, допускають осі симетрії лише порядків $n = 1, 2, 3, 4$ і 6. При цьому осі 1-го і 2-го порядків вважають *осями нижчого порядку* (вісь 1-го порядку задає поворот

на 360° , тобто *операцію ідентичності*, або *тотожності*). Осі вище 2-го порядку є *осями вищого порядку*.

До **елементів симетрії II роду** належать: дзеркальна площина симетрії, центр інверсії та інверсійні й дзеркально-поворотні осі.

Дзеркальна площина симетрії. Уявлення про дзеркальну площину як елемент симетрії склалося дуже давно. Вона задає операцію дзеркального відбиття, при якій права частина фігури, відбиваючись у площині як у “двобічному дзеркалі”, суміщується з лівою її частиною (рис. 27, *в*). Цей елемент симетрії також зв’язує *енантіоморфні фігури*, тобто яку-небудь фігуру (або її частину) з її дзеркальним відбиттям (рис. 26, *б*). У символіці Браве дзеркальна площина симетрії (ї операція відбиття у площині) позначена буквою *P*, а графічно – подвійною (або іноді жирною) лінією. Площину дзеркального відбиття, або площину симетрії, і відповідну операцію за міжнародною символікою позначають символом *m* (від *mirror* – дзеркало) або символом $\bar{2}$, оскільки ця операція є інверсійним поворотом другого порядку (інверсійні осі розглядаються нижче).

Енантіоморфні ліва та права фігури можуть бути зв’язані іншим елементом симетрії – центром інверсії *C* (або *центром симетрії, точкою симетрії*). Він є “дзеркальною точкою”, “відбиваючись” (інверсуючись) у якій, права фігура “перевертається” та переходить у ліву (рис. 26, *в*, 31). У центросиметричних фігурах протилежні частини (грані, ребра, вершини) також пов’язані центром симетрії (рис. 30).

Будь-якій точці завдяки інверсії відповідає еквівалентна точка, яка лежить на продовженні прямої, що поєднує першу точку з центром на такій же протилежній відстані щодо центра (рис. 30). Тому кожній вершині центросиметричного багатогранника відповідає рівновіддалена від центру *C* (який збігається з центром цього багатогранника) еквівалентна вершина. Кожному ребру відповідає рівновіддалене, рівне, але протилежно спрямоване (антипаралельне) ребро. Тому кожній грані, яка проходить через ці ребра, відповідає рівновіддалена, обернено рівна грань з антипаралельними ребрами (рис. 30). На рис. 31 добре видно, що під час інверсійного відбиття лівої моделі у дзеркальній точці *C* модель перетворюється на праву. Самі ж фігури при цьому стають антипаралельними.

Позначають центр інверсії у символіці Браве буквою *C* (фр. *centre* – центр), графічно – точкою або також буквою *C*. Для позначення операції інверсії в точці слугує буква *i* (від фр. *inverse* –

зворотний). За міжнародною символікою центр інверсії позначають символом $\bar{1}$.

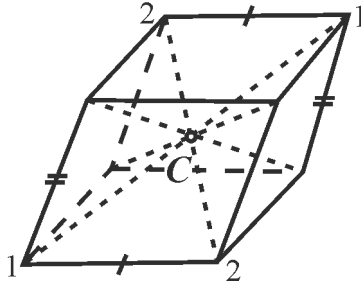


Рис. 30. Паралелепіпед – кристалічний багатогранник (поліедр), у якому є центр інверсії C

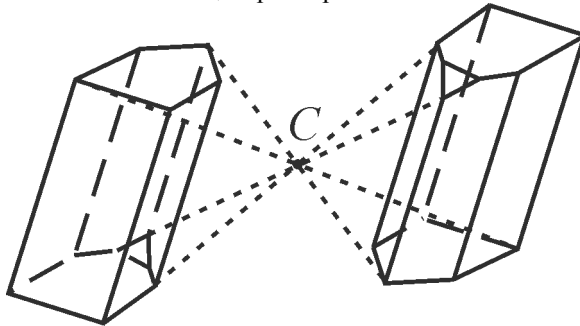


Рис. 31. Дія центру інверсії. Поліедр, зображений зліва, інверсується в поліедр, зображений справа

Розглянуті вище елементи симетрії – поворотні осі, дзеркальну площину і центр інверсії – часто називають простими, оскільки кожен із них задає лише одну симетричну операцію: поворот, відбиття або інверсію в точці відповідно. Для опису симетрії деяких кристалів простих елементів симетрії виявляється недостатньо, тому що в них можуть бути наявні *складні* елементи симетрії, що дають змогу суміщати рівні фігури (або їх частини) шляхом подвійної послідовної операції повороту (операції I роду) і відбиття в точці (операції II роду).

Якщо поворот навколо якоїсь осі на кут α (згідно з порядком осі) супроводжується послідовним відбиттям у точці, розміщеній на цій осі, то таку складну вісь називають **інверсійною**. У символіці Браве вказано порядок інверсійних осей: Li_1 , Li_2 , Li_3 , Li_4 , Li_6 . У кристалах звертають особливу увагу на наявність або відсутність інверсійних осей Li_4 і Li_6 з поворотами відповідно на кут 90° або 60° з послідовною інверсією. За міжнародною символікою інверсійні

осі позначають цифрою, яка відповідає їхньому порядку, з рискою зверху: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$.

Дія інверсійної осі 1-го порядку (поворот на 360° плюс інверсія) аналогічна дії центру інверсії: $Li_1 = C$ (рис. 32, *a*). Дію інверсійної осі Li_2 (поворот на 180° плюс інверсія) можна замінити дією простого відбиття у реальній площині симетрії P , перпендикулярній до інверсійної осі (рис. 32, *б*): тобто дія $Li_2 = \perp P$. Якщо звернутися до рис. 32, *б*, то видно, що внаслідок дії Li_2 чорна точка 1 перейде в позицію точки 2, а біла – в позицію білої. Зрозуміло, що на практиці зручніше визначати звичайні площини симетрії P , а не Li_2 . Звернемо також увагу на те, що, записуючи у символі складну вісь, прості елементи симетрії, які її замінюють, вже не враховують: пишемо Li_6 , а не $L_3 \perp P$ (рис. 33, *б*). Але Li_3 часто записують як L_3C (рис. 33, *a*).

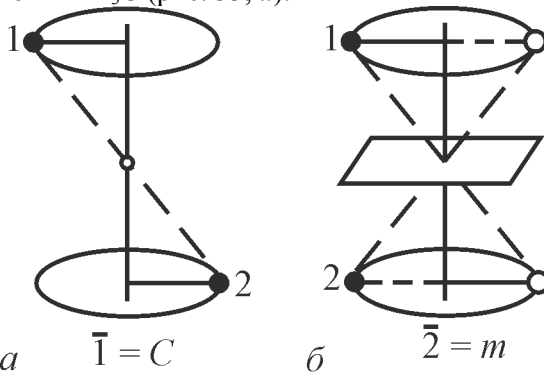


Рис. 32. Дія інверсійних осей Li_1 (*a*) і Li_2 (*б*) (Borchardt-Ott, 2009)

Якщо розмножити точку за допомогою потрійної інверсійної осі Li_3 (рис. 33, *a*) або шестірної інверсійної осі Li_6 (рис. 33, *б*), то видно, що дія Li_3 і Li_6 зводиться до сумарної дії потрійної осі й центру інверсії в разі Li_3 , або потрійної осі та перпендикулярної до неї дзеркальної площини в разі Li_6 . У фігурах з Li_6 власний центр інверсії відсутній.

Оригінальною (такою, що не замінюється відповідним простим елементом симетрії) є інверсійна вісь Li_4 (рис. 34, *a*). У багатогранниках із чотвірною інверсійною віссю власного центра інверсії немає: дві верхні точки віссю Li_4 розвернуті щодо двох нижніх на 90° . Цікаво, що площина розміщена перпендикулярно до осі L_4 , дає подвоєну кількість точок порівняно з інверсійною віссю

Li_4 (рис. 34, б). Інверсійна вісь Li_4 завжди збігається з поворотною віссю L_2 , але не всяка вісь L_2 збігається з віссю Li_4 ($\bar{4} \Rightarrow 2$).

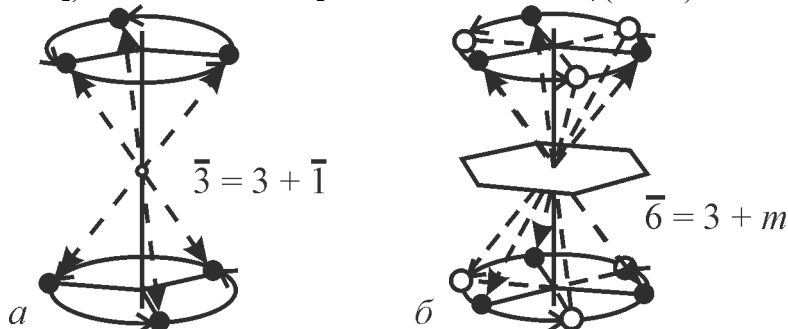


Рис. 33. Дія інверсійних осей Li_3 (а) і Li_6 (б) (Borchardt-Ott, 2009)

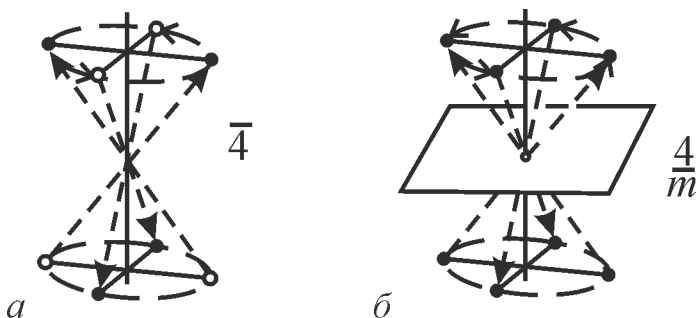


Рис. 34. Дія інверсійної осі Li_4 : а – тут чорні точки переходять у чорні; б – демонстрація того, що проста вісь L_4 і перпендикулярна до неї дзеркальна площина породжують удвічі більше точок, ніж інверсійна вісь Li_4 (Borchardt-Ott, 2009)

Графічно інверсійні осі симетрії Li_4 та Li_6 позначають відповідним чином (рис. 35).



Рис. 35. Графічне зображення інверсійних осей

Серед елементів симетрії II роду також виділяють складні **дзеркально-поворотні осі**. Дзеркально-поворотна вісь – це сукупність осі та перпендикулярної до неї площини, що діють одночасно. Розрізняють дзеркально-поворотні осі L_n різних порядків: L_1 , L_2 , L_3 , L_4 , L_6 . Фігура з L_4 показана на рис. 36. Вона ідентична фігурі з

відомою нам інверсійною віссю Li_4 : результат їхньої дії однаковий. Тому вони мають однакове графічне позначення.

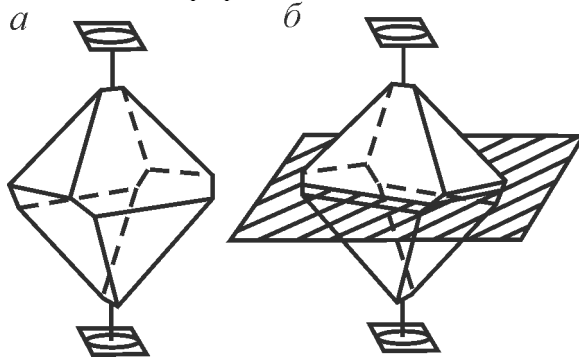


Рис. 36. Багатогранник з елементами симетрії Li_42L_22P : *a* – фігура з дзеркально-поворотною віссю L_4 ; *б* – ілюстрація послідовних операцій симетрії – повороту граней навколо осі на 90° з послідовним відбиттям у дзеркальній площині (великі нижні грані опиняються під маленькими верхніми)

Якщо проаналізувати дію дзеркально-поворотних (L_n) та інверсійних (Li_n) осей, то переконаємось у тому, що кожній дзеркально-поворотній осі можна поставити у відповідність дію певної інверсійної осі симетрії:

$$L_1 = Li_2 = \perp P, L_2 = Li_1 = C, L_3 = Li_6 = L_3 \perp P, L_4 = Li_4, L_6 = Li_3 = L_3 C.$$

Тому часто під час опису реальної симетрії кристалічних багатогранників опускають складні дзеркально-поворотні осі, а замість них застосовують такі елементи симетрії: площина симетрії, центр інверсії, інверсійні осі симетрії Li_4 і Li_6 .

ВИДИ СИМЕТРІЇ ТА ПРОСТОРОВІ ГРУПИ КРИСТАЛІВ

Симетрія геометричних фігур, у тому числі й кристалів, виражається сукупністю їхніх елементів симетрії. Сукупність елементів симетрії кінцевої фігури називається **видом симетрії, або точковою групою**. Набори елементів симетрії обумовлюють можливу зовнішню форму кристалів.

У нескінченних симетричних фігурах (просторових ґратках і структурах кристалів), крім звичайних елементів симетрії, що належать кінцевим фігурам, завжди наявні осі поступання (трансляції), і можуть бути наявні площини ковзного відбиття і

гвинтові осі симетрії. Кожен елемент симетрії у нескінченних фігурах повторюється нескінченне число раз. Сукупність елементів симетрії нескінченної фігури називається *просторовою групою симетрії*.

Вид симетрії та просторова група симетрії одного й того ж кристала нерозривно пов'язані. Якщо всі елементи симетрії просторової групи перенести паралельно самим собі в одну точку, то одержимо точкову групу. У ній площини ковзного відбиття перетворюються на площини симетрії, а гвинтові осі симетрії – на прості осі симетрії. Набори елементів симетрії просторових груп обумовлюють не тільки особливості внутрішньої структури кристалів, але й зовнішню симетрію (вид симетрії, точкову групу) й форму кристалів.

Таким чином, симетрія будови кристала має подвійний вираз: 1) повний вираз – просторова група симетрії; 2) неповний, наближений вираз – вид симетрії (точкова група).

Зовнішня симетрія кристала як кінцевої фігури, як багатогранника росту, може виражатись тільки видом симетрії.

Кожна просторова група симетрії входить у певний вид симетрії та, навпаки, кожен вид симетрії розділяється на певні просторові групи симетрії. Тому просторові групи симетрії часто називають різновидами симетрії.

Зовнішня форма кристалів однієї речовини та однієї будови може бути різною під впливом різних умов росту кристалів. Істинною симетрією цих кристалів як багатогранників росту є та симетрія, котра виражається видом симетрії (точковою групою), що включає просторову групу симетрії даних кристалів. Таким чином, істинна симетрія кристала є симетрія його структури.

Вивід точкових груп (видів симетрії) уперше здійснив у 1826 р. німецький кристалограф М.Л. Франкенгейм (1801–1869), через декілька років незалежно від нього, у 1830 р. – німецький мінералог І.Ф.Х. Гессель (1796–1872). Однак їхні роботи не були оцінені сучасниками і забуті. Лише у 1867 р. петербурзький академік А.В. Гадолін (1828–1892) здійснив строгий математичний вивід точкових груп і показав, що є всього 32 види (класи, групи) симетрії, які повністю описують усі можливі для кристалів комбінації відомих елементів симетрії. Теоретичний вивід усіх 230 просторових груп симетрії у 1890 р. здійснив знаменитий петролог, мінералог і кристалограф Є.С. Федоров (1853–1919) майже одночасно з А.М. Шенфлісом (1853–1928).

СИНГОНІЇ. СИМЕТРИЧНО-РІВНІ ТА ОДИНИЧНІ НАПРЯМКИ

Види симетрії об'єднують у крупніші групи – сингонії, а сингонії – у категорії. У кожну з цих груп входять кристали з деякими специфічними геометричними особливостями, з якими пов'язані та визначені загальні фізичні властивості. Як геометричні, так і фізичні властивості кристалів визначаються певними сукупностями елементів симетрії.

У кристалографії за наборами елементів симетрії розрізняють **три категорії**: нижчу, середню і вищу. Кристали нижчої категорії характеризуються відсутністю осей симетрії порядку вище другого. У цю категорію входять 8 видів симетрії.

Для кристалів середньої категорії характерна обов'язкова наявність однієї осі симетрії вище другого порядку (L_3 , L_4 , L_6 , Li_4 або Li_6), котра називається головною віссю симетрії. У цю категорію входять кристали 19 видів симетрії.

Кристали вищої категорії характеризуються наявністю кількох осей симетрії вищого порядку, та вони обов'язково мають $4L_3$. До цієї категорії належать п'ять видів симетрії.

Категорії підрозділяють на **сингонії**. Термін ввів французький вчений Ш.Соре у 1893 р. Слово *сингонія* – грецького походження і означає “подібнокутник”. У кожній сингонії об'єднані лише види симетрії, в яких є один або кілька подібних елементів симетрії. Походження терміна *сингонія* пов'язане з тим, що кристали даної сингонії побудовані за принципом паралелепіпедів повторюваності (елементарних комірок ґраток Браве) з однотипними кутовими співвідношеннями. Сингонія – сукупність видів симетрії однієї категорії з однаковим числом поворотних або інверсійних осей симетрії одного і того ж порядку. Всього є сім сингоній. Нижча категорія включає три сингонії: триклінну, моноклінну, ромбічну; середня – також три: тригональну, тетрагональну і гексагональну. Нарешті, у вищій категорії є лише одна сингонія – кубічна.

Дамо характеристику кожної сингонії.

I. Триклінна сингонія. Сюди входять тільки два види симетрії. Для першого характерні лише осі симетрії першого порядку L_1 , які рівнозначні відсутності інших кінцевих елементів симетрії. У другому виді симетрії є лише осі Li_1 ($=C$). Всі три ребра паралелепіпеда повторюваності (елементарної комірки ґратки

Браве) триклінних кристалів утворюють непрямі (клінові) між-реберні кути. Звідси й назва – “триклінна сингонія”.

II. Моноклінна сингонія. Сюди входять три види симетрії. Для кожного обов’язково одна вісь симетрії другого порядку: L_2 або $Li_2 (=P)$, або одночасно одна L_2 і одна $Li_2(=\perp P)$ у виді симетрії L_2PC .

III. Ромбічна сингонія. Вона містить три види симетрії ($3L_2, L_22P, 3L_23PC$). Для кожного з них характерна наявність трьох взаємно перпендикулярних подвійних осей симетрії: $3L_2$ або $L_22Li_2(=L_22P)$. Для кристалів ромбічної сингонії дуже характерні ромбічні та прямокутні перетини (ортос – прямий). Звідси друга назва сингонії – “орторомбічна”.

IV. Тригональна (або ромбоедрична) сингонія. До неї належать п’ять видів симетрії. У кожному є одна потрійна вісь симетрії L_3 або Li_3 , яка відповідає L_3+C (наприклад, $L_33L_2, L_3C (=Li_3), L_33L_23PC (=Li_33L_23P)$).

V. Тетрагональна сингонія містить сім видів симетрії. У кожному з них є одна четвірна поворотна вісь симетрії L_4 або одна інверсійна вісь Li_4 (наприклад, L_4PC або Li_42L_22P).

VI. Гексагональна сингонія. До неї входять сім видів симетрії. У кожному є по одній шестерній осі симетрії L_6 або Li_6 , яка рівнозначна $L_3 \perp P$ (наприклад, L_66P або Li_63L_23P).

VII. Кубічна сингонія об’єднує п’ять видів симетрії. У кожному обов’язково є по чотири потрійні осі симетрії $4L_3$, що характерно тільки для кристалів даної сингонії (наприклад, $4L_33L_2$ або $3L_44L_36L_2$).

Під час дослідження кристалів дізнаємось, як відображаються вказані особливості симетрії кристалів на їхніх геометричних і фізичних властивостях.

Важливими також є геометричні поняття про симетрично-рівні та одиничні напрямки, котрі безпосередньо пов’язані зі симетрією кристалів. Число й орієнтування цих напрямків щодо елементів симетрії є додатковою характеристикою симетрії. Під напрямками тут усюди маємо на увазі прямі, проведені через центр фігури.

Симетрично-рівними напрямками називаються такі тотожні напрямки у фігурі, котрі пов’язані між собою елементами симетрії, тобто виводяться один з одного за допомогою елементів симетрії. Симетрично-рівні напрямки повторюються у кристалі кілька разів.

Наприклад, у правильній тригональній призмі (рис. 37) три подвійні осі симетрії ($3L_2$) є симетрично-рівними напрямками. Уявні похилі напрямки, що проходять через вершини нижніх і верхніх трикутних граней, повторюються шість разів: маємо шість симетрично-рівних напрямків. Уявні пари напрямків, що проходять через точки, розміщені на ребрах трикутних граней симетрично площинам симетрії, повторюються дванадцять разів, утворюючи дванадцять симетрично-рівних напрямків.

У кубі з максимальною симетрією $3L_44L_36L_29PC$ (рис. 38) вісь L_4 повториться 3 рази, вісь L_3 – 4 рази, вісь L_2 – 6 разів. Кількість симетрично-рівних напрямків у цьому кубі в симетричних позиціях за межами осей симетрії – 24 (якщо вони лежать у площинах симетрії) або – 48 (якщо не збігаються ні з осями, ні з площинами симетрії). Після знайомства з простими формами Ви дізнаєтеся, що ці напрямки відповідають полюсам 24 граней тетрагексаедра (або тригон-триоктаедра, або тетрагон-триоктаедра) або 48 граням гексоктаедра.

Одиничними напрямками називаються такі напрямки, котрим немає симетрично-рівних.

На рис. 37 з головною віссю L_3 (Li_6) збігається одиничний напрямок, оскільки за допомогою елементів симетрії, наявних у фігурі, не можна вивести жодного іншого ідентичного напрямку, симетрично-рівного даному. Під час відбиття у горизонтальній площині симетрії, перпендикулярній до напрямку L_3 (Li_6) або при повороті навколо подвійних осей L_2 , перпендикулярних до нього, не одержимо нових напрямків. У цих випадках лише сумістяться одне з одним протилежні кінці напрямку L_3 (Li_6).

Одиничними напрямками також є: L_2 на рис. 27, а; L_4 на рис. 27, б; Li_4 на рис. 36. У поліедрах (багатогранниках), зображених на рис. 27, г, і, всі напрямки одиничні. А в багатограннику на рис. 27, в одиничними напрямками є всі напрямки, які лежать у площині симетрії плюс один – перпендикулярний до неї.

У симетрично-рівних напрямках властивості кристалів завжди однакові. Навпаки, у різних одиничних напрямках властивості кристала відрізняються за величиною.

Число одиничних напрямків є додатковою характеристикою сингоній, а їхнє орієнтування щодо елементів симетрії вказує напрямки у кристалі, в котрих його властивості відрізняються від властивостей в інших напрямках.

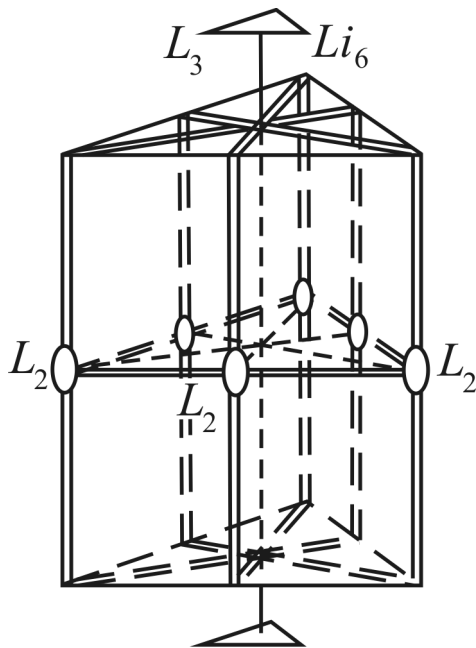


Рис. 37. Розташування симетрично-рівних напрямків у правильній тригональній призмі з елементами симетрії ($Li_63L_23P = L_33L_24P$). Три симетрично-рівних напрямки збігаються з трьома осями L_2 . Шість уявних симетрично-рівних напрямків проходять з центра фігури через вершини нижніх і верхніх трикутних граней. Дванадцять уявних симетрично-рівних напрямків проходять через пари точок на ребрах трикутних граней симетрично вертикальним площинам симетрії

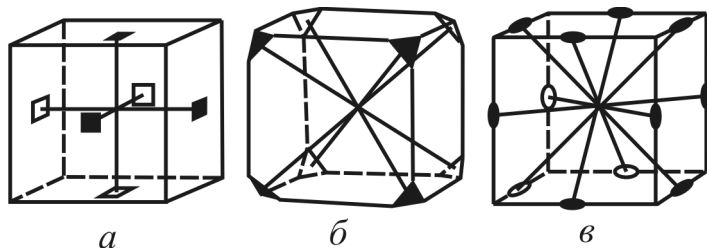


Рис. 38. У зображеному кубі, зі симетрією $3L_44L_36L_29PC$, є: *a* – три симетрично-рівні четверні осі симетрії ($3L_4$); *б* – чотири потрійні осі симетрії ($4L_3$); *в* – шість подвійних осей симетрії ($6L_2$). Одиничних напрямків немає

I. У кристалах триклінної сингонії всі напрямки одиничні; симетрично-рівних напрямків немає. Це найменш симетричні

кристали з яскраво вираженою анізотропією властивостей. Яскравим прикладом є анізотропія твердості в кристалах кіаніту: на площинах сколу по спайності поперечна твердість – 6,5, а повздовжня – 4.

II. У кристалах моноклінної сингонії є нескінченна кількість одиничних напрямків у вертикальній площині плюс один – в перпендикулярному до неї напрямку. Є також безліч симетрично-рівних інших напрямків (подвоєних за допомогою L_2 і P , які з ними не збігаються). Кожен напрямок, косий щодо L_2 і P , має ще один, симетрично-рівний першому, тобто подвоюється.

III. У кристалах ромбічної сингонії три взаємно перпендикулярні одиничні напрямки. Вони збігаються з L_2 або Li_2 ($\perp P$).

IV, V, VI. У кристалах тригональної, тетрагональної та гексагональної сингонії є по одному одиничному напрямкові. Одиничні напрямки збігаються з головною віссю L_3 , L_4 , Li_4 , L_6 і Li_6 . Дані сингонії відрізняються одна від одної найменуванням головних осей.

Анізотропія фізичних властивостей у таких кристалах розвинута добре. Особливо помітна різниця властивостей уздовж і впоперек головної осі симетрії вищого порядку.

VII. У кристалах кубічної сингонії немає одиничних напрямків. Найменше число симетрично-рівних напрямків тут три: вздовж координатних $3L_2$, $3Li_4$ або $3L_4$. Це високосиметричні кристали. Будь-якому напрямку в кристалі вищої категорії відповідають інші симетрично еквівалентні напрямки. Властивості кристалів у симетрично еквівалентних напрямках є однаковими. Зовнішня форма ідеально огранених кристалів вищої категорії завжди ізометрична.

ТЕОРЕМИ ПРО ВЗАЄМОДІЮ ЕЛЕМЕНТІВ СИМЕТРІЇ, СПІВВІДНОШЕННЯ ОДИНИЧНИХ НАПРЯМКІВ З ЕЛЕМЕНТАМИ СИМЕТРІЇ

Працюючи з кристалами, дослідники звернули увагу на те, що елементи симетрії розміщуються у них не випадково, а певним – закономірним – чином. Взаємодія двох симетричних операцій завжди породжує третю – результуючу – операцію, а відповідно, й елемент симетрії. Якщо розглянути всі взаємодії елементів симетрії даного кристала, можна одержати *повну сукупність симетричних*

операцій, яка називається *групою симетрії* (або *класом*, чи *видом симетрії*).

Знаючи головні правила взаємодії елементів симетрії (правила множення симетричних операцій), легко вивести всі можливі їхні сукупності.

ТЕОРЕМА 1. *Лінія перетину двох площин симетрії завжди є віссю симетрії, дія якої дорівнює сумі дій обох площин; елементарний кут повертання осі удвічі більший від кута між площинами.*

Доведення. Задано дві площини симетрії P_1 і P_2 , які утворюють кут α . На рис. 39 площина креслення перпендикулярна P_1 і P_2 : OP_1 і OP_2 відповідають слідам обох площин.

Необхідно довести, що лінія їхнього перетину є віссю з кутом обертання, що дорівнює 2α . На рисунку вихід такої осі має збігатися з точкою O . Вісь перпендикулярна до площини креслення.

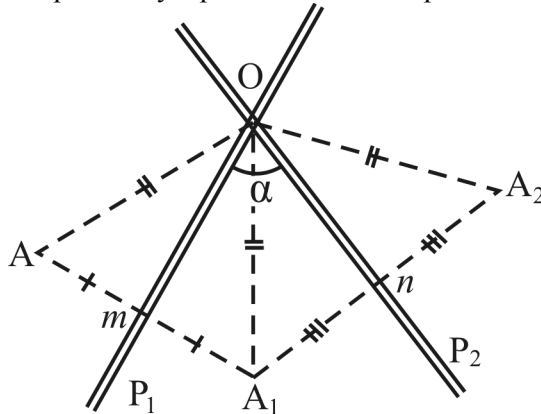


Рис. 39. Лінія перетину двох площин симетрії P_1 і P_2 є віссю симетрії O

Спочатку доведемо, що точку A_2 , одержану з точки A послідовним відбиттям її в площинах P_1 і P_2 , можна також вивести з цієї ж точки A за допомогою обертання на кут 2α навколо напрямку O , який лежить на перетині площин симетрії P_1 і P_2 .

Для цього достатньо показати, що $OA = OA_2$.

Відбиваємо A в P_1 , тобто опускаємо з A перпендикуляр на P_1 і продовжуємо його на рівну відстань в інший бік від P_1 ($Am = mA_1$). Унаслідок цього отримуємо відбиту точку A_1 .

Прямокутні трикутники AmO і A_1mO рівні ($Am = mA_1$ за

побудовою, катет Om – спільний). Звідси $OA = OA_1$.

Далі, відбивши A_1 в P_2 , одержимо точку A_2 .

Аналогічно до попереднього випадку прямокутні трикутники A_1nO і A_2nO рівні. Звідси $OA_1 = OA_2$.

Отже, $OA = OA_1 = OA_2$.

Таким чином, точку A_2 можна одержати з A шляхом обертання її навколо осі O на кут AOA_2 .

Залишається довести другу частину теореми, згідно з якою $\angle AOA_2 = 2\alpha$

$$\angle A_1Om + \angle A_1On = \alpha.$$

Разом з тим $\angle A_1Om = \angle AOm$ (із рівності трикутників A_1mO і AmO); $\angle A_1On = \angle A_2On$ (з рівності трикутників A_1nO і A_2nO).

Звідси $\angle AOm + \angle A_2On = \alpha$.

У результаті маємо

$$\angle AOA_2 = \angle AOm + \angle A_1Om + \angle A_1On + \angle A_2On = 2\alpha,$$

що й необхідно було довести.

Дану теорему можна сформулювати й у загальному вигляді:

Дія двох дзеркальних площин, що перетинаються, рівноважна дії однієї обертальної осі, яка лежить на лінії перетину згаданих осей, причому кут обертання навколо осі удвічі більший від кута, який лежить між площинами.

Отже, два послідовних відбиття у двох площинах, що перетинаються під кутом α , замінюються без зміни результатів одним обертанням навколо осі на кут 2α .

Є також така обернена теорема:

Дія однієї поворотної осі рівнозначна дії двох дзеркальних площин, що перетинаються вздовж згаданої осі. Кут між площинами дорівнює половині елементарного кута поворотної осі.

ТЕОРЕМА 2. ОСЬОВА ТЕОРЕМА ЕЙЛЕРА. *Взаємодія двох осей симетрії n -го порядку, поворотних або інверсійних, призводить до виникнення третьої осі симетрії, яка проходить через точку їх перетину. При цьому результуюча вісь буде поворотною, якщо вихідними будуть дві однакові осі (обидві поворотні або обидві інверсійні), та інверсійною, якщо вихідні осі будуть різного типу.*

Цю теорему можна сформулювати у загальному вигляді. Добуток двох обертань навколо двох осей симетрії, що перетинаються, еквівалентний обертанням навколо третьої осі, що

проходить через точку перетину перших двох. Тобто два обернання породжують третє, еквівалентне їм.

Доведення. Задані дві поворотні осі симетрії O' і O'' , які перетинаються. На підставі першої теореми кожному з них можна замінити парою дзеркальних площин I, II і III, IV :

обернання навколо $O' =$ відбиттям у площинах $I + II$,

обернання навколо $O'' =$ відбиттям у площинах $III + IV$.

Тому обернання навколо $O' +$ обернання навколо $O'' =$ відбиттям у площинах $I + II + III + IV$.

Домовимося, що площина I проходить також через вісь O'' , а площина III – через вісь O' . Отже, площини I і III збігаються і, відповідно, взаємно знищуються, оскільки два послідовні відбиття в них залишають фігуру на місці. Ця дубльована площина проходить через обидві осі симетрії. У результаті

обернання навколо $O' +$ обернання навколо $O'' =$ відбиттям у площинах $II + IV$.

Проте, як відомо, дія двох дзеркальних площин, що перетинаються (в даному випадку $II + IV$), еквівалентна дії якоїсь поворотної осі (O'''): таким чином,

обернання навколо $O' +$ обернання навколо $O'' =$ осі O''' :

тобто *дві осі симетрії породжують третю.*

Ця знайдена рівнодійна вісь O''' , очевидно, лежить на перетині дзеркальних площин $II + IV$. Теорему доведено.

ТЕОРЕМА 3. *а) За наявності центру інверсії C і парної осі L_{2n} перпендикулярно до неї проходить площина симетрії P .*

Доведення. Будь-яка парна вісь найменування L_{2n} одночасно є й подвійною віссю, тому що її елементарний кут обернання міститься цілу кількість разів у 180° :

$$\frac{360^\circ}{2n} = \frac{180^\circ}{n}, \text{ де } n - \text{ціле число.}$$

Тому будь-яка точка A (рис. 40) внаслідок обернання на 180° навколо заданої осі L_{2n} , займе положення A_1 ($Am = mA_1$). Відбиваючись у C , точка A_1 прийде на місце A_2 . Але точку A_2 можна вивести з точки A за допомогою її безпосереднього відбиття у площині P , проведеної перпендикулярно до осі L_{2n} . Для цього потрібно довести, що $AA_2 \perp P$ ($\angle AnC = \angle A_2nC = 90^\circ$) і що $An = nA_2$. $\angle ACm = \angle A_1Cm$, оскільки трикутники $AmC = A_1mC$ рівні (вони прямокутні; $Am = mA_1$; Cm – спільний катет). Але $\angle A_2CL_{2n} = \angle A_1Cm = \angle ACm$.

Відповідно, $\angle ACn = \angle A_2Cn$ як додаткові. Крім того, у трикутниках AnC і A_2nC сторона $AC = A_2C$ ($AC = A_1C$ і $A_2C = A_1C$ за побудовою). Cn є спільною стороною. Отже, звідси випливає, що $\angle AnC = \angle A_2nC = 90^\circ$ і $An = nA_2$. Тобто площина P перпендикулярна до L_{2n} , що й потрібно було довести.

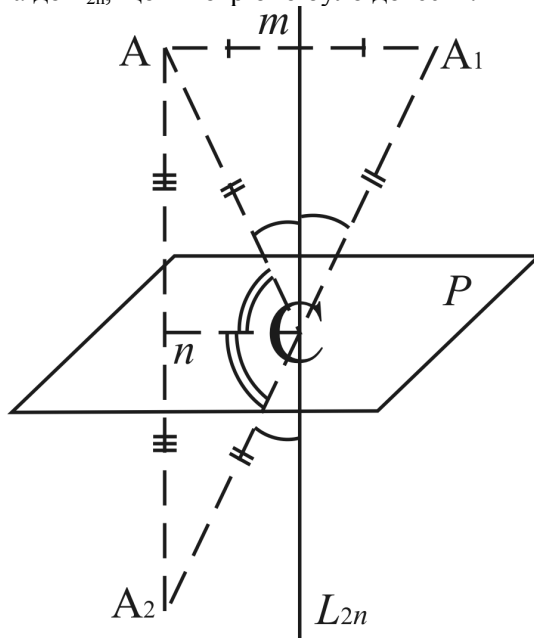


Рис. 40. За наявності C і L_{2n} перпендикулярно до неї проходить площина симетрії P

Аналогічно можна довести і такі положення:

б) *За наявності центру інверсії C і площини симетрії P , яка проходить через C , перпендикулярно до останньої лежить парна вісь L_{2n} .*

в) *За наявності парної осі L_{2n} і перпендикулярної до неї площини симетрії P завжди наявний центр інверсії C .*

Особливо важливе практичне значення для визначення елементів симетрії має наслідок із попередніх положень.

НАСЛІДОК. *За наявності центру інверсії сума парних осей дорівнює сумі площин симетрії, причому кожна парна вісь перпендикулярна до площини симетрії.*

Тому в центросиметричному багатограннику, що має форму сірникової коробки, трьом подвійним осям відповідають три перпендикулярні до них площини симетрії (маємо $3L_23PC$). У

моделі зі симетрією високосиметричного куба знаходимо $3L_44L_36L_29PC$. Сума парних осей $(3+6) = 9$, і відповідно до цього маємо дев'ять площин симетрії.

На завершення сформулюємо ще дві теореми без доведення.

ТЕОРЕМА 4. (є наслідком теореми 2). *За присутності осі симетрії n -го порядку (L_n) і перпендикулярної до неї подвійної осі L_2 маємо всього n подвійних осей (nL_2):*

$$L_n + \perp L_2 \rightarrow L_n nL_2.$$

ПРИКЛАД. Дванадцятигранник, зображений на рис. 37, відповідає гексагональній дипіраміді. Пряма LL є тут шестірною віссю симетрії L_6 . Перпендикулярно до неї маємо подвійну вісь L_2 (на рис. 41 вона позначена 1–1). Взаємодія осей симетрії LL і $\perp 1-1$ призводить до того, що перпендикулярно до LL розташовується шість ідентичних подвійних осей L_2 .

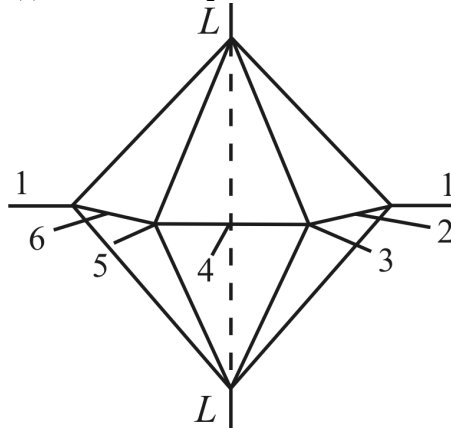


Рис. 41. Гексагональна дипіраміда зі симетрією L_66L_27PC . Вісь симетрії LL (L_6) в гексагональній дипіраміді розмножує перпендикулярну до неї подвійну вісь 1–1 (L_2) шість разів. Подвійні осі позначені цифрами 1–1, 2–2, 3–3, 4–4, 5–5, 6–6

ТЕОРЕМА 5 (є наслідком теореми 1). *За наявності осі симетрії порядку n (L_n) і площини симетрії P , що проходить уздовж цієї осі, маємо всього n таких площин (nP):*

$$L_n nP \text{ (де } L_n \parallel P\text{)}$$

А тепер розглянемо **узагальнюючий приклад**. Розберемо особливий шестигранник, який називають ромбоедром (рис. 42). Ромбоедр схожий на куб, витягнутий або сплющений уздовж однієї з потрійних осей (тілесних діагоналей куба). При цьому квадратні

грані куба набувають форми ромбів.

Насамперед унаслідок паралельності всіх протилежних граней ромбоедра знаходимо на моделі центр інверсії C . Порівняно легко відшукати й потрібну вісь L_3 , яка проходить через пару протилежних вершин ромбоедра (на рис. 42 це верхня і нижня вершини). Уздовж потрібної осі посередині грані легко виявляється вертикальна площина симетрії. Згідно з теоремою 5, таких площин буде три ($3P$).

Решта елементів симетрії виводиться з наслідку до теореми 3. Перпендикулярно до кожної з $3P$ (за наявності C) має проходити три парні осі. У результаті знаходимо $3L_2$. Отже, повна сукупність елементів симетрії ромбоедра: L_33L_23PC .

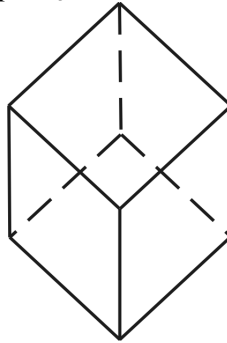


Рис. 42. Модель ромбоедра зі симетрією L_33L_23PC . Тут є L_6
($=Li_3 = L_3C$)

ТЕОРЕМА 6. *Площина симетрії, що проходить уздовж парної інверсійної осі симетрії Li_4 та Li_6 , веде до появи осі другого порядку L_2 , яка перпендикулярна до інверсійної осі та проходить по бісектрисі кута між площинами симетрії.* Одержуємо сукупності елементів симетрії Li_42L_22P (рис. 44, в, 49, в) або Li_63L_23P ($=L_33L_24P$) (рис. 49, б).

Отже, слід підкреслити, що всі розглянуті вище взаємодії симетричних операцій (а відповідно, і сполучення елементів симетрії) дають змогу:

- грамотно шукати і розраховувати кількість різних елементів симетрії в кристалах та визначати їхню взаємну орієнтацію;
- правильно накреслювати стереограми елементів симетрії кристалів;
- виводити комбінації елементів симетрії у всіх видах симетрії;
- користуватися не лише навчальною символікою Браве, але й іншими символіками, наявними у науковій літературі, –

символікою Шенфліса та міжнародною символікою Германа-Могена.

ВИЗНАЧЕННЯ ЕЛЕМЕНТІВ СИМЕТРІЇ МОДЕЛЕЙ КРИСТАЛІВ І ПОБУДОВА ЇХНІХ СТЕРЕОГРАФІЧНИХ ПРОЕКЦІЙ

Під час визначення симетрії моделей необхідно завжди пам'ятати, що знайдена комбінація елементів обов'язково має відповідати симетрії одного з 32 видів симетрії.

Подані нижче міркування мають допомогти початківцю під час розгляду кристалографічних моделей.

Якщо фігуру можна розрізати на дві частини так, щоб одна частина співвідносилася з іншою як предмет і зображення, то у цієї фігури є площина симетрії в орієнтації, яка збігається з розрізом. Таких площин інколи може бути одна або декілька. При цьому модель після огляду слід тримати нерухомо. Якщо обертати її, то одну площину або вісь симетрії можна помилково порахувати кілька разів.

Щодо граней, ребер і вершин моделі *площина симетрії* може приймати такі положення:

- 1) проходити через ребра,
- 2) лежати перпендикулярно до ребер у їх серединах,
- 3) проходити через середини грані тільки перпендикулярно до неї,
- 4) перетинати вершини кристалів.

Для знаходження поворотних *осей симетрії* треба уявляти, де такі осі можуть виходити на моделі: очевидно, тільки в серединах ребер, у центрах граней і у вершинах гранних кутів.

У серединах ребер можуть виходити лише осі L_2 . У центрах граней можуть виходити осі симетрії різних порядків. Причому сама грань (плоска фігура) при відповідному повороті навколо осі має суміщатися зі своїм вихідним положенням. У вершинах гранних кутів також можуть виходити осі різних порядків. При цьому число ребер, що симетрично сходяться у вершині, має бути кратним найменшій осі.

Щоби переконатись у тому, що в досліджуваній моделі справді є центр симетрії, рекомендують покласти одну із граней перед собою на стіл. Якщо доверху обернена якась вершина чи ребро, це одразу свідчить про те, що центру симетрії в моделі

немає. Якщо зверху є грань, паралельна поверхні стола, то наявність центру симетрії можлива. Якщо для всіх граней виявиться паралельність протилежних граней, то в даній фігурі є центр симетрії. Слід пам'ятати, що обидві протилежні грані мають бути однаковими (рис. 27, з, 30, 42). У всіх центросиметричних фігурах паралельні грані мають антипаралельні ребра (рис. 27, з).

Дослідження на наявність *дзеркально-поворотної осі* проводять таким чином. Орієнтують модель так, щоби передбачувана вісь була вертикальною. Відмічають (запам'ятовують) на верхній половині моделі будь-яку характерну грань або ребро. Роблять уявний розріз через середину моделі, перпендикулярно до передбачуваної осі, й подумки обертають верхню половину, залишаючи нижню нерухомою. Якщо після повороту на 90 або 60° верхня половина стане дзеркальним відображенням нижньої, то досліджувана вісь є справді дзеркально-поворотною віссю: віссю $L_4 (=Li_4)$ (рис. 36) або $L_6 (=Li_3 = L_3C)$ (рис. 43). Інші дзеркально-поворотні осі звичайно знаходити немає потреби, тому що вони зводяться до простіших елементів симетрії: $L_1 = P (\perp Li_2)$, $L_2 = C (=Li_1)$, $L_3 = L_3 \perp P (=Li_6)$.

Порівняння розглянутих раніше елементів симетрії з повною формулою симетрії можливих 32 видів дасть змогу правильно визначити вид симетрії даної моделі.

А тепер розглянемо приклади визначення наборів елементів симетрії на конкретних моделях. На рис. 43, а представлений багатогранник, у якого всі шість ромбічних граней однакові й попарно паралельні (позначені цифрою 1). Цю просту форму називають **ромбоедром**. Серед його елементів симетрії в уже розглянутому вище (після теореми 5) узагальнюючому прикладі знайдено центр симетрії C і три площини симетрії (рис. 43, б), на перетині яких лежить вісь L_3 . Вісь L_3 одночасно є одиничним напрямком цього багатогранника. Перпендикулярно до площин симетрії та потрійної осі розташовані три осі L_2 . Виходи подвійних осей ($3L_2$) лежать усередині попарнопаралельних бічних ребер ромбоедра (рис. 43, в).

Повний набір елементів симетрії ромбоєдричного багатогранника – $L_3 3L_2 3PC$. На стереограмі ромбоедра (рис. 43, в) продемонстровані всі визначені елементи симетрії. Кружечками позначені полюси верхніх граней, а хрестиками – нижні. Поруч із ними є цифри 1, тотожність яких свідчить про те, що це однакові грані *однієї простої форми*. Усі грані представленої фігури

нахилені: на стереограмі їх полюси лежать усередині екваторіального кола. Досконала спайність по ромбоєдру характерна для такого поширеного мінералу як кальцит CaCO_3 .

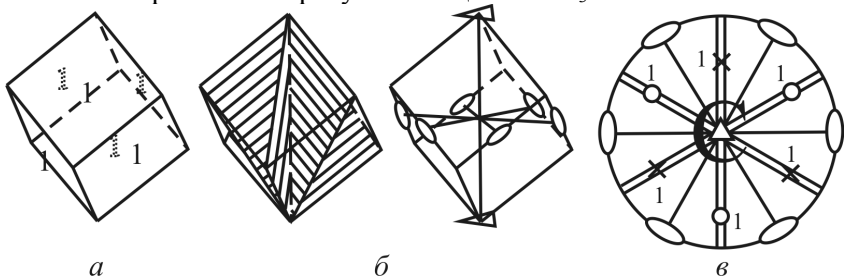


Рис. 43. Розбір елементів симетрії ромбоєдра: *a* – модель ромбоєдра, *б* – його елементи симетрії – L_33L_23PC (сполучення L_3C відповідає осям L_6 або Li_3), *в* – стереограма елементів симетрії й полюсів граней ромбоєдра

Тетрагональний тетраєдр (рис. 44, *a*) складається з чотирьох граней у вигляді рівнобедрених трикутників. У нього є дві вертикальні площини симетрії, які проходять через середини граней (рис. 44, *б*). На їхньому перетині лежить вертикальна інверсійно-поворотна вісь Li_4 . Зрозуміло, що з нею збігається одиничний напрямок цієї фігури. Перпендикулярно до інверсійно-поворотної осі та під кутом у 45° до вертикальних площин симетрії розміщені дві поворотні осі L_2 . Ці дві L_2 проходять через середини похилих ребер тетраєдра (рис. 44, *б*). Згідно з теоремою 6, осі L_2 розташовані в позиції бісектриси кута між площинами симетрії (рис. 44, *в*). Повний набір елементів симетрії багатогранника становить Li_42L_22P . На стереограмі (рис. 44, *в*) показано розташування елементів симетрії та граней тетрагонального тетраєдра. Цифрові позначки 1 вказують на еквівалентність граней і належність їх до однієї простої форми. Зовнішню форму у вигляді тетрагонального тетраєдра часто мають кристали халькопіриту CuFeS_2 і такий рідкісний мінерал як гелівін $\text{Mn}_4(\text{Be}_3\text{Si}_3\text{O}_{12})\text{S}$.

Наступний приклад стосується комбінації граней трьох простих форм **ортоклазу** $\text{K}\{\text{AlSi}_3\text{O}_8\}$ (рис. 45, *a*). Насамперед необхідно визначити кількість однакових граней у його моделі. Наявні дві однакові паралельні грані бічного пінакоїда **1**, дві паралельні грані похилого пінакоїда **2** та чотири попарно паралельні вертикальні грані ромбічної призми **3**. Багатогранник має одну поворотну вісь L_2 , дзеркальну площину симетрії P (рис. 45, *б*) та центр інверсії C .

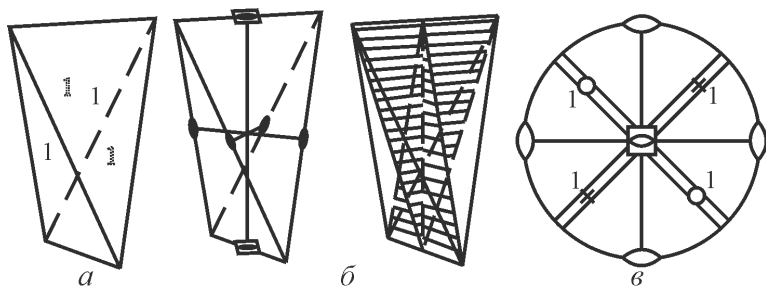


Рис. 44. Розбір елементів симетрії тетрагонального тетраедра: *a* – модель тетрагонального тетраедра, *б* – його елементи симетрії – L_2PC , *в* – стереограма моделі тетрагонального тетраедра з елементами симетрії й полюсами граней

Стереограма (рис. 45, *в*) демонструє сукупність елементів симетрії L_2PC та розташування полюсів граней щодо них. Два полюси *вертикальних* граней пінакоїда **1** лежать на колі, а полюси двох *похилих* граней пінакоїда **2** – всередині екваторіального кола. Полюси чотирьох граней ромбічної призми **3** проєктуються на екваторіальне коло. Один із одиничних напрямків збігається з L_2 , а безліч інших орієнтуються у площині P . Ортоклаз має спайність по двох пінакоїдах 1 і 2. Площини сколів утворюють прямий кут (ортос – прямий). Звідси й назва мінералу.

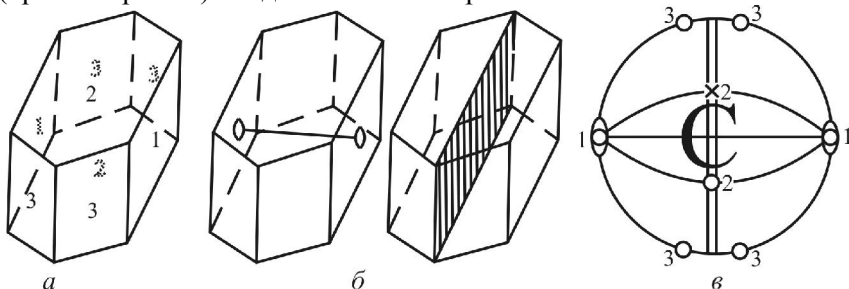


Рис. 45. Розбір елементів симетрії кристала ортоклазу: *a* – модель кристала ортоклазу (комбінація двох пінакоїдів 1 і 2 та ромбічної призми 3); *б* – розташування елементів симетрії L_2 і P в моделі – L_2PC ; *в* – стереограма моделі ортоклазу

А тепер розглянемо симетрію та форму кристалів йоднокислого натрію $NaIO_4 \cdot 2H_2O$. На його моделі наявні чотири прості форми, що складають комбінацію тригональних пірамід і моноедра (рис. 46, *a*). Єдиний елемент симетрії тут представлений поворотною віссю L_3 (рис. 46, *б*). З нею збігається одиничний напрямок. Усі грані пірамід (1, 2, 3) симетрично розташовані

навколо осі L_3 . Одна нижня горизонтальна грань моноедра проєктується хрестиком у центр стереограми моделі (рис. 46, в).

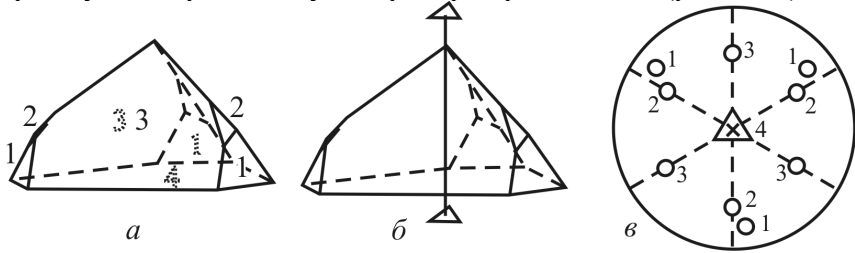


Рис. 46. Видяг і стереограма кристала йоднокислого натрію з однією L_3 : а – модель багатогранника (комбінація трьох тригональних пірамід 1, 2, 3 та моноедра 4); б – позиція L_3 у багатограннику; в – стереограма моделі

Проста форма **гексаедр** (куб) є шестигранником із квадратними гранями (рис. 47). Одиничних напрямків немає. Набір елементів симетрії моделі – максимально можливий у кристалах (рис. 48). Це три поворотні осі L_4 , чотири поворотні осі L_3 , шість осей L_2 (рис. 48, а, б, в). Крім цього, є три координатні площини симетрії, паралельні граням куба (одна горизонтальна та дві вертикальні) й шість діагональних (рис. 48, г, і). Завершує набір елементів симетрії центр інверсії. Всі перелічені елементи симетрії ($3L_44L_36L_29PC$) зображені на стереограмі (рис. 47).

Кристали у формі куба часто утворюють галіт NaCl, флюорит CaF₂, галеніт PbS, пірит FeS₂. Для галіту й галеніту притаманна спайність по кубу.

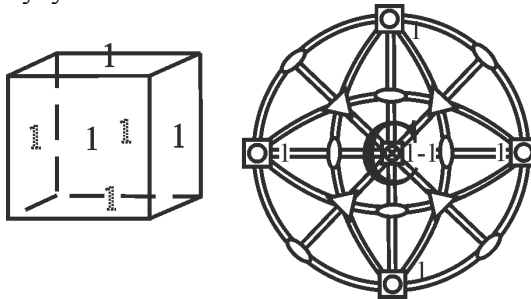


Рис. 47. Гексаедр (куб) і стереограма полюсів його граней та елементів симетрії

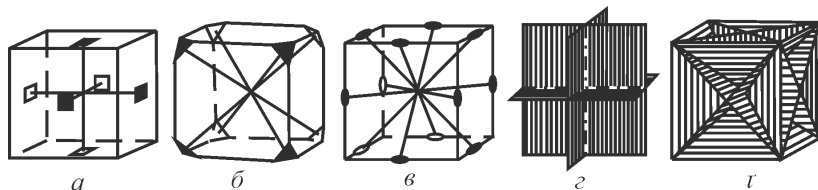


Рис. 48. Розташування елементів симетрії моделі високосиметричного гексаедра ($3L_44L_36L_29PC$): *a* – трьох осей четвертого порядку; *b* – чотирьох осей третього порядку; *c* – шести осей другого порядку; *z* – трьох координатних площин симетрії; *r* – шести діагональних площин симетрії

Питання для самоконтролю

Які елементи симетрії належать до першого роду, а які – до другого?

Чому у звичайних кристалах неможливі осі L_5 ?

Чим відрізняється дія простих осей симетрії від інверсійних і дзеркальних осей?

Чим відрізняються точкові групи симетрії від просторових?

Що таке одиничні та симетрично-рівні напрямки?

Скільки одиничних напрямків є у кристалах триклінної, моноклінної, ромбічної сингоній і в кристалах середньої категорії?

Який набір елементів симетрії породжує взаємодія вертикальної L_4 та горизонтальної L_2 ?

Який елемент симетрії породжує взаємодія вертикальної L_4 з однією з косих осей L_3 ?

Як орієнтуються різні елементи симетрії на моделі тетрагональної призми і гексаедра?

ТЕМА 4

ВИВІД ВИДІВ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІВ З ОДИНИЧНИМИ ТА БЕЗ ОДИНИЧНИХ НАПРЯМКІВ

Як вже було зазначено, *видом симетрії* даної фігури (точковою групою) називається повна просторова сукупність її кінцевих елементів симетрії. Усі фігури, які мають одні й ті ж однаково розміщені елементи симетрії, належать одному видові симетрії. Точковою групою називається така комбінація (сполучення) симетричних операцій, у якій виведені всі рівнодіючі кінцеві елементи симетрії. Наприклад, $2P$ не є видом симетрії, оскільки в результаті складання двох площин симетрії на їх перетині має з'явитися вісь симетрії L_2 (якщо площини перетинаються під прямим кутом). Таке сполучення породжує вид симетрії L_22P .

Тому однією з головних задач вчення про симетрію кристалів є вивід усіх можливих видів симетрії. Для довільних геометричних систем, зокрема для геометричних багатогранників, існує майже нескінченно велике число наборів елементів симетрії. Для кристалічних багатогранників і кристалічної речовини число можливих видів симетрії обмежене. Це викликано тим, що, згідно з теорією і спостереженням, у кристалах можливі лише прості одинарні, подвійні, потрійні, четвірні й шестірні поворотні та складні дзеркально-поворотні й інверсійні осі симетрії. Серед останніх найчастіше використовуються лише Li_4 та Li_6 .

Можливі також площини симетрії P (вони ідентичні перпендикулярам до Li_2) та центр симетрії C , який ідентичний дії Li_1 .

Вивід можливих видів симетрії поділяється на дві частини: першу – для кристалів з одиничними напрямками (нижча і середня категорії, які включають шість сингоній – триклінну, моноклінну, ромбічну й тетрагональну, тригональну й гексагональну) і другу – для кристалів без одиничних напрямків (вища категорія, в якій є тільки кубічна сингонія).

ВИВІД ВИДІВ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІВ З ОДИНИЧНИМИ ОСОБЛИВИМИ НАПРЯМКАМИ

Сюди належать кристалічні багатогранники, що мають як мінімум один вертикальний одиничний напрямок.

1) Якщо цей одиничний напрямок збігається з єдиною віссю симетрії L_n , то тут можна вивести п'ять видів симетрії, що відповідають п'яти можливим у кристалах простим осям симетрії: L_1, L_2, L_3, L_4, L_6 . У випадку L_1 елементів симетрії немає. Тут є лише нескінченна кількість інших як завгодно орієнтованих осей L_1 .

Усі ці одержані види симетрії, кожен з яких складається лише з однієї осі симетрії L_n , належать до **примітивних видів симетрії** (за винятком L_2 , який належить аксіальному видові симетрії).

Решту видів симетрії з єдиним особливим одиничним напрямком – поворотною віссю L_n , орієнтованою у просторі вертикально, можна одержати додаванням до L_n таких елементів симетрії:

- центру симетрії C , розміщеного на осі L_n ;
- вертикальної дзеркальної площини симетрії (P_v), яка проходить уздовж осі L_n ;
- горизонтальної площини симетрії (P_h), перпендикулярної до осі L_n ;
- осі L_2 , перпендикулярної до осі L_n ;
- будь-якої комбінації перерахованих вище варіантів.

Додавання вказаних елементів симетрії до єдиної осі L_n не порушує одиничності заданого вертикального напрямку L_n у кристалі. Для отримання нових результуючих елементів симетрії використовують теореми додавання (множення).

2) Додавання центру симетрії (C) до одиничного напрямку L_n , представленого однією з *парних* осей L_2, L_4, L_6 , згідно з теоремою 3, дасть види симетрії L_2PC, L_4PC, L_6PC (оскільки взаємодія парної осі симетрії з центром симетрії C призводить до виникнення площини симетрії, перпендикулярної парній вихідній осі симетрії). Додавання центру симетрії C до *непарних* осей (L_1 і L_3) перетворить їх на інверсійні – Li_1 і Li_3 . У результаті будуть одержані два види симетрії з інверсійними осями: $L_1 + C (= Li_1)$ і $L_3 + C (= Li_3)$. Таким чином, підсумково ми одержали нові види симетрії **центрального виду симетрії**: C, L_3C, L_4PC, L_6PC (за винятком виведеного тут набору L_2PC , який відносять до планаксіального виду).

3) Додавання вертикальної площини симетрії, розміщеної паралельно поворотній осі L_n , згідно з теоремою 5, забезпечить виникнення таких видів симетрії $L_n nP$ **планального виду симетрії**:

$$L_1 1P_v (= P), L_2 2P, L_3 3P, L_4 4P, L_6 6P.$$

Слід звернути увагу на те, що якщо порядок поворотної осі L_n непарний, то всі площини будуть еквівалентні між собою

(наприклад, L_33P). Якщо ж порядок осі парний (L_4 та L_6), то площини, які проходять через них, утворюють нееквівалентні групи (наприклад, $L_44P = L_42P'2P''$ і $L_66P = L_63P'3P''$).

4) Додавання перпендикулярної до осі L_n горизонтальної площини симетрії (P_h) призведе до видів $L_n P_h$. Тут у видах симетрії з парними осями L_n , згідно з теоремою 3, додатково з'явиться C :

$$(L_1)P_h = P, L_2PC, L_3P(=Li_6), L_4PC, L_6PC.$$

5) Беремо L_n , паралельну вертикальному одиничному напрямку, та додаємо перпендикулярно до неї вісь L_2 . Згідно з теоремою 4, отримуємо $L_n nL_2$, тобто такі види симетрії: $L_11L_2 (=L_2)$, $L_22L_2 (=3L_2)$, L_33L_2 , L_44L_2 , L_66L_2 . Вони належать до **аксіальних видів симетрії**.

6) Беремо L_n , паралельну одиничному напрямку, й додаємо сукупність кількох елементів симетрії (наприклад, L_2 , перпендикулярну до L_n , та додатково – центр симетрії C). Тобто розглянемо варіант $L_n + \perp L_2 + C$. У результаті перпендикулярно до L_n отримуємо n осей L_2 (згідно з теоремою 4) та n вертикальних площин симетрії P (згідно з теоремою 5). Перпендикулярно до парних осей L_4 та L_6 додатково одержимо нормальну до них площину симетрії. Результуючими будуть такі набори елементів симетрії: $L_11L_2PC (=L_2PC)$, $L_22L_23PC (=3L_23PC$ – рис. 45, а), L_33L_23PC (рис. 45, з), L_44L_25PC , L_66L_27PC . За допомогою цих операцій отримуємо **планаксіальні види симетрії**.

Аналогічні результати одержимо, якщо такі наступні перестановочні варіанти:

7) $L_n + \parallel P + C$ (тут будуть породжуватися перпендикулярні до P осі L_2). Наприклад, якщо візьмемо вісь L_3 , паралельну до неї P , а також центр симетрії C , то, розмножуючи L_2 і P під дією L_3 , отримаємо $3L_2$ і $3P$. У підсумку одержимо L_33L_23PC .

Загалом отримаємо всі набори елементів симетрії, які вже розглянуті в пункті 6.

8) У випадку $L_n + \parallel P + \perp L_2$ буде породжений центр симетрії C . Наприклад, якщо візьмемо $L_3 + \parallel P + \perp L_2$, то отримаємо L_33L_23PC .

Таким чином, у випадках 7 і 8 також одержимо планаксіальні види симетрії.

А тепер розглянемо вивід видів симетрії з інверсійними осями Li_4 і $Li_6 (=L_3 \perp P)$.

9) Беремо одиничний напрямок, з яким збігаються інверсійні осі Li_4 і Li_6 . Осі $Li_1(=C)$, $Li_2(=\perp P)$ та $Li_3(=L_3C)$ зручніше замінити

вказаними простими елементами симетрії. Відповідні їм види симетрії вже були розглянуті. Отже, одержимо лише такі два види симетрії: Li_4 і Li_6 . Їх розглядають як **інверсійно-примітивні види симетрії**.

10) З одиничним напрямком суміщаємо Li_n (в даному випадкові лише Li_4 та Li_6) і додаємо L_2 перпендикулярно до інверсійної осі. Згідно з теоремами 4 і 6 одержуємо два нових види симетрії: Li_42L_22P та Li_63L_23P (рис. 45, б і в). Осі L_2 опиняються в позиції бісектрис кутів між площинами симетрії. Ці набори елементів симетрії належать до **інверсійно-планальних видів симетрії**. Ці ж набори елементів симетрії одержуємо у таких перестановочних варіантах:

11) Беремо Li_n (Li_4 та Li_6) та паралельну P . Згідно з теоремами 5 і 6, отримуємо додаткові L_2 , зорієнтовані під кутом до P (у позиції бісектрис кутів між площинами симетрії). Підсумковий варіант зводиться до пункту 10.

12) Беремо горизонтальну L_2 та вертикальну площину симетрії P , зорієнтовану під кутом 60° і 45° до L_2 . Згідно з теоремою 6, отримаємо вертикальні Li_4 та Li_6 . Підсумкові набори елементів симетрії ідентичні пунктам 10 та 11 (рис. 49, б і в).

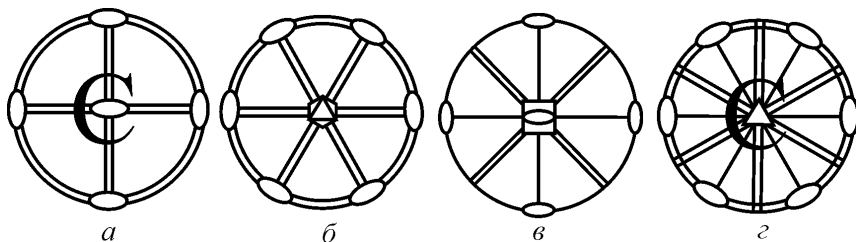


Рис. 49. Стереографічні проекції видів симетрії: а – $3L_23PC$, б – Li_63L_23P (L_33L_24P), в – Li_42L_22P , г – L_33L_23PC

Таким чином, у кристалах з одиничними напрямками отримали 27 різних неповторюваних видів симетрії.

ВИВІД ВИДІВ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІВ БЕЗ ОДИНИЧНИХ НАПРЯМКІВ

У кристалах кубічної сингонії завжди є $4L_3$, які збігаються з тілесними діагоналями куба (рис. 48, б). Завдяки їм будь-який інший напрямок буде розмножений цими осями і дасть симетрично-рівні напрямки. Тому в кристалах кубічної сингонії одиничних напрямків немає. У моделях і кристалах різних видів симетрії кубічної сингонії позиція $4L_3$ однакова (рис. 48, б). На стереографічних проекціях $4L_3$ завжди лежать у центрах октантів (рис. 50). Треба вміти правильно орієнтувати будь-який кристал щодо $4L_3$.

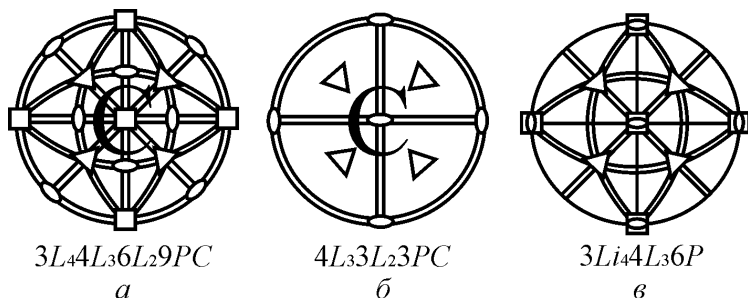


Рис. 50. Стереографічні проекції видів симетрії кубічної сингонії: *a* – планаксіальний вид; *б* – центральний вид; *в* – планальний вид

Щоб легко розібратись з орієнтацією і повними наборами інших елементів симетрії в кубічній сингонії та їх позицією на стереографічних проекціях, обов'язково треба знати орієнтацію допоміжних координатних і діагональних площин і осей у просторі й на проекції.

Три координатні осі орієнтуються вздовж нормалей до можливих граней куба (рис. 48, а). З координатними осями в різних видах кубічної сингонії можуть збігатися $3L_4$, або $3Li_4$, або $3L_2$ (рис. 50). Під час проектування одну координатну вісь розташовують у центрі стереограми, а дві – на екваторіальному колі проекції (рис. 50).

Три координатні площини проходять через координатні осі. З ними можуть збігатися три координатні площини симетрії (рис. 48, з), але необов'язково. На стереограмах координатні площини симетрії ($3P$) завжди розташовують однаково (рис. 50, б).

Шість діагональних площин проходять через протилежні ребра по діагоналях граней куба (рис. 48, т). З ними можуть

збігатися шість діагональних площин симетрії ($6P$), але необов'язково. На стереограмі кожна діагональна площина симетрії проходить через координатну вісь і пару осей L_3 (рис. 50, в).

Шість діагональних осей проходять через середини протилежних ребер куба. Дві з них горизонтальні та чотири – похилі. З діагональними осями можуть збігатися $6L_2$ (рис. 48, в), але необов'язково. На стереограмах діагональні осі розташовуються на перетині координатної та діагональної лінії, і відповідно, координатної й діагональної площин симетрії, якщо вони є.

Знайшовши $4L_3$ і хоча б одну з координатних або діагональних площин або осей симетрії, можна сміливо проектувати стереографічну проекцію інших ідентичних осей та площин симетрії (у розглянутих позиціях!). Найпростіше відшукати вертикальні осі й площини симетрії, а далі будувати ідентичні їм.

Під час проектування елементів симетрії полюсів граней моделей кубічної сингонії обов'язково зображають допоміжні координатні й діагональні лінії або відповідні площини й осі симетрії. Опанувавши наведену методику і термінологію, можна здійснювати вивід можливих п'яти видів симетрії кубічної сингонії.

За основу береться найменш симетричний набір елементів симетрії – $4L_33L_2$ (з координатними осями L_2). Його називають **примітивним видом** кубічної сингонії.

Решту видів симетрії можна одержати додаванням до примітивного набору:

- центру симетрії;
- діагональної P ;
- діагональної L_2 ;
- будь-якої комбінації перелічених варіантів.

Для отримання сукупного результату використовують теорему додавання (множення).

Додавши *центр симетрії* C до набору $4L_33L_2$, отримаємо три координатні площини симетрії ($3P$), перпендикулярно до координатних L_2 (за теоремою 3). Сукупний результат ($4L_33L_23PC$) називають **центральним видом** кубічної сингонії (рис. 50, б).

Додамо до примітивного набору ($4L_33L_2$) *діагональну* вертикальну площину $P_{\text{діаг}}$. Таких ідентичних діагональних площин симетрії завжди шість. Вони пов'язані осями L_3 . Отже, отримаємо групу з $6P_{\text{діаг}}$. Кут між доданою $P_{\text{діаг}}$ і власною горизонтальною L_2 становить 45° . Згідно з перестановочним варіантом теореми 6, замість вертикальної координатної L_2 отримаємо Li_4 . Три

координатні осі ідентичні. Тому в цій позиції будемо мати три ідентичні координатні осі $3Li_4$. Підсумковим результатом буде $3Li_44L_36P$, який називають **планальним видом** (рис. 50, в). Зверніть увагу на те, що вертикальна вісь Li_4 тут супроводжується паралельними діагональними P . Це дає змогу відрізнити координатні осі Li_4 від координатних L_2 .

До примітивного набору додамо горизонтальну *діагональну* L_2 . Ідентичні з нею діагональні L_2 , пов'язані між собою осями L_3 , утворюють групу $6L_2$. Додана діагональна L_2 і власна координатна горизонтальна L_2 між собою утворюють кут 45° . За теоремою Ейлера та її наслідком – теоремою 4, взаємодія двох горизонтальних осей L_2 і L_2 , які утворюють між собою кут 45° , дадуть вертикальну вісь з елементарним кутом 90° , тобто вісь L_4 . Координатні осі завжди утворюють групу з ідентичних трьох осей: тобто маємо $3L_4$. Підсумковий результат – $3L_44L_36L_2$. Він відповідає **аксіальному виду** кубічної сингонії.

Якщо до набору $4L_33L_2$ додати будь-яку комбінацію різних розглянутих вище варіантів, то всі вони дадуть максимальний підсумковий набір елементів симетрії – $3L_44L_36L_29PC$ (рис. 50, а). Цей вид симетрії називають **планаксіальним видом**.

Приклади:

- $4L_33L_2 + \text{діагональна } P + C$. Як підсумок отримаємо три координатні P (дія $C + 3L_2 = 3P$) та шість ідентичних діагональних P (взаємодія $4L_3$ з діагональною P). На перетинах діагональних і координатних P , які утворюють кут 90° , отримуємо $6L_2$. А на перетинах усіх площин симетрії під кутом 45° утворюються $3L_4$ (замість координатних $3L_2$). У підсумку одержимо $3L_44L_36L_29PC$ (рис. 50, а);
- $4L_33L_2 + \text{діагональна } L_2 + C$. У результаті взаємодії $4L_3$ з діагональною L_2 утворюються шість ідентичних діагональних L_2 ($6L_2$). А кожна діагональна L_2 і сусідня L_3 , за теоремою Ейлера, дадуть координатну L_4 . Як наслідок три координатні L_2 перетворюються на $3L_4$. Перпендикулярно до парних осей плюс C утворюються $9P$. У підсумку також одержимо $3L_44L_36L_29PC$ (рис. 50, а).

Отже, в кубічній сингонії є п'ять різних видів симетрії з кількома осями вищого порядку, але без одиничних напрямків. Відповідно, кристали кубічної сингонії можуть утворювати п'ять різновидів кубів, які відрізняються за симетрією граней. Наприклад, куби піриту (центральний вид) на гранях мають координатне

штрихування (є координатні P), а куби сфалериту (планальний вид) – діагональне штрихування (є діагональні P).

Таким чином, підсумково отримали 32 можливих види симетрії (8 – у нижчій, 19 – у середній і 5 – у вищій категоріях).

Для скінченних фігур вивід можливих сукупностей елементів симетрії у 1830 р. зробив марбурзький професор І.Ф.Х. Гессель. Але він розглянув не тільки кристалографічні набори, але й набори з L_5 . Тому мінералоги не звернули увагу на цю роботу і забули про неї, хоча зараз відомі специфічні квазікристали з L_5 (Al–Mn сплави й органічні фулерени). Але вони мають більш складну періодичну будову: у них немає звичайних трансляцій і просторових ґраток, за якими побудовані всі кристали. Вдруге, але тільки для звичайних кристалів, вивід 32 видів симетрії зробив у 1867 р. петербурзький професор артилерії генерал А.В. Гадолін.

Питання для самоконтролю

Як виводяться примітивні, планальні й аксіальні види симетрії?

Як впливає додавання центру інверсії (C) до парних поворотних осей L_2, L_4 і L_6 ?

Які елементи симетрії наявні в інверсійно-планальних видах симетрії та як вони розташовані на стереограмах?

Як розташовані координатні й діагональні лінії та осі L_3 на стереограмах кристалів кубічної сингонії?

Який результат взаємодії діагональної осі L_3 і вертикальної L_4 (за теоремою Ейлера в кристалах кубічної сингонії)?

Як виводяться набори елементів симетрії в кубічній сингонії?

Тема 5

КЛАСИФІКАЦІЯ ВИДІВ СИМЕТРІЇ

Симетрія кристалів як кінцевих фігур (багатогранників росту) обмежена лише 32 видами симетрії. Спочатку зупинимося на загальному огляді запропонованої табл. 1. У ній для кожної категорії та сингонії представлені відповідні назви видів симетрії та повні сукупності їх елементів симетрії. Подано по дві назви видів симетрії: перша – за характерними простими формами загального положення, друга – за сукупністю породжуючих елементів симетрії. Для кожного виду симетрії наведена його символіка – спрощена міжнародна й за Шенфлісом.

Максимальне число видів мають дві сингонії середньої категорії – тетрагональна і гексагональна. У триклінній сингонії є тільки два види симетрії. Серед виведених видів симетрії розрізняють примітивні, центральні, планальні, аксіальні, планаксіальні, інверсійно-примітивні й інверсійно-планальні види.

У *примітивні* включені види симетрії з однією поворотною віссю симетрії (за винятком осі L_2 , яка належить аксіальному виду моноклінної сингонії). Якщо є лише одна інверсійна вісь Li_4 або Li_6 , то такі види називають *інверсійно-примітивними*. Сукупності елементів симетрії *центральных* видів одержують додаванням центру інверсії до осей симетрії примітивних видів (виняток – L_2PC , який належить планаксіальному виду моноклінної сингонії). Для *планальних* видів породжуючими елементами симетрії є ті ж осі примітивних видів із додаванням до них площини симетрії, яка проходить через вісь. Для *інверсійно-планальних* видів симетрії породжуючими є інверсійні осі Li_4 або Li_6 з доданою до них площиною симетрії, яка проходить через вісь. В *аксіальних* видах симетрії породжуючими елементами симетрії є ті ж осі примітивних видів з додаванням перпендикулярних до них подвійних осей L_2 . За утворювальні елементи симетрії *планаксіальних* видів симетрії взято елементи аксіальних видів із додаванням до них центру інверсії. Можна також використати комбінацію кількох інших елементів симетрії.

У наступній графі наведені символи Браве, які показують повну формулу симетрії даного виду. Поруч зі символами Браве, в наступних колонках, подано найширше вживані сучасні міжнародні символи Германа-Могена і символи Шенфліса, пояснення яких наведене у подальших розділах. У стовпчику міжнародних символів у дужках подано варіанти, які вживають за кордоном.

Порівняння знайдених на моделі сполучень елементів симетрії з табл. 1 допоможе у правильному визначенні симетрії та дасть більш конкретне уявлення про 32 кристалографічні види.

Нижча	Три- клинна	Моноедричний Пінакоїдальний	Примітивний Центральний
	Моно- клинна	Діедричний осьовий Діедричний безосьовий Ромбопризматичний	Аксіальний Планальний Планаксіальний
	Ромбіч- на	Ромбо-тетраедричний Ромбо-пірамідальний Ромбо-дипірамідальний	Аксіальний Планальний Планаксіальний
Середня	Триго- нальна	Тригонально-пірамідальний Ромбоедричний Дитригонально-пірамідальний Тригонально-трапоедричний Тригонально-скаленоедричний	Примітивний Центральний Планальний Аксіальний Планаксіальний
	Тетраго- нальна	Тетрагонально-пірамідальний Тетрагонально-дипірамідальний Дитетрагонально-пірамідальний Тетрагонально-трапоедричний Дитетрагонально-дипірамідальний Тетрагонально-тетраедричний Тетрагонально-скаленоедричний	Примітивний Центральний Планальний Аксіальний Планаксіальний Інверсійно-примітивний Інверсійно-планальний
	Гексаго- нальна	Гексагонально-пірамідальний Гексагонально-дипірамідальний Дигексагонально-пірамідальний Гексагонально-трапоедричний Дигексагонально-дипірамідальний Тригонально-дипірамідальний Дитригонально-дипірамідальний	Примітивний Центральний Планальний Аксіальний Планаксіальний Інверсійно-примітивний Інверсійно-планальний
Вища	Кубічна	Пентагон-тритетраедричний Дидодекаедричний Гексатетраедричний Пентагон-триоктаедричний Гексоктаедричний	Примітивний Центральний Планальний Аксіальний Планаксіальний

L_1 C	$\bar{1}$	C_1 C_i
L_2 P L_2PC	2 m $2/m$	C_2 C_s C_{2h}
$3L_2$ L_22P $3L_23PC$	222 $mm2$ $mmm (2/m 2/m 2/m)$	D_2 C_{2v} D_{2h}
L_3 L_3C L_33P L_33L_2 L_33L_23PC	3 $\bar{3}$ $3m$ 32 $\bar{3}m (\bar{3} 2/m)$	C_3 C_{3i} C_{3v} D_3 D_{3d}
L_4 L_4PC L_44P L_44L_2 L_44L_25PC Li_4 Li_42L_22P	4 $4/m$ $4mm$ 422 $4/mmm (4/m 2/m 2/m)$ $\bar{4}$ $\bar{4}2m$	C_4 C_{4h} C_{4v} D_4 D_{4h} S_4 D_{2d}
L_6 L_6PC L_66P L_66L_2 L_66L_27PC $Li_6 (=L_3\perp P)$ $Li_63L_23P (=L_33L_24P)$	6 $6/m$ $6mm$ 622 $6/mmm (6/m 2/m 2/m)$ $\bar{6}$ $\bar{6}m2 (6m2)$	C_6 C_{6h} C_{6v} D_6 D_{6h} C_{3h} D_{3h}
$4L_33L_2$ $4L_33L_23PC$ $3Li_44L_36P$ $3L_44L_36L_2$ $3L_44L_36L_29PC$	23 $m\bar{3} (2/m \bar{3})$ $\bar{4}3m (43m)$ 432 $m\bar{3}m (4/m \bar{3} 2/m)$	T T_h T_d O O_h

МІЖНАРОДНІ ПОЗНАЧЕННЯ ВИДІВ СИМЕТРІЇ (СИМВОЛІКА ГЕРМАНА-МОГЕНА)

Найбільш поширеною у кристалографічній практиці є символіка, початково запропонована К.Г. Германом (1898–1961) і пізніше трохи змінена стосовно гексагональних кристалів Ш. Могеном (1878–1958). Ця символіка вигідно відрізняється від простої та наочної, але не загально визнаної символіки Браве. Незважаючи на те, що у досить громіздких символах Браве реєструються всі елементи симетрії точкової групи, вони не відображають усі її операції. Символіка видів симетрії Германа-Могена наведена в табл. 1.

Міжнародний символ видів симетрії (символ Германа-Могена) недостатньо компактний, але, на відміну від символів Браве і Шенфліса, чітко вказує на орієнтацію кристала щодо обраних координатних осей. Міжнародний символ складається в загальному випадку з трьох позицій, на яких реєструються нееквівалентні *особливі напрямки* – осі симетрії (поворотні або інверсійні).

Поворотні осі симетрії позначають арабськими цифрами, що відповідають їхньому порядку: 1, 2, 3, 4, 6. Зі складних осей у міжнародних символах використовують тільки інверсійні, позначаючи їх також цифрою, але з рискою над нею: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$. Однак у навчальних цілях, якщо хочуть акцентувати увагу на дзеркальному аналогові певної осі, над цифрою ставлять кружечок – $\dot{1}$, $\dot{2}$, $\dot{3}$, $\dot{4}$, $\dot{6}$. Замість інверсійної осі Li_2 ($=\perp P$) позначають нормаль до площини симетрії буквою m (англ. *mirror* – дзеркало). Центр інверсії C позначають його інверсійним аналогом – віссю 1-го порядку – $\bar{1}$ (читається “один з рискою”).

Якщо вісь симетрії (n) збігається з нормаллю до площини (m), то їх записують у вигляді дроби ($2/m$): в чисельнику – вісь, а в знаменнику – нормаль до площини (наприклад, $L_2PC = 2/m$; $L_3P = 3/m = \dot{3} = \bar{6}$). У розглянутих прикладах площина симетрії нормальна до осі симетрії. Однак, якщо вісь породжена іншими елементами симетрії, вже зареєстрованими в символі, то її позначення, як правило, опускають, залишаючи лише символ площини m (наприклад, $3L_23PC = 2/m2/m2/m = mmm$, $L_44L_25PC = 4/m2/m2/m = 4/mmm$). Не можна опускати лише позначення осі. Якщо вона

головна в середній категорії або якщо ми не запишемо її у символі, то загубимо (наприклад, $L_2PC = 2/m$).

Ознайомимося з правилами побудови й характерними особливостями міжнародних символів груп симетрії кожної з шести сингоній нижчої та середньої категорій.

Символи груп нижчої категорії. Групи *ромбічної сингонії* характеризуються трьома нееквівалентними особливими напрямками ($a \neq b \neq c$), по яких вибирають координатні осі X , Y і Z . Кожен із цих напрямків і реєструється на певній позиції міжнародного символу:

- на I місці – особливий напрямок по осі X ;
- на II місці – особливий напрямок по осі Y ;
- на III місці – особливий напрямок по осі Z .

Наприклад, у групі mmm ($3L_23PC$) нормалі до $3P$ відповідають особливим напрямкам осей X , Y і Z , а інші елементи симетрії породжуються взаємодією цих площин симетрії. У групі L_22P вісь 2-го порядку є породженою, та її в групі залишають, оскільки вона вказує на орієнтацію кристала в обраній системі координат: символ $mm2$ вказує на те, що поворотна вісь L_2 орієнтована вздовж вертикальної координатної осі Z . У міжнародному символі виду $3L_2 = 222$ записують усі три осі L_2 , оскільки вони нееквівалентні між собою, незважаючи на те, що кожна з трьох осей 2 є породженою двома іншими.

Види симетрії *моноклінної сингонії* характеризуються одним особливим напрямком. Тому в повному варіанті символіки Германа-Могена, щоби показати, з якою з координатних осей суміщений цей особливий напрямок, на незайняті позиції символу вводять одиниці (осі 1-го порядку). Наприклад, $L_2PC = 2/m = 11\ 2/m = C_{2h}$ (L_2 в позиції осі Z) або $1\ 2/m\ 1$ (L_2 в позиції осі Y). Тут символ $11\ 2/m$ відповідає раціональній (“фізичній”) установці моноклінного кристала ($\gamma \neq 90^\circ$), а $1\ 2/m\ 1$ – мінералогічній установці ($\beta \neq 90^\circ$). На цьому прикладі добре видно, що міжнародний символ показує орієнтацію кристала щодо координатного репера, у той час як ні символ Браве, ні символ Шенфліса не відображають його установки.

У видах *триклінної сингонії* особливих напрямків немає. Тому в символі заповнюють лише одну позицію, на якій реєструють вісь 1-го порядку: поворотну – $L_1 (=1)$ або інверсійну – $Li_1 = C (= \bar{1})$.

Символи груп середньої категорії. У міжнародному символі видів симетрії середньої категорії – *тетрагональної та гекса-*

гональної сингонії – на першій позиції символу реєструють особливий напрям, обов’язково представлений віссю вишого порядку L_n (або L_n/m). Вона завжди суміщується з координатною віссю Z . На другій позиції вказують координатні напрямки (L_2 або $\perp P$), які суміщаються з еквівалентними координатними осями $X = Y$ ($= U$). На третій позиції фіксують особливий напрямок, який розміщується щодо координатних X і Y під кутом $\alpha/2$, де α – елементарний кут повороту головної осі. Хоча елементи симетрії третьої позиції є результатом взаємодії елементів симетрії першої та другої позицій, вони включаються у символ, оскільки є нееквівалентними щодо утворюючих (породжуючих): $\overline{4}2m$, 422 , $6/mmm$.

Якщо головний напрямок Z у групі представлений віссю 4 (або $\overline{4} = \overline{4}$), то напрямок третьої позиції, який розміщений під кутом $\alpha/2 = 45^\circ$ до координатних осей X і Y , називається *діагональним*: у видах $\overline{4}2m$, $4mm$, $4/mmm$, 422 . Він збігається з діагональними площинами m або осями 2 .

Якщо $\alpha/2 = 30^\circ$ і головний напрямок Z у групі представлений віссю 6 або $\overline{6} (= \overline{3})$, то всі напрямки горизонтальних L_2 або нормалей до вертикальних P є координатними та діагональними напрямками другої і третьої позицій: у видах 622 , $6mm$, $6/mmm$. У виді $\overline{6}m2$ і осі 2 , і площини m є координатними та проходять паралельно осям X , Y , Z .

При $\alpha/2 = 60^\circ$ головною віссю є 3 або $\overline{3} (= \overline{6})$. Всі еквівалентні осі L_2 або $\perp P$ виявляються вже зареєстрованими на другій (координатній) позиції символу. Тому третя позиція в цьому випадку буде незаповненою. Наприклад, $L_33L_2 = 32$; $L_33P = 3m$; $L_33L_23PC = \overline{3}m$. У видах 3 і $\overline{3}$ незаповненою буде і друга позиція.

Нагадаймо, що координатні осі X і Y у кристалах тетрагональної сингонії суміщуються з поворотними осями симетрії 2-го порядку (якщо вони є). Тоді нормалі до діагональних площин симетрії ($m = \overline{2}$) опиняються на третій позиції символу. Таким чином, стандартним символом виду Li_42L_22P буде $\overline{4}2m$, а не $\overline{4}m2$. А в інверсійно-планальному виді гексагональної сингонії в позиції координатних горизонтальних осей X , Y (U) опиняються як осі 2-го порядку, так і проекції вертикальних площин симетрії (m). Стандартним символом виду Li_63L_23P обирають $\overline{6}m2$, а не $\overline{6}2m$.

Символи груп вищої категорії. У видах кубічної сингонії всі координатні напрямки еквівалентні між собою ($X = Y = Z$). Вони реєструються на першій позиції символу. Це можуть бути площини симетрії або осі симетрії L_2 , Li_4 та L_4 . На другій позиції записують цифру 3, що символізує обов'язкову для всіх видів кубічної системи четвірку осей 3-го порядку – $4L_3$. На третій позиції реєструють діагональні особливі напрямки (осі L_2 або нормалі до $P_{\text{діаг.}}$), тобто напрямки, що проходять по бісектрисах кутів між координатними осями. Наприклад: $3L_44L_36L_2 = 432$, $3L_44L_36L_23P_к6P_dC = 3L_44L_36L_29PC = m\bar{3}m (4/m \bar{3} 2/m)$.

Взагалі, як бачимо, у міжнародному символі в усіх сингоніях реєструють *породжуючі* елементи симетрії, а новоутворені записують лише в тому випадку, якщо вони не еквівалентні стосовно породжуючих. Якщо інверсійна вісь має більшу величину симетрії (величина симетрії осі визначається її здатністю помножувати грані), ніж її поворотна складова, то в символі показують саме інверсійну вісь. Тобто в таких випадках записують $\bar{3}$ (величина симетрії = 6), а не вісь 3 (величина симетрії = 3) та $\bar{6}$ – замість $3/m$. Аналогічно обирають $\bar{3}m$ (замість $3 2/m$) і $m\bar{3}m$, а не $m3m$. Однак символ планаксіального виду $m\bar{3}m$ мінералоги часто записують як $m3m$, оскільки інверсійна вісь $Li_3 (\bar{3})$ тут є похідною від поворотної $L_3 (3)$: завдяки появі центру інверсії C в цьому виді симетрії. На перетинах породжуючих координатних і діагональних площин симетрії, які утворюють між собою кут 90° , з'являться діагональні осі L_2 . Це парні осі, перпендикулярні до діагональних площин симетрії. А відтак породжується C , тобто утворюється комбінація $L_3C = Li_3$. Тому Li_3 є похідною, і тут позицію $L_3 (3)$ необов'язково записувати як $Li_3 (\bar{3})$. А якщо здатність розмножувати у поворотної та інверсійної осі однакова, то в символі записують поворотну: $4/m$, а не $\bar{4}/m$.

Схему побудови міжнародних символів (символів Германа-Могена) зручно уявити у вигляді таблиці (табл. 2).

Порядок точкової групи (виду) симетрії – це загальне число симетричних операцій, які зв'язують усі грані загальної простої форми даного виду. Тому порядок виду симетрії відповідає й числу *граней загальної простої форми*. Наприклад, $4/m$ – група 8-го порядку; $2/m$ – група 4-го порядку; $2, m$ і $\bar{1}$ – групи 2-го порядку.

У кожному виді симетрії загальна проста форма має максимальне число граней і в кожній сингонії буде найбільш повногранною – *гоloedричною* (від грец. *голо* (ολοξ) – повний, *едра* (εδρα) – грань). Звідси назва групи вищого порядку даної сингонії – *гоloedрія*. Наприклад, у тетрагональній сингонії група 16-го порядку – $4/m\bar{m}2$ – *гоloedрична*. Решта груп даної сингонії є підгрупами гоloedричної групи і називаються *мероедричними* від грец. *meros* (μερος) – частина. Серед них виділяють геміедричні підгрупи (від грец. *гемі* (ημι) – половина): $4/m$, $4mm$, 422 , $\bar{4}2m$. Порядок цих груп = 8. Розрізняють також тетартоедричні підгрупи (від грец. *тетартос* (тетартоζ) – чверть): 4 і $\bar{4}$. Порядок цих підгруп дорівнює 4. При восьмикратному пониженні порядку (підгрупи m , 2 , $\bar{1}$) говорять про *огдоедричні* (від грец. *огдо* (ογδω) – вісім) групи.

Таблиця 2

Схема побудови міжнародних символів

Категорія	Позиція символу		
	I	II	III
	Особливі напрямки		
Нижча ($a \neq b \neq c$)	X	Y	Z
Середня ($a = b \neq c$)	Z	$X = Y (= U)$	$a/2$ -діагональне
Вища ($a = b = c$)	$X = Y = Z$	3	$a/2$

НОМЕНКЛАТУРА ВИДІВ СИМЕТРІЇ ЗА ШЕНФЛІСОМ

Крім достатньо громіздкої символіки Браве, яка зручна як навчальна на перших етапах вивчення симетрії кристалів, широко використовують символіку, запропоновану німецьким математиком А. Шенфлісом. Символіка Шенфліса дає змогу однією буквою з відповідним нижнім індексом не лише охарактеризувати весь набір елементів симетрії конкретної точкової групи, але й об'єднати споріднені групи в окремі родини.

Перехід від навчальної символіки Браве до символів Шенфліса і назад передбачає знання правил взаємодії елементів симетрії (теорем множення).

Циклічні групи (L_n) – групи з єдиним особливим напрямком, представленим поворотною віссю симетрії, Шенфліс запропонував позначати буквою C з нижнім цифровим індексом n , що відповідає порядку цієї осі (наприклад, $C_1 = L_1$, $C_3 = L_3$, $C_4 = L_4$). Слід зауважити, що буквою C позначають групу, а не елемент симетрії.

Наприклад, C_2 – це вид із єдиною віссю 2-го порядку. Тому можна записати $3L_2$, але не можна $3C_2$, оскільки C_n – це не вісь, а вид симетрії.

Групи з єдиною інверсійною віссю симетрії супроводжуються нижнім індексом i , наприклад, $C_{3i} = L_3C$, $C_i = C$. Якщо ж віддають перевагу не інверсійній осі, а її дзеркальному еквівалентові, то групу з такими осями позначають S_n (від нім. *Spiegelachse* – дзеркальна вісь), наприклад $S_6 (= L_6) = C_{3i} (= Li_3)$, $S_4 (= L_4) = C_{4i} (= Li_4)$. При цьому цифровий індекс n завжди відповідає порядку складної осі.

Групи симетрії з побічними (горизонтальними) осями 2-го порядку, перпендикулярними головному напрямкові, позначають D_n , де нижній індекс n відповідає не лише порядковій головній поворотній осі, але й кількості побічних осей 2-го порядку (наприклад, $D_3 = L_33L_2$, $D_2 = L_22L_2 = 3L_2$). В останній групі кожна з осей L_2 може відіграти роль головної, а дві інші, перпендикулярні їй, при цьому стануть побічними).

Для позначення дзеркальних площин симетрії Шенфліс запропонував додаткові підрядкові індекси:

v (від нім. *vertical* – вертикальний) – для площин, розміщених уздовж єдиної або головної осі симетрії, котрі завжди є вертикальними ($L_22P = C_{2v}$, $L_33P = C_{3v}$);

h (від нім. *horisontal* – горизонтальний) – для площини, перпендикулярної до головної осі симетрії ($L_6PC = C_{6h}$, $L_4PC = C_{4h}$). Але зауважимо, що у виді $L_2PC = C_{2h}$ в сучасній мінералогічній установці площина симетрії P зорієнтована вертикально (кут $\beta \neq 90^\circ$), а не горизонтально (на відміну від фізичної установки, де кут $\gamma \neq 90^\circ$).

s (від нім. *Spiegel* – дзеркало) – для єдиної дзеркальної площини симетрії невизначеної орієнтації, тобто не фіксованої через відсутність інших елементів симетрії: $C_s = P (= P_v = P_h)$. У сучасній установці ця P орієнтується вертикально;

d – для вертикальних діагональних площин симетрії, що навпіл розділюють кут між горизонтальними побічними осями 2-го порядку ($D_{2d} = Li_42L_22P_d$, $D_{3d} = L_33L_23PC$).

Якщо вертикальні площини симетрії проходять через побічні (горизонтальні) осі 2-го порядку, то неминуче додатково виникає горизонтальна площина h , котрій віддається перевага у символіці Шенфліса: $D_{3h} (= L_33L_23P_vP_h = Li_63L_23P)$, $D_{6h} (= L_66L_26P_vP_hC = L_66L_27PC)$.

Види симетрії з кількома осями вищого порядку (види симетрії кубічної сингонії позначають буквою O (у видах O та O_h) в тому випадку, якщо вони містять повний осьовий набір елементів симетрії ($3L_44L_36L_2$ – осьовий комплекс *октаедра*), або буквою T (в видах T , T_h , T_d), якщо в осьовому наборі є координатні, але відсутні діагональні осі симетрії (є $3L_24L_3$ або $3Li_44L_3$ – типові осьові комплекси кубічних *тетраєдрів*).

Наявність *координатних* площин симетрії фіксують у символіці Шенфліса індексом h (тому що серед координатних площин P_k – одна площина завжди є горизонтальною $P_h - 4L_33L_23P_kC = T_h$). Якщо у групі є *координатні* й *діагональні* площини, то у символіці індексом h вказують лише горизонтальну P_h ($3L_44L_36L_23P_k6P_dC = O_h$). Звертаємо увагу на те, що в символіці T_h з осями L_3 збігаються нормалі до граней *октаедра*, а не *тетраєдра*.

Наявність тільки *діагональних* площин симетрії P_d відмічають індексом d ($3Li_44L_36P_d = T_d$).

Символіка Шенфліса виявляється зручною під час виводу видів симетрії.

Питання для самоконтролю

У яких видах симетрії всі напрямки L_2 є координатними?

Які набори елементів симетрії мають центросиметричні види?

Яким елементам симетрії у символіці Германа-Могена відповідає положення символу в першій, другій і третій позиціях?

Яким чином у символіці Германа-Могена позначають перпендикулярність парної та непарної осі симетрії до площини симетрії?

Як позначають точкові групи з єдиним особливим напрямком L_n і паралельною площиною симетрії P в символіці Шенфліса?

Яким наборам елементів симетрії відповідають символи T , T_h , T_d ?

Тема 6

ПОНЯТТЯ ПРО ПРОСТІ ФОРМИ ТА ЇХНІ КОМБІНАЦІЇ. ВЛАСНІ ТА ЗАГАЛЬНІ ПРОСТІ ФОРМИ

У цій темі ми переважно будемо розглядати лише ідеально розвинені поліедри. *Ідеальна* форма кристалічного багатогранника (поліедра) з однаковим розвитком еквівалентних (симетрично-рівних) граней може утворитися лише при однаковому всебічному

живленні кристала (рис. 51). При нерівномірному підтоці живлячої речовини утворюються *спотворені* форми. Наприклад, куб може набути форми сірникової коробки (при збереженні прямокутних співвідношень між відповідними гранями згідно із законом Стено. Серед еквівалентних граней ті, що живляться краще, ростуть швидше, тому форма кристала спотворюється (рис. 7).

Ідеально розвинені поліедри можуть утворювати грані однакової або різної форми. Відповідно розрізняють *прості форми* – ізоедри та *комбінації простих форм* (рис. 51).

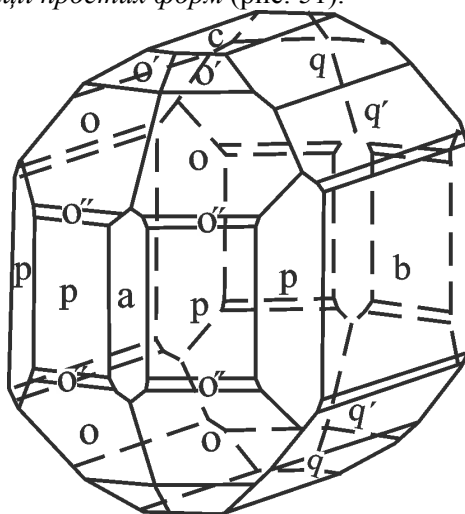


Рис. 51 . Ідеальна форма кристалів K_2SO_4 (точкова група $3L_23PC$). У цьому кристалі 11 простих форм утворюють *комбінацію простих форм*.

Однаково позначені еквівалентні грані, які належать до однієї простої форми, мають однаковий обрис і розміри

Простою кристалографічною формою називається сукупність еквівалентних граней, пов'язаних між собою елементами симетрії. Грані, які належать одній простій формі, рівні не лише геометрично (за контурами й розмірами), але також і за своїми фізичними й хімічними властивостями та за однаковою будовою відповідних плоских сіток структури. Сукупність двох або кількох простих форм у кристалі називається **комбінацією простих форм**. У комбінації простих форм кристала K_2SO_4 (рис. 51) наявні протилежно-паралельні пари граней a , b , c , які називаються пінакоїдами, та інші прості форми (всього 11 простих форм). Щоб визначити прості форми в якійсь комбінації, треба уявити, якої форми

набудуть грані простої форми, якщо їх продовжити до взаємного перетину.

Загальний вигляд кристалів визначає *обрис* кристалів (ізометричний, видовжений, пластинчастий, дощатий). Термін *габітус* (від лат. *habitus* – зовнішність) використовують, коли треба більш детально схарактеризувати зовнішню форму кристалів і відобразити ступінь розвитку тих чи інших переважаючих простих форм (наприклад, призматичний, ромбоедричний, кубічний, кубоктаедричний і т.д.).

Прості форми поділяють на власні й загальні. До *власних* простих форм належать багатогранники, грані котрих *паралельні* або *перпендикулярні* будь-яким елементам симетрії.

Полюси граней власних простих форм розташовуються також на *проекціях елементів симетрії* (позиції *B* і *A*) – на рис. 52.

Особливий випадок, коли власними простими формами є також ті, грані яких *рівнонахилено* перетинають побічні *еквівалентні* сусідні L_2 або P , або суміщені L_2 і P (відповідно в видах симетрії D_3 , C_{3v} та D_{3h}). Полюси таких рівнонахилених граней власних простих форм лежать на бісектрисах кутів між сусідніми еквівалентними L_2 або P . А в кубічній сингонії полюси власних простих форм завжди лежать на координатних або діагональних лініях, бо ці полюси симетричні якимсь парам осей L_3 та координатних осей, і грані є рівнонахиленими до них.

Загальною простою формою, або формою загального положення називають багатогранники, всі грані котрих довільно й косо нахилені до всіх елементів симетрії конкретного виду симетрії. У кубічній сингонії полюси граней загального положення лежать між координатними й діагональними лініями.

У характеристику кожної простої форми, окрім положення грані щодо елементів симетрії (тобто визначення, чи це власна форма, чи загальна), входить поняття *відкрита* або *закрита* форма. Якщо сукупність граней однієї простої форми повністю замикає простір, який лежить між гранями (наприклад, куб), то її вважають закритою. Якщо ж вона не замикає простір, то її називають відкритою. Відкриті форми (наприклад, призми) характерні лише для кристалів сингоній нижчої та середньої категорії і неможливі в кристалах кубічної сингонії.

На стереограмі будь-яка проста форма зображається сукупністю симетрично розміщених точок. Розміщення точок і їхня кількість визначаються видом симетрії. Під час опису форми

багатогранника всі його грані проєктують у вигляді точок (поліосів граней).

Число граней однієї простої форми залежить від положення вихідної грані щодо елементів симетрії. У ромбічного кристала зі симетрією L_22P ($mm2$) власна грань A (рис. 52) має симетрію m (вона перпендикулярна лише до однієї з площин симетрії). А власна грань B паралельна двом площинам симетрії, тобто вона має симетрію $mm2$. Число граней власної простої форми A удвічі, а форми B – в чотири рази менше від числа граней загальної простої форми B . Самі ж грані B – несиметричні, але їхня кількість відображає загальний набір елементів симетрії фігури (рис. 52).

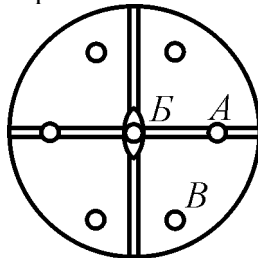


Рис. 52. Стереограма розрахунку числа граней власних простих форм (A і B) і форми загального положення B (за: Егоров-Тисменко, 2005)

На перетині граней поліедрів – простих кристалографічних форм і їхніх комбінацій утворюються прямі лінії, які називають ребрами. На перетині ребер розміщені точки, які називають вершинами. Будь-який опуклий багатогранник містить у собі певне число вершин (v), граней (z) і ребер (p), що підкоряється формулі Декарта-Ейлера: $v + z = p + 2$. Так, у кубі це співвідношення дорівнює $8 + 6 = 12 + 2$, а в октаедрі $6 + 8 = 12 + 2$ (рис. 55).

Всього є 47 *геометрично* (!) різних простих форм. 32 з них належать до сингоній нижчої та середньої категорій і 15 – до вищої. Прості форми середньої та нижчої категорій ніколи не трапляються у вищій, і навпаки.

Дамо спочатку огляд усіх 47 простих форм, які трапляються у вигляді кристалічних багатогранників. Назви простих форм дають за кількома принципами: числа граней у простій формі, форми контура граней, форми певних перетинів поліедрів.

Прості форми, назви котрих дані по числу граней, такі:

1. *Моноедр* – форма, що складається лише з однієї грані (рис. 53, a).

2. *Дієдр* – форма, що складається з двох граней, які перетинаються (рис. 53, б). Розрізняють дієдри осьові, в яких обидві грані пов'язані одна з одною подвійною віссю симетрії, та дієдри безосні (площинні), в яких обидві грані пов'язані площиною симетрії. Хоча є дієдри, в яких грані пов'язані як подвійною віссю, так і двома площинами симетрії.

3. *Пінакоїд* – форма, яка складається з двох паралельних граней (рис. 53, в). Назва походить від слова пінакс (грец.) – дошка.

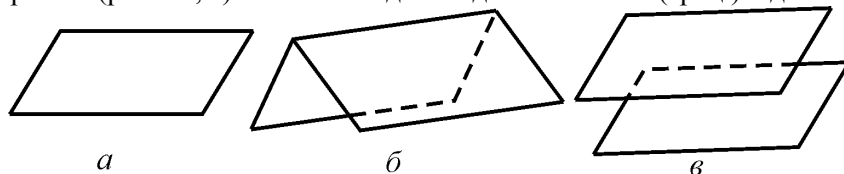


Рис. 53. Прості форми: *a* – моноєдр, *б* – дієдр, *в* – пінакоїд

Тетраедри – форми, які складаються з чотирьох граней, що утворюють замкнений чотиригранник. Розрізняють три види тетраєдрів.

4. *Тетраєдр ромбічний* у ромбічній сингонії (рис. 54, а). Ця форма трапляється лише як загальна форма в аксіальному виді симетрії. Грані – косокутні трикутники. Перетин, перпендикулярний до L_2 – ромб. Розрізняють праві й ліві енантіоморфні різновиди ромбічних тетраєдрів. У парах граней, наближених до якоїсь осі L_2 , у правого різновиду верхня грань лежить справа від нижньої, а у лівого різновиду – зліва від нижньої.

5. *Тетраєдр тетрагональний* у тетрагональній сингонії (рис. 54, б). Грані – рівнобедрені трикутники. У перетині, перпендикулярному до Li_4 , – правильний тетрагон (квадрат).

6. *Тетраєдр кубічний* у кубічній сингонії (рис. 54, в). Грані – рівносторонні трикутники. Часто називається просто тетраєдром, без додавання “кубічний”.

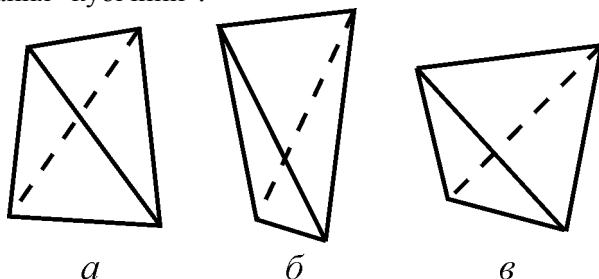


Рис. 54. Тетраєдри: ромбічний (*a*), тетрагональний (*б*), кубічний (*в*)

7. *Куб (гексаедр)*. Форма кубічної сингонії, яка складається з 6 граней. Для кожної грані є паралельна грань і кожна пара паралельних граней перпендикулярна до двох інших пар. Трапляється у всіх видах симетрії кубічної сингонії (рис. 55, а).

8. *Октаедр* – форма кубічної сингонії, яка складається з 8 граней – рівносторонніх трикутників (рис. 55, б).

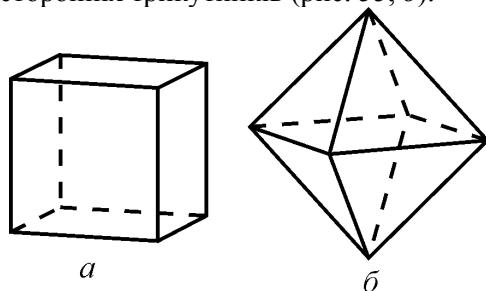


Рис. 55. Найпоширеніші загальновідомі прості форми кристалів кубічної сингонії: а – гексаедр (типовий для галіту і піриту), б – октаедр (типовий для алмазу і магнетиту)

Розглянемо тепер форми, які називають *призмами*, *пірамідами* і *дипірамідами* (подвійними пірамідами).

Кожна з призм, пірамід або дипірамід відрізняється від інших призм, пірамід і дипірамід характерними перетинами, перпендикулярними до головних осей симетрії (рис. 56). Можливі в цих формах такі перетини: 1) *ромб*, 2) *тригон*, 3) *дитригон*, 4) *тетрагон*, 5) *дитетрагон*, 6) *гексагон* і 7) *дигексагон*.

Таким чином, до восьми вже описаних простих форм додаються ще такі призматичні, пірамідальні та дипірамідальні форми (в числі 21):

9. *Ромбічна призма* (рис. 56, а).

10. *Ромбічна піраміда* (рис. 57, а). Трапляється лише як загальна форма в планальному виді симетрії ромбічної сингонії.

11. *Ромбічна дипіраміда* (рис. 58, а). Трапляється лише як загальна форма в планаксіальному виді симетрії ромбічної сингонії.

12. *Тригональна призма* (рис. 56, б).

13. *Тригональна піраміда* (рис. 57, б).

14. *Тригональна дипіраміда* (рис. 58, б).

15. *Дитригональна призма* (рис. 56, в).

16. *Дитригональна піраміда* (рис. 57, в). Трапляється лише як загальна форма планального виду симетрії тригональної сингонії.

17. *Дитригональна дипіраміда* (рис. 58, в). Трапляється лише як загальна форма інверсійно-планального виду симетрії гексагональної сингонії.

18. *Тетрагональна призма* (рис. 56, з).

19. *Тетрагональна піраміда* (рис. 57, з).

20. *Тетрагональна дипіраміда* (рис. 58, з).

21. *Дитетрагональна призма* (рис. 56, г).

22. *Дитетрагональна піраміда* (рис. 57, г). Трапляється тільки як загальна форма планального виду симетрії тетрагональної сингонії.

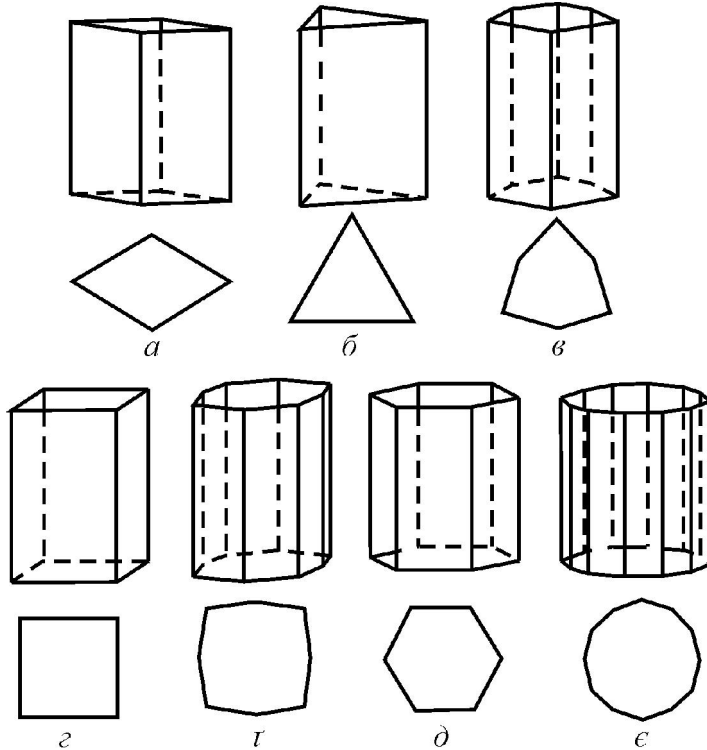


Рис. 56. Призми (та їхні перетини): *а* – ромбічна призма (ромб), *б* – тригональна призма (тригон), *в* – дитригональна призма (дитригон), *з* – тетрагональна призма (тетрагон), *г* – дитетрагональна призма (дитетрагон), *д* – гексагональна призма (гексагон), *е* – дигексагональна призма (дигексагон)

23. *Дитетрагональна дипіраміда* (рис. 58, г). Трапляється тільки як загальна форма планаксіального виду симетрії тетрагональної сингонії.

24. Гексагональна призма (рис. 56, д).

25. Гексагональна піраміда (рис. 57, д).

26. Гексагональна дипіраміда (рис. 58, д).

27. Дигексагональна призма (рис. 56, е).

28. Дигексагональна піраміда (рис. 57, е). Трапляється тільки як загальна форма планального виду симетрії гексагональної сингонії.

29. Дигексагональна дипіраміда (рис. 58, е). Трапляється тільки як загальна форма планаксіального виду симетрії гексагональної сингонії.

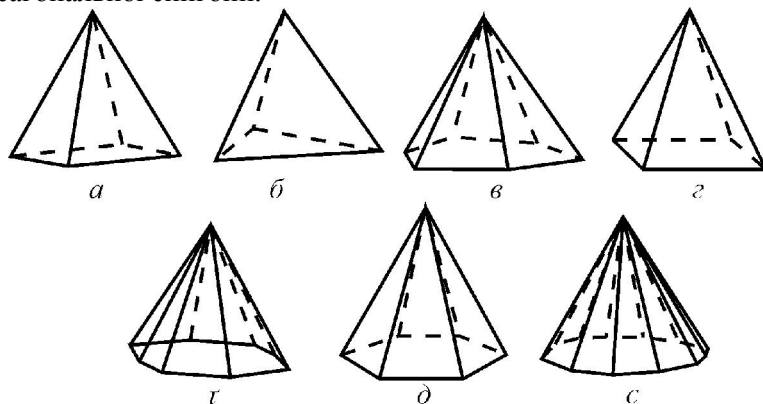


Рис. 57. Піраміди: *a* – ромбічна піраміда, *б* – тригональна піраміда, *в* – дитригональна піраміда, *г* – тетрагональна піраміда, *д* – гексагональна піраміда, *е* – дигексагональна піраміда

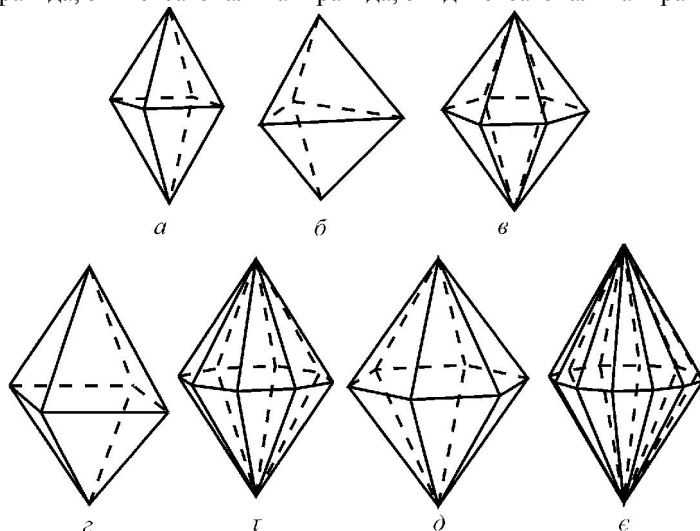


Рис. 58. Дипіраміди: *a* – ромбічна дипіраміда, *б* – тригональна дипіраміда, *в* – дитригональна дипіраміда, *г* – тетрагональна дипіраміда, *д* – дитетрагональна дипіраміда, *е* – гексагональна дипіраміда, *є* – дигексагональна дипіраміда

Звернемо увагу на те, що, на протипагу дипірамідам, призми та піраміди – форми незамкнені (відкриті) й наявні тільки у комбінаціях з іншими простими формами, найчастіше з описаними раніше моноедрами або пінакоїдами. Всі описані далі прості форми – замкнені (закриті).

Шість наступних простих форм одержали назву по формі їхніх граней. А саме: *ромбоedr*, два *скаленоедри* (з головними осями L_4 або L_3) і три *трапецоедри* (з головними осями L_3 , L_4 , L_6).

30. *Ромбоedr* (рис. 59, *a*). Грані мають форму ромбів. Ромбоedr схожий на куб, тільки витягнутий або стиснутий уздовж однієї з потрійних осей симетрії.

31. *Тетрагональний скаленоedr* (рис. 59, *б*). Грані у вигляді нерівносторонніх (неправильних) трикутників – скален. Це загальна форма в інверсійно-планальному виді симетрії тетрагональної сингонії. В інших видах симетрії такої форми немає.

32. *Тригональний скаленоedr* (рис. 59, *в*). Часто його називають дитригональним скаленоедром. Форма його граней – нерівносторонні трикутники. Трапляється тільки як загальна форма в планаксіальному виді симетрії тригональної сингонії.

33. *Тригональний трапецоedr* (рис. 59, *г*). Грані – у вигляді трапец – чотирикутників з двома рівними суміжними ребрами і двома нерівними. Це загальна форма в аксіальному виді симетрії тригональної сингонії. В інших видах симетрії такої форми не буває.

34. *Тетрагональний трапецоedr* (рис. 59, *д*). Грані такі ж чотирикутні. Це загальна форма в аксіальному виді симетрії тетрагональної сингонії. Як власна форма не трапляється.

Гексагональний трапецоedr (рис. 59, *є*). Форма граней та сама. Трапляється лише як загальна форма в аксіальному виді симетрії гексагональної сингонії.

Трапецоедри трапляються у правих і лівих енантіоморфних різновидах. На рис. 60, *г*, *д* проілюстровані праві енантіоморфні різновиди трапецоедрів.

Лишилося розглянути ще 12 простих форм. Всі вони утворюються лише в кристалах кубічної сингонії. Всього простих форм у кристалах кубічної сингонії 15, але три з них – *тетраedr*, *гексаedr* і *октаedr* – ми вже розглядали.

Вісім форм кубічної сингонії одержимо як похідні тетраедра й октаедра (від кожного по 4 форми).

35. На рис. 54, *в* зображений кубічний тетраедр. У трьох (похідних від тетраедра) простих формах кожна грань тетраедра потроюється. Одержані три прості форми мають грані різної форми (рис. 60). В одній простій формі ці грані є рівнобедреними трикутниками, в іншій – деформованими чотирикутниками і в третій – деформованими пентагонами (п'ятикутниками) з двома рівними ребрами. Щоб їх відрізнити одну від одної, їм дано різні назви:

36. *Тригон-тритетраедр* (рис. 60, *а*).

37. *Тетрагон-тритетраедр* (рис. 60, *б*).

38. *Пентагон-тритетраедр* (рис. 60, *в*). Останній є загальною формою у примітивному виді симетрії кубічної сингонії. Полюси граней пентагон-тритетраедра розташовуються на стереограмах між координатними і діагональними лініями. Є праві та ліві енантіоморфні різновиди. На рис. 56, *в* зображено лівий енантіоморфний різновид. У лівих різновидів пентагон-тритетраедра дві верхні грані розташовані зліва від найближчої осі L_3 , а одна – справа (рис. 56, *в*). У правих – навпаки.

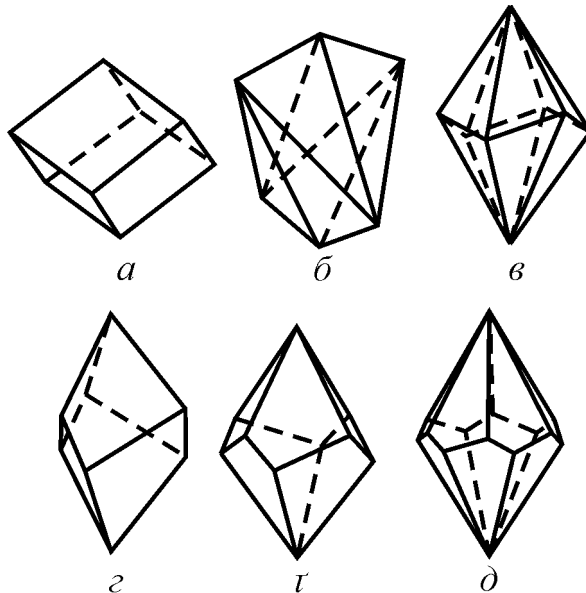


Рис. 59. Ромбоедр (*а*), тетрагональний скаленоедр (*б*), тригональний скаленоедр (*в*), тригональний трапецедр (*з*), тетрагональний трапецедр (*д*)

(г), гексагональний трапеоedr (д). Проілюстровані праві енантіоморфні різновиди трапеоedrів

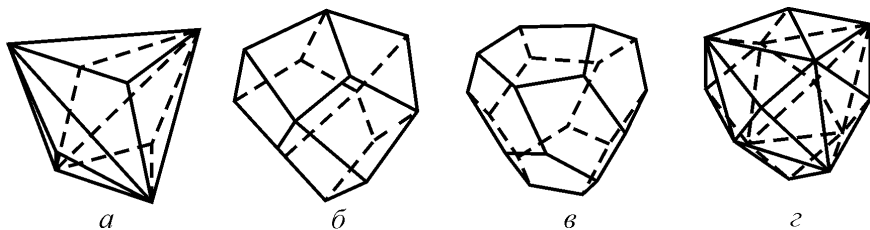


Рис. 60. Похідні кубічного тетраедра: а – тригон-тритетраедр, б – тетрагон-тритетраедр, в – лівий пентагон-тритетраедр, г – гексатетраедр.

Проілюстровані позитивні різновиди простих форм

У четвертій простій формі, похідній від тетраедра, кожна грань тетраедра замінена шістьма гранями. Цю форму називають:

39. *Гексатетраедр* (рис. 60, г). Це загальна форма у планальному виді симетрії: полюси граней гексатетраедра розташовані між діагональними й координатними лініями.

Подібним же чином одержуємо 4 похідні форми октаедра (55, б):

40. *Тригон-триоктаедр* (рис. 61, а).

41. *Тетрагон-триоктаедр* (рис. 61, б). Раніше його часто називали лейцитоедром.

42. *Пентагон-триоктаедр* (рис. 61, в). Він є загальною формою в аксіальному виді симетрії: полюси граней пентагон-триоктаедра на стереограмах розташовуються між координатними і діагональними лініями. Розрізняють праві й ліві різновиди пентагон-тритетраедрів. У лівих різновидах (рис. 61, в) дві верхні грані розташовані зліва від найближчої L_3 і одна – справа, у правих різновидах – навпаки.

43. *Гексоктаедр* (рис. 61, г). Часто його називають сорокавосьмигранником. Це загальна форма в планаксіальному виді симетрії. Полюси граней гексоктаедра на стереограмах розташовані між координатними і діагональними лініями.

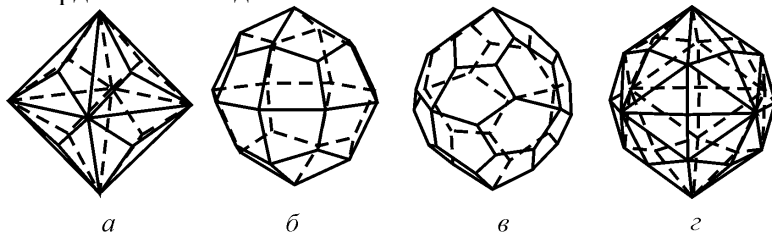


Рис. 61. Похідні октаедра: *a* – тригон-триоктаедр, *б* – тетрагон-триоктаедр, *в* – пентагон-триоктаедр (лівий), *г* – гексоктаедр

Крім того, є форма похідна від гексаедра (рис. 55, *a*). Цю форму, в котрій кожна грань гексаедра замінюється чотирма гранями, називають:

44. *Тетрагексаедр* (рис. 62, *a*). Полюси граней тетрагексаедра розташовані на координатних лініях між виходами діагональних і координатних осей.

Ще дві прості форми кристалів кубічної сингонії, які утворені 12 гранями, мають назви *додокаедри*. У одного додекаедра гранями є ромби, в іншого – пентагони. На відміну одного від іншого, вони одержали назви:

45. *Ромбододокаедр* (рис. 62, *б*). Це єдина форма, поряд з кубом, можлива в усіх видах симетрії кубічної сингонії. Полюси граней ромбододокаедра розташовані на виходах діагональних осей. Раніше його часто називали гранатоедром.

46. *Пентагон-додокаедр* (рис. 62, *в*). Полюси граней пентагон-додокаедра розташовані між виходами координатних і діагональних осей на координатних лініях. Пентагон-додокаедр зображено в позитивній орієнтації.

Нарешті, в останній формі ми маємо подвоєння кожної грані пентагон-додокаедра. Ця форма має назву:

47. *Дидодокаедр* (рис. 62, *г*). Він є формою загального положення центрального виду симетрії. Полюси граней дидодокаедра на стереограмах розташовані між координатними і діагональними лініями. Дидодокаедр зображено в позитивній орієнтації.

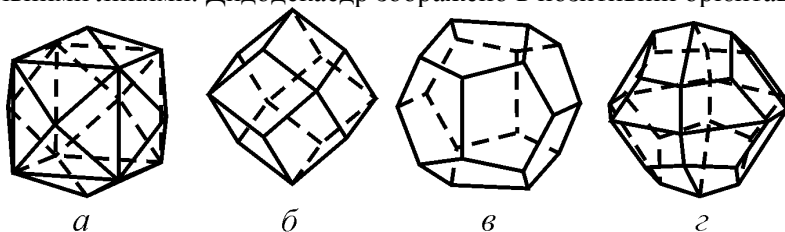


Рис. 62. Специфічні форми кристалів кубічної сингонії: *a* – тетрагексаедр, *б* – ромбододокаедр, *в* – пентагон-додокаедр, *г* – дидодокаедр

Під час опису форм кристалів розрізняють прості форми та їхні *комбінації*. Оскільки відкриті форми не можуть існувати самостійно, вони завжди утворюють різноманітні комбінації. Закриті форми також дуже часто трапляються у комбінаціях простих форм. Якщо кристал утворений гранями тільки однієї простої фор-

ми, то говорять про просту форму кристала (куб, октаедр, ромбоедр, скаленоедр), якщо ж в огрануванні кристала беруть участь дві й більше простих кристалографічних форм, то говорять про комбінаційну форму кристала (кубоктаедр, скаленоромбоедр). Для того, щоби навчитись розпізнавати прості форми у комбінаціях, необхідно, звичайно, насамперед добре засвоїти їх окремо.

У більшості випадків просту форму, котра бере участь у комбінації, легко визначити, відтворюючи її подумки, шляхом продовження граней до взаємного перетину, як це зображено на рис. 63, де представлена комбінація тетрагональної дипіраміди, тетрагональної призми і пінакоїда (*a*) та комбінація ромбододекаедра й гексаедра (*b*).

Серед простих форм їхні комбінації часто утворюють одна з призм з пінакоїдом і будь-яка піраміда з моноедром. Нерідко сумісно трапляються комбінації призми з дипірамідою, куба й октаедра, ромбододекаедра й куба. Щоб розрізнити на кристалах прості форми, існує нескладне правило: скільки на рівномірно розвинутому кристалі різних граней, стільки буде і простих форм.

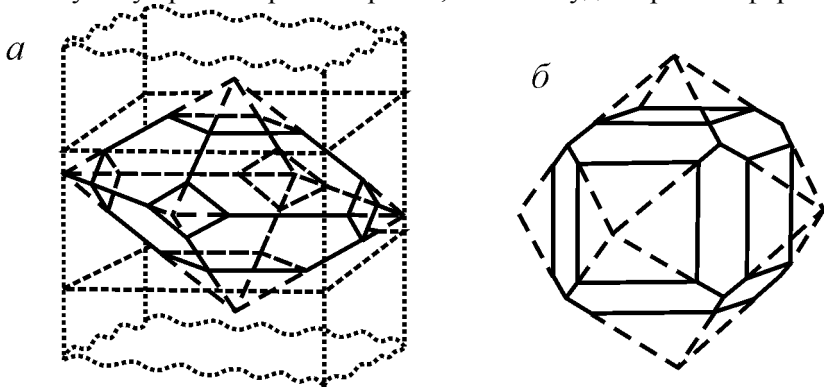


Рис. 63. Утворення комбінацій простих форм і визначення складових форм у комбінаціях шляхом продовження однотипних граней до їхнього взаємного перетину: *a* – комбінація тетрагональної призми, тетрагональної дипіраміди та пінакоїда, *b* – комбінація ромбододекаедра та куба

ЕНАНТІОМОРФНІ РІЗНОВИДИ ПРОСТИХ ФОРМ

На рис. 64 представлені дві сусідні конгруентно-рівні тригональні дипіраміди. Ми можемо сумістити їх одну з одною (помістити у паралельне положення), якщо повернути одну з них на 60° (або 180°) навколо L_3 . На противагу цьому, два рівних

тригональних трапедоєдри, зображених на рис. 65, неможливо сумістити один з одним жодними поворотами. Лише відбиттям у дзеркальній площині один із них суміщується з іншим, подібно до того, як дві руки, що є дзеркальним відображенням одна одної, суміщуються під час дзеркального відбиття і не суміщуються поворотами. Такі форми називають *енантіоморфними* (протилежно-рівними) – правими й лівими.

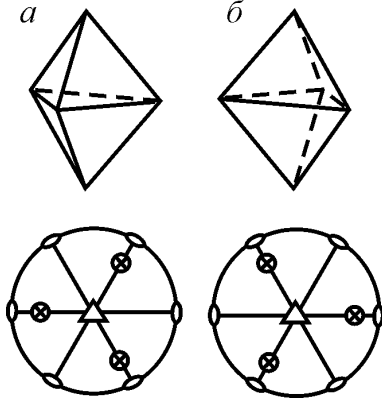


Рис. 64. Дві сусідні тригональні дипіраміди – конгруентно рівні: суміщуються одна з одною під час повороту навколо L_3 на 60° (або 180°)

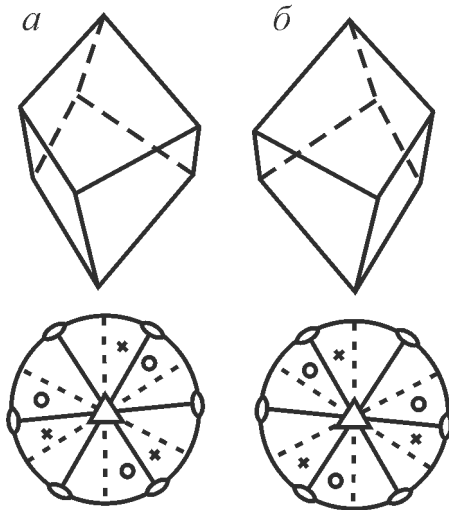


Рис. 65. Кристали правого (а) і лівого (б) тригонального трапедоєдра та їхні стереограми. В парі граней, наближених до якоїсь осі L_2 , нижня грань розташована у правого трапедоєдра справа від верхньої

грані, а у лівого – зліва. Лівий і правий трапецоєдр є енантіоморфними різновидами

Енантіоморфними є дві дзеркально-рівні форми, що не суміщуються одна з одною за допомогою обертання.

Серед кристалів енантіоморфні форми можуть існувати та дійсно спостерігаються лише у тих видах симетрії, в яких відсутні інверсійні осі симетрії та їхні окремі випадки – центр інверсії ($C = Li_1$) та площина симетрії ($P = Li_2$). Такими видами симетрії є *примітивні й аксіальні* види симетрії всіх сингоній.

Енантіоморфними можуть бути як **прості** форми (наприклад, праві й ліві ромбічні тетраедри, пентагон-тритетраедри, пентагон-триоктаедри та різні трапецоєдри), так і **комбінаційні**. На рис. 66 зображені комбінаційні енантіоморфні форми правих і лівих кристалів кварцу (SiO_2). Це мінерал аксіального (тригонально-трапецоєдричного) виду симетрії тригональної сингонії.

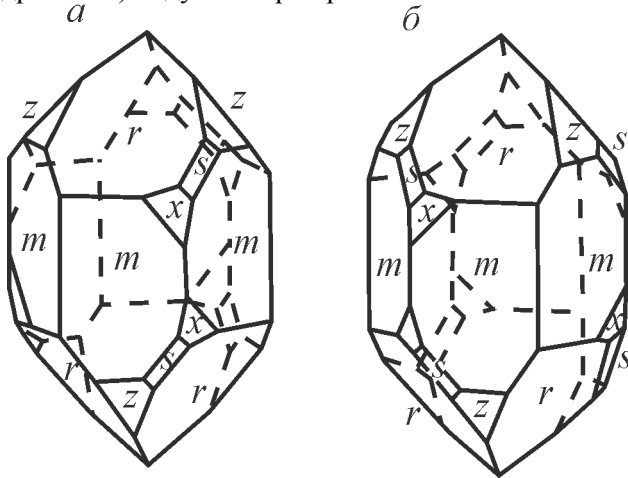


Рис. 66. Енантіоморфні різновиди кристалів кварцу: *a* – правий, *б* – лівий

Кристали вказаних видів симетрії мають особливі фізичні властивості. На протигагу всім іншим ці кристали обертають площину поляризації світла. При цьому один із двох енантіоморфних різновидів обертає площину поляризації направо, інший – наліво. Крім обертання площини поляризації, кристали примітивних і аксіальних видів симетрії в полярних напрямках мають ще п'єзоелектричні властивості. Але ці властивості належать багатьом кристалам, що не мають центру інверсії (всім 20

ацентричним видам), а не лише кристалам примітивних і аксіальних видів симетрії.

Питання для самоконтролю

Що в кристалографії називається простою формою? Скільки всього є простих форм?

Що таке обрис і габітус кристалів?

Як відрізнити ромбічний тетраедр від тетрагонального і кубічного?

Які головні перерізи мають призми, піраміди та дипіраміди?

Розмножити точки А і В за допомогою елементів симетрії, зображених на стереограмі (рис. 52). Які прості форми ми отримаємо?

Що таке власні й загальні прості форми?

Які прості форми дають праві й ліві енантіоморфні різновиди та як вони розрізняються?

Як відрізнити тетрагексаедр від гексатетраедра і дидодекаедр від тетрагон-триоктаедра?

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- Анилес О.М.* Начала кристаллографії. Л.: Изд-во ЛГУ, 1952. – 276 с.
- Бакуменко І.Т.* Матеріали до курсу “Кристаллографія”. Вип. 1. – Львів: Вид. центр ЛНУ ім. Івана Франка, 2000. – 78 с.
- Болдырев А.К.* Кристаллографія. – Л.: КУБУЧ, 1930. – 331 с.
- Вейль Г.* Симметрия. – М.: Наука, 1968. – 192 с.
- Ворошилов Ю.В., Павлишин В.И.* Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов: учебник – К.: КНТ, 2011. – 568 с.
- Гласкер Дж., Трублад К.* Анализ кристаллической структуры. – М.: Мир, 1974. – 236 с.
- Грінченко В.Ф.* Кристаллографія. Ч. 1: навч. посіб. – К.: РВЦ “Київ. ун-т”. 1997. – 105 с.
- Егоров-Тисменко Ю.К.* Кристаллографія и кристаллохимия: учебник под ред. акад. В.С. Урусова. – М.: КДУ, 2005. – 592 с.
- Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г.* Кристаллографія под ред. В.С. Урусова. – М.: Изд-во МГУ, 1992. – 288 с.
- Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К.* Геометрическая кристаллографія. – Изд. 2-е. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – 168 с.
- Зоркий П.М.* Симметрия молекул и кристаллических структур. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. – 232 с.
- Лискович О.Б.* Кристаллографія. – Львів: Вид-во при ЛДУ видав. об’єднання Вища школа, 1978. – 95 с.
- Пинес Б.Я.* Лекции по структурному анализу. – Х.: Изд-во Харьк. гос. ун-та, 1957. – 455 с.
- Попов Г.М., Шафрановський І.І.* Кристаллографія: підручник. – Львів: Вид-во Львів. ун-ту, 1959. – 338 с.
- Современная кристаллографія: в 4-х т. Т. 1. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии / Б.К. Вайнштейн. – М.: Наука, 1979. – 384 с.
- Федоров Е.С.* Симметрия и структура кристаллов. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1949. – 646 с.
- Флинт Е.Е.* Практическое руководство по геометрической кристаллографии. – Изд. 3-е. – М.: Госгеолтехиздат, 1956. – 208 с.

- Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А.* Основы кристаллографии: учебник для вузов. – М.: Изд-во физ.-мат. литературы, 2004. – 500 с.
- Шаскольская М.П.* Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1984. – 376 с.
- Шафрановский И.И.* Лекции по кристалломорфологии. – М.: Высшая школа, 1968. – 172 с.
- Шафрановский И.И., Алядин В.Ф.* Краткий курс кристаллографии. – М.: Высшая школа, 1984. – 120 с.
- Шубников А.В., Флинт Е.Е., Бокий Г.Б.* Основы кристаллографии. – М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1940.– 503 с.
- Юшкин Н.П., Асхабов А.М., Ракин В.Н.* и др. Наноминералогия. Ультра- и микродисперсные состояния минерального вещества. – СПб.: Наука, 2005. – 581 с.
- Юшкин Н.П., Павлишин В.И., Асхабов А.М.* Ультрадисперсное состояние минерального вещества и проблемы наноминералогии // Минерал. журн. – 2003. – № 4. – С. 7-31.
- Borchardt-Ott W.* Kristallographie. – Berlin: Springer, 2009. – 372 S.
- Kleber W.* Einführung in die Kristallographie. Lehrbuch nach den Hochschulstudienplänen. – Berlin: VEB Verlag Technik, 1967. – 407 S.

РЕКОМЕНДОВАНИ ЕЛЕКТРОННІ РЕСУРСИ

- <http://www.amercrystalassn.org/>
<http://www.crystallography.net/>
<http://www.iucr.org/education/>
<http://www.mineraldata.org/mineral/cristallografia/>
<http://www.mindat.org/>
<http://webmineral.com/>

ЗМІСТ

Від авторів	1
Тема 1	
Предмет, завдання та зв'язок кристалографії з іншими науками	2
Поняття про кристалічний стан. Будова просторової та кристалічної ґраток. Параметри елементарної комірки	5
Найважливіші властивості кристалів	10
Тема 2	
Закон сталості кутів	16
Гоніометрія. Гоніометри та їх типи	18
Сферичні, стереографічні та гномостереографічні проекції	21
Сітки Болдирєва й Вульфа	27
Тема 3	
Симетрія кристалів. Елементи симетрії першого роду. Елементи симетрії другого роду	36
Види симетрії та просторові групи кристалів	44
Сингонії. Симетрично-рівні та одиничні напрямки	46
Теореми про взаємодію елементів симетрії, співвідношення одиничних напрямків з елементами симетрії	50
Визначення елементів симетрії моделей кристалів і побудова їхніх стереографічних проекцій	57
Тема 4	
Вивід видів симетрії кристалів з одиничними та без одиничних напрямків	63
Вивід видів симетрії кристалів з одиничними особливими напрямками	63
Вивід видів симетрії кристалів без одиничних напрямків	67
Тема 5	
Класифікація видів симетрії	70
Міжнародні позначення видів симетрії (символіка Германа-Могена)	74
Номенклатура видів симетрії за Шенфлісом	78
Тема 6	
Поняття про прості форми та їхні комбінації. Власні та загальні прості форми	80
Енантіоморфні різновиди простих форм	92
Список рекомендованої літератури	96
Рекомендовані електронні ресурси	97