Saint-Petersburg State University

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

тема лекции:
Символы граней и ребер кристаллов

Гуржий В.В.

2021

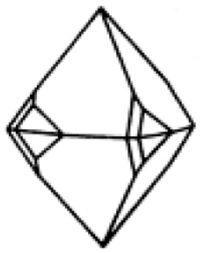
Проекции кристаллов

Использование проекций дает представление об огранке кристалла, за исключением относительного развития разных типов граней. Однако, большой объем морфологических данных сильно затрудняет работу с проекциями.

Проекции кристаллов

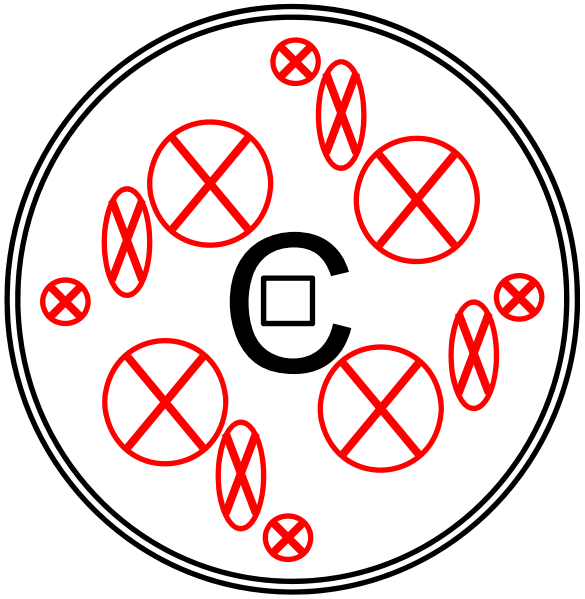
Использование проекций дает представление об огранке кристалла, за исключением относительного развития разных типов граней. Однако, большой объем морфологических данных сильно затрудняет работу с проекциями.

$CaWO_4$



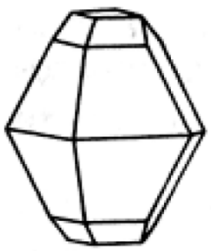
шеелит

L_4mC



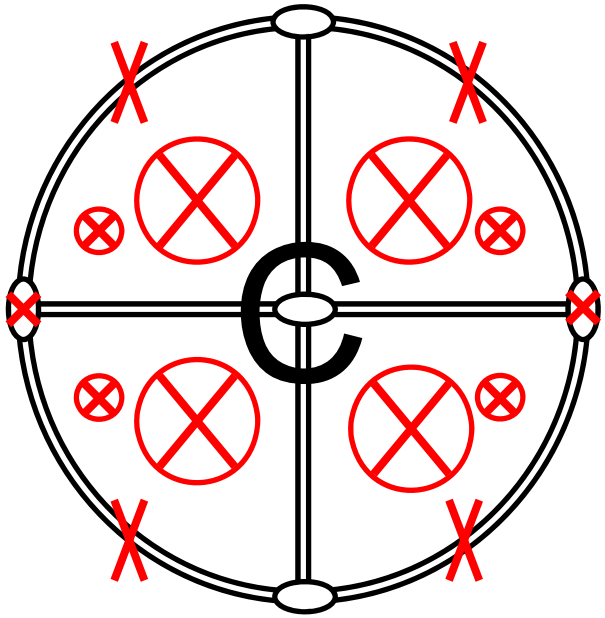
Проекции кристаллов

Использование проекций дает представление об огранке кристалла, за исключением относительного развития разных типов граней. Однако, большой объем морфологических данных сильно затрудняет работу с проекциями.



сера самородная

$3L_2 3mC$

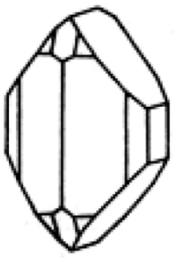


St.Petersburg State University

Проекции кристаллов

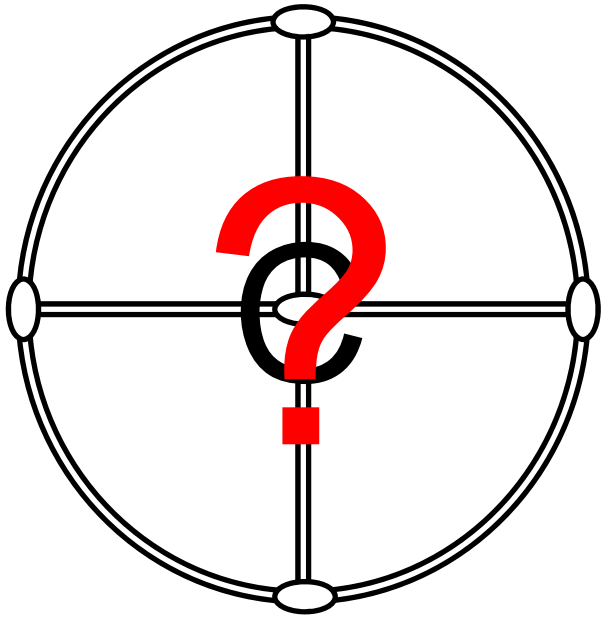
Использование проекций дает представление об огранке кристалла, за исключением относительного развития разных типов граней. Однако, большой объем морфологических данных сильно затрудняет работу с проекциями.

Для более компактного способа представления огранки кристаллов используют специальные – *кристаллографические символы*.



оливин

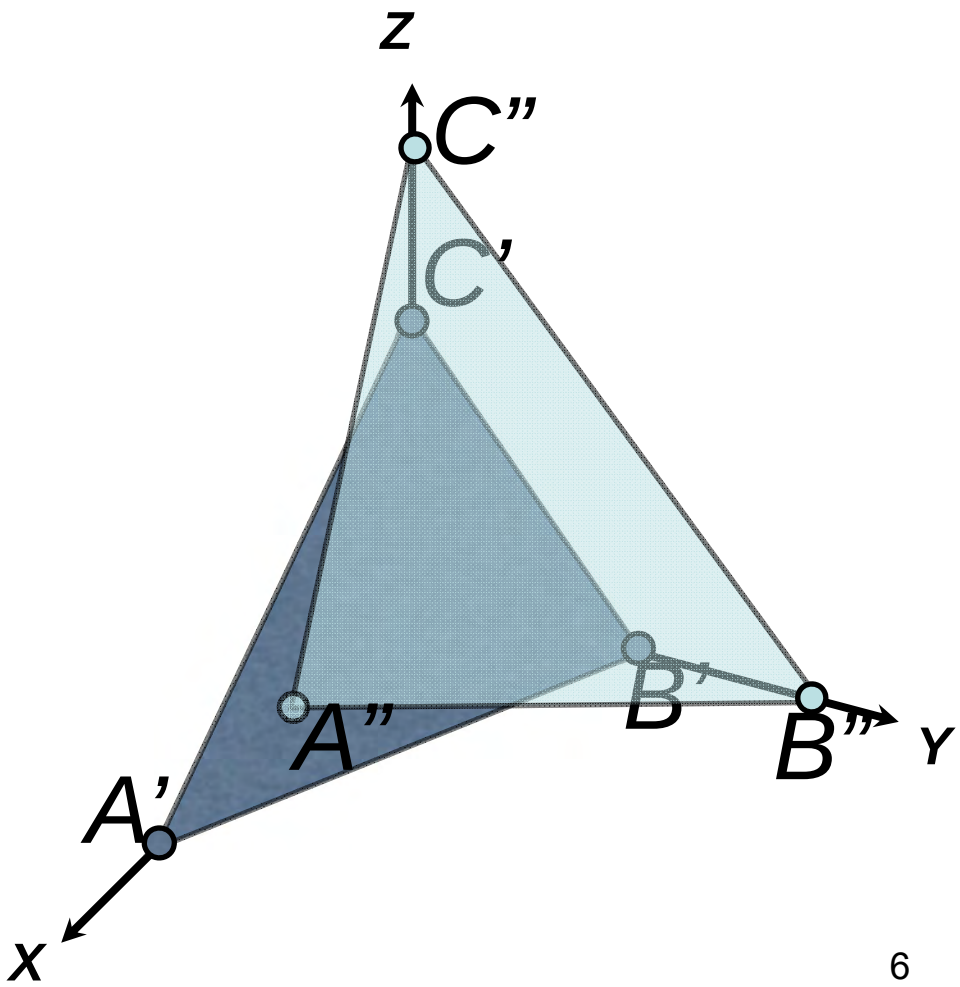
$3L_2 3mC$



Закон Гаюи

Закон рациональности отношений параметров граней

Рене-Жюст Гаюи
(1743-1822)



St.Petersburg
State University

Закон Гаюи

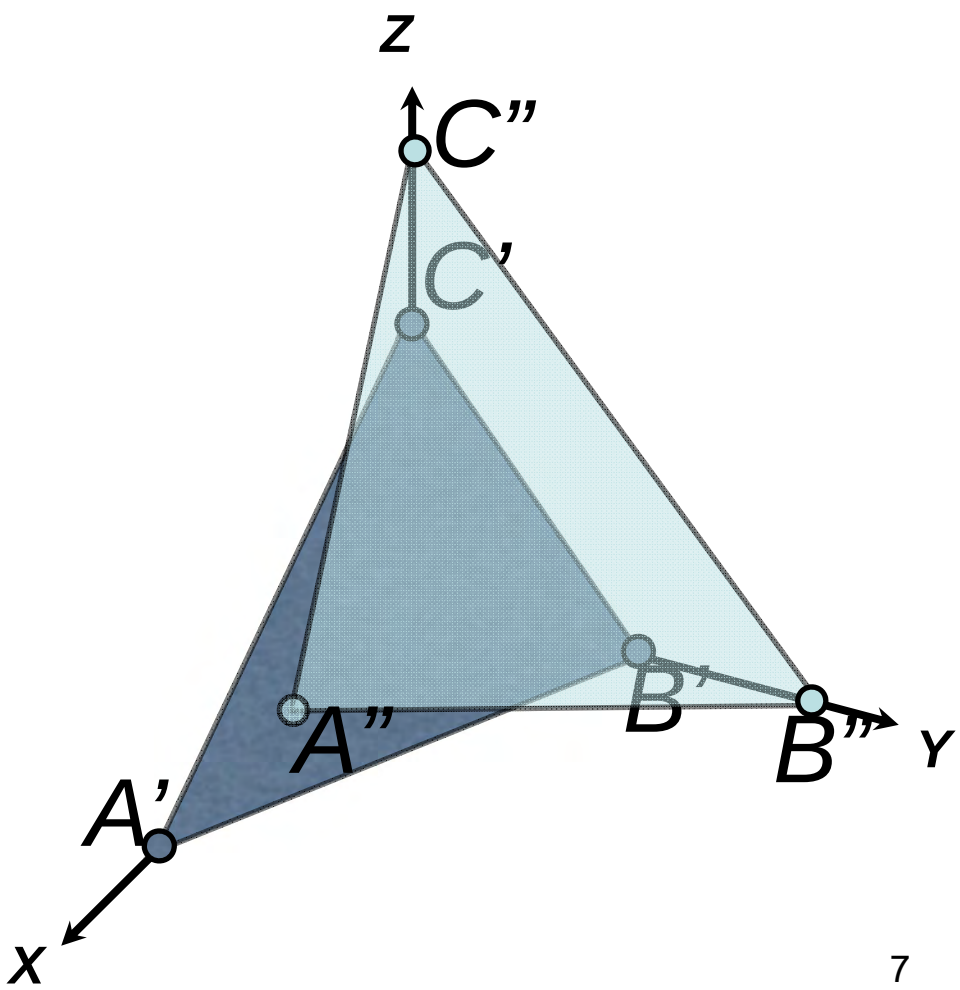
Закон рациональности отношений параметров граней

$OA'/OA'' = n_1/m_1$

$OB'/OB'' = n_2/m_2$

$OC'/OC'' = n_3/m_3$

$n_1, n_2, n_3, m_1, m_2, m_3$ - целые числа

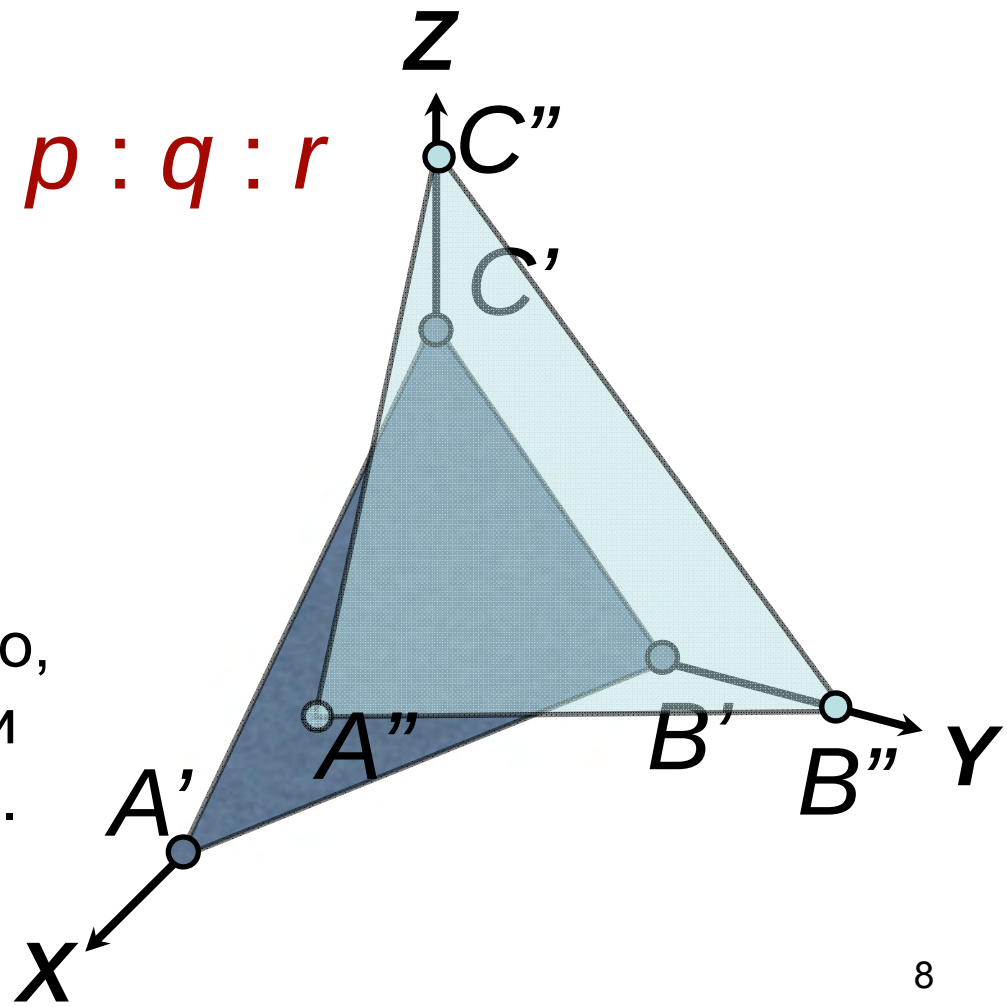


Закон Гаюи

Закон рациональности отношений параметров граней

$$\frac{OA'}{OA''} : \frac{OB'}{OB''} : \frac{OC'}{OC''} = p : q : r$$

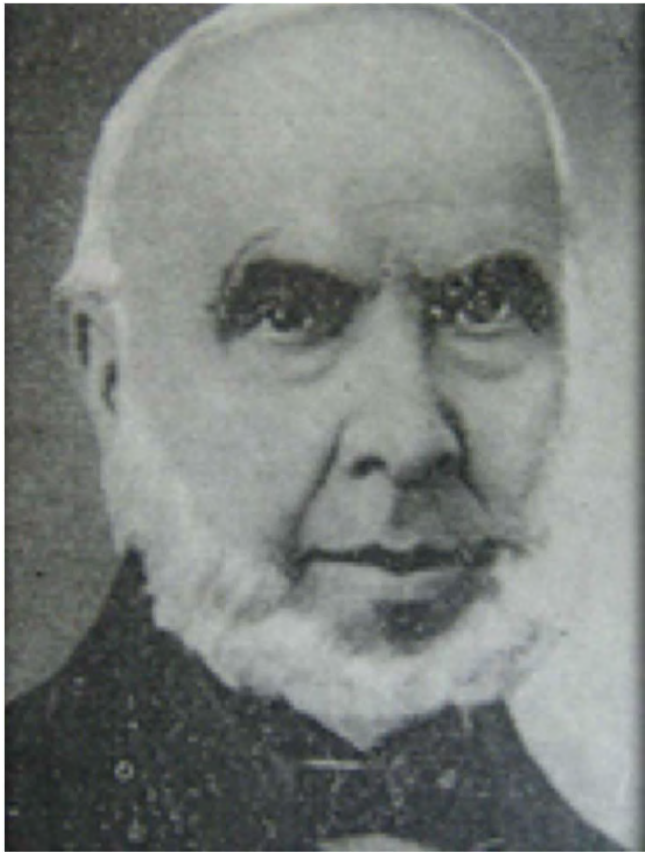
Двойные отношения параметров, отсекаемых двумя любыми гранями кристалла на трех пересекающихся ребрах его, равны отношениям целых и сравнительно малых чисел.



St.Petersburg State University

Символы граней

Christian Samuel
Weiss
(1780-1856)



William Hallowes
Miller
(1801-1880)

Символы граней

Индексы Вейсса

a, *b*, *c* - *единичные* отрезки
по координатным осям

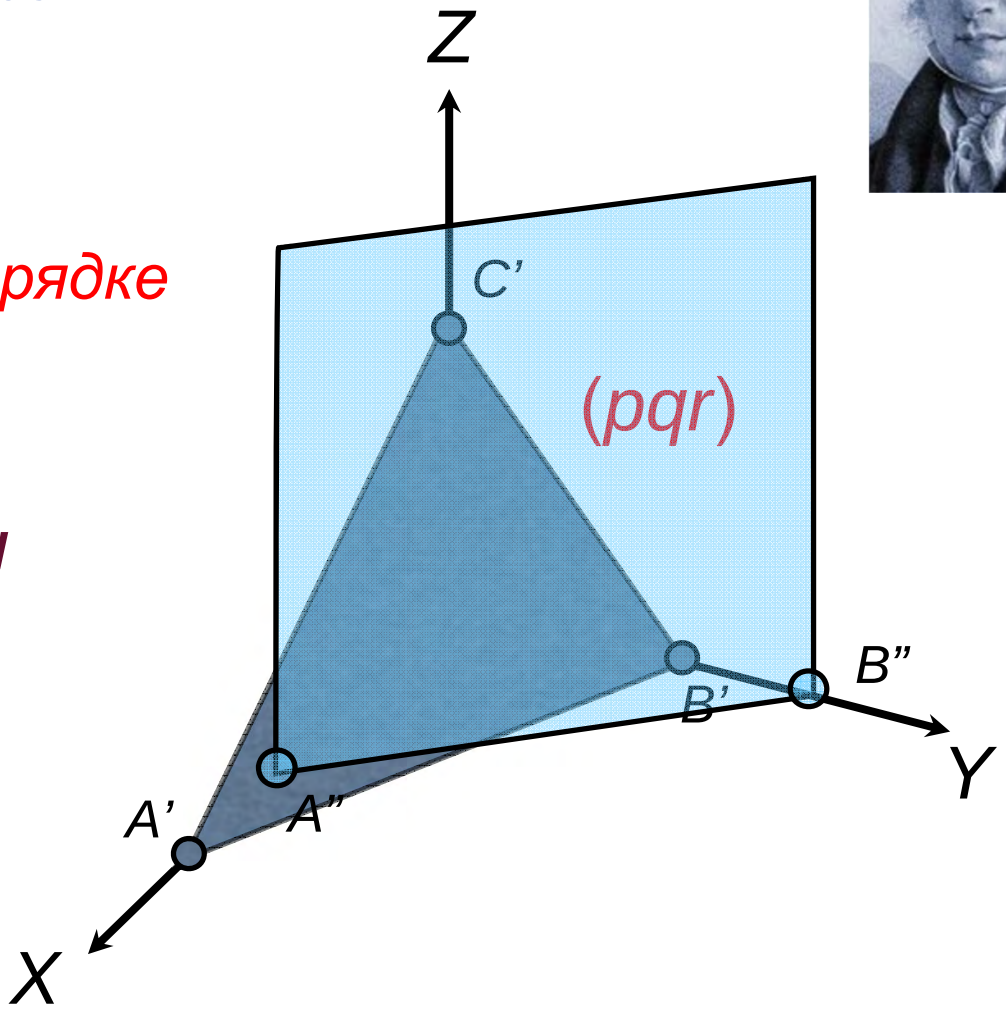
$$\frac{OA'}{a} = p$$

$$\frac{OB'}{b} = q$$

$$\frac{OC'}{c} = r$$

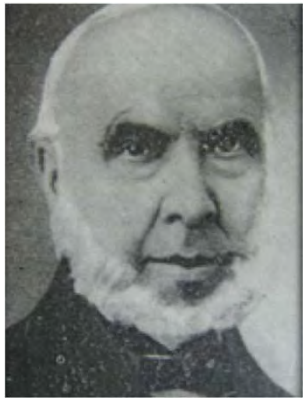
OA”, OB” - в порядке
OC” - ??

$$\frac{OC''}{c} = \infty !!$$



Символы граней

Индексы Миллера

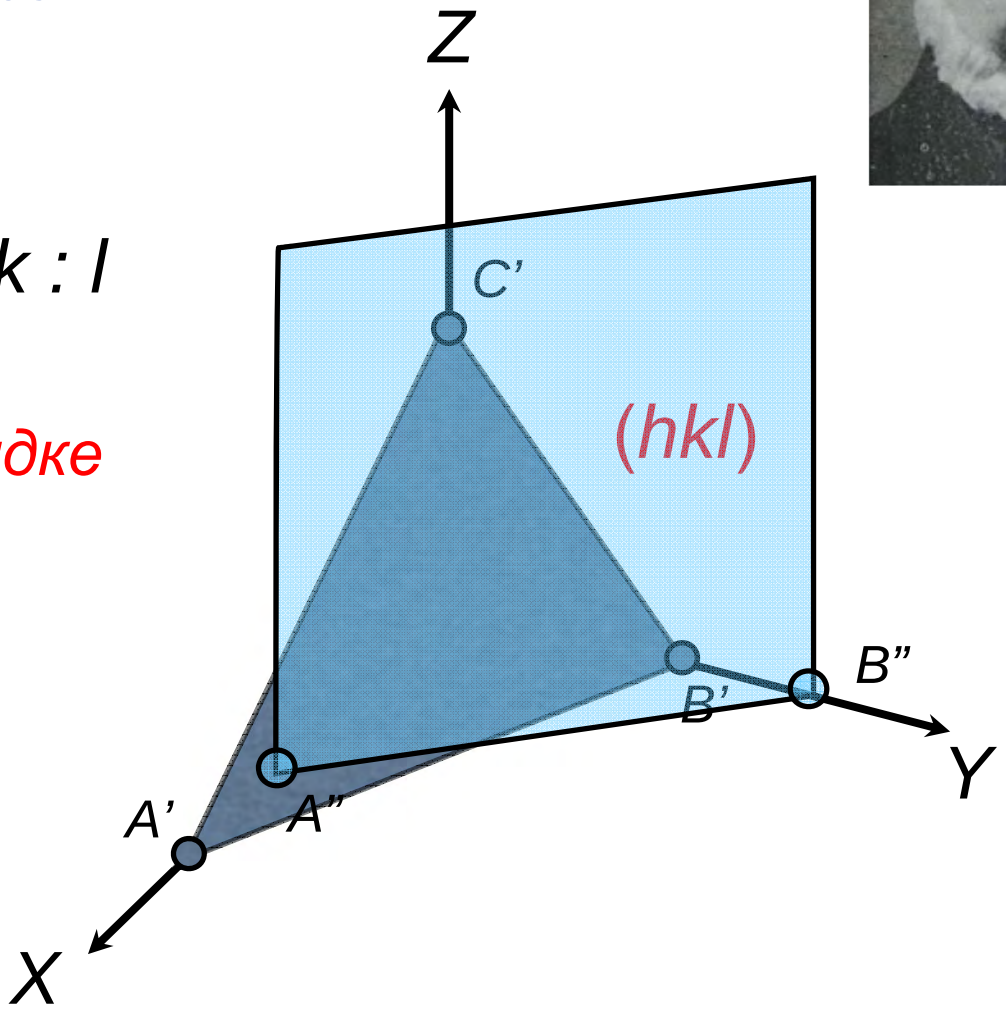


a, *b*, *c* - *единичные* отрезки по координатным осям

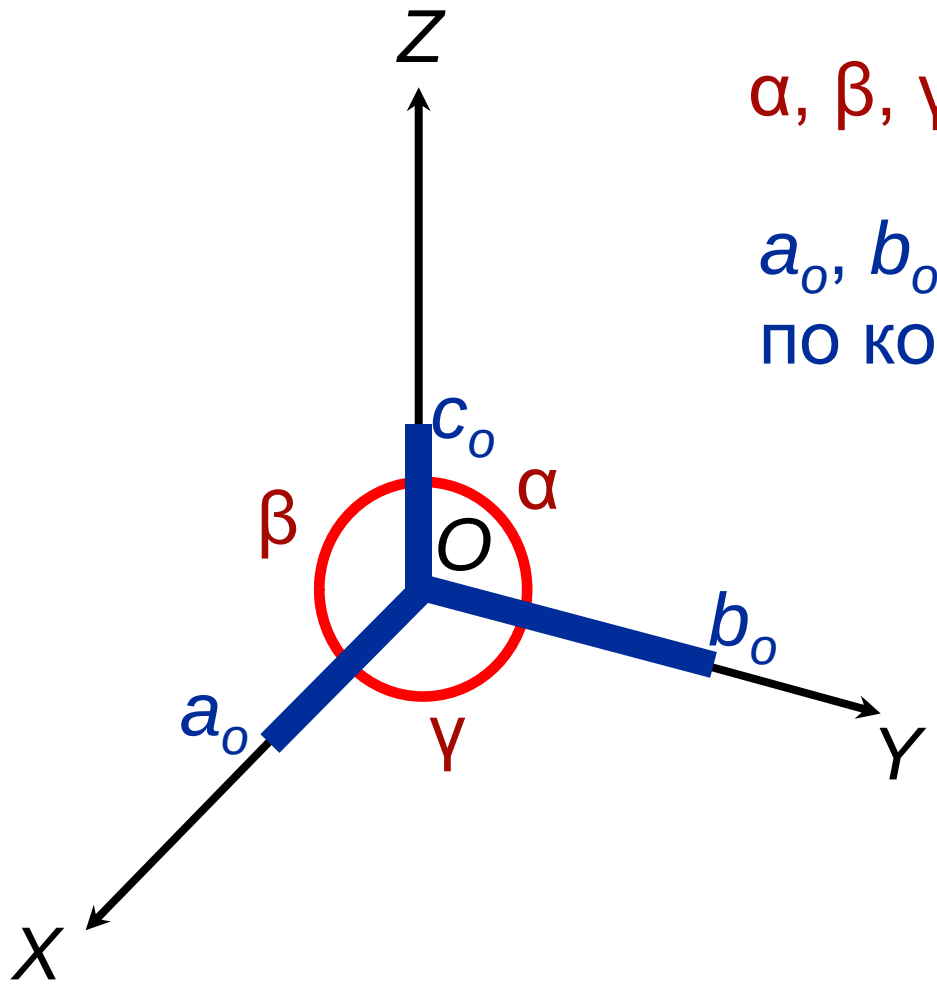
$$\frac{a}{OA'} : \frac{b}{OB'} : \frac{c}{OC'} = h : k : l$$

OA”, OB” - в порядке
OC” - ??

$$\frac{c}{OC''} = 0!!$$



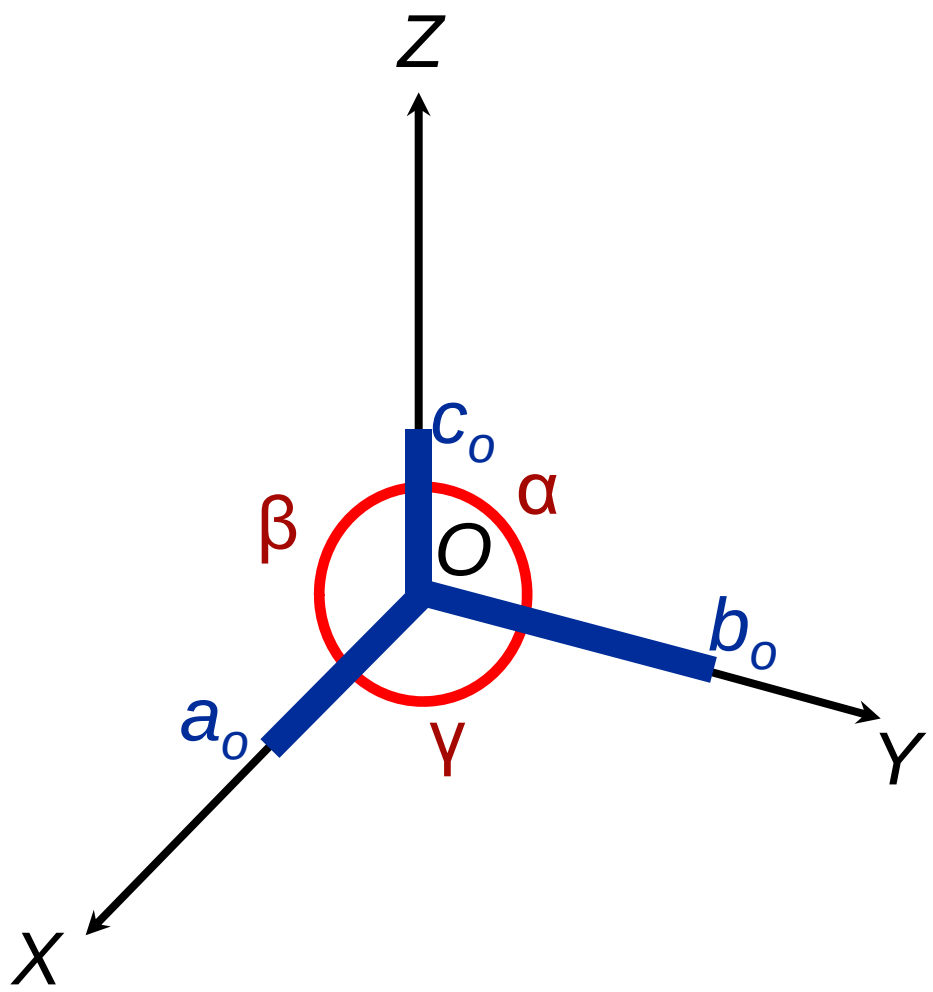
Кристаллографические системы координат



α, β, γ - углы между осями

a_o, b_o, c_o - *единичные* отрезки по координатным осям

Кристаллографические системы координат



Кристаллический многогранник ориентируют таким образом, чтобы оси координат совпадали (шли параллельно) с имеющимися ребрами или гранями.

Это в значительной степени облегчает привязку элементов кристалла (грани, направления) и проведение геометрического сравнения внешнего облика для различных минеральных видов

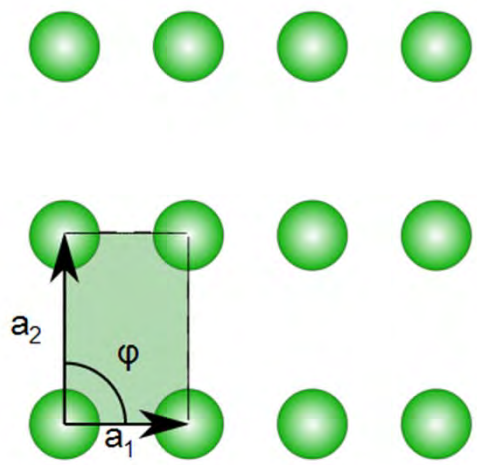
Прямоугольная система координат

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$

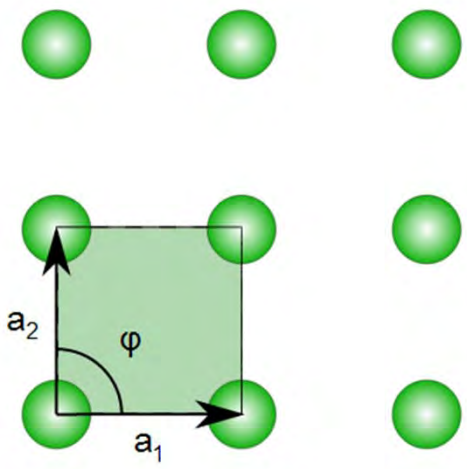
Кубическая сингония ($a = b = c$)

Тетерагональная сингония ($a = b \neq c$)

Ромбическая сингония ($a \neq b \neq c$)



$|a_1| \neq |a_2|$, $\varphi = 90°$



$|a_1| = |a_2|$, $\varphi = 90°$

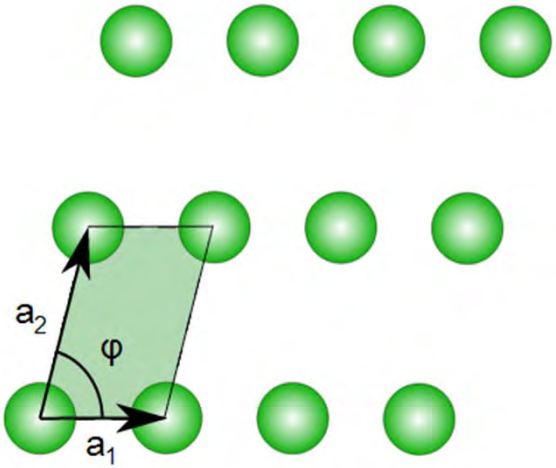
Косоугольная система координат

$\alpha = \gamma = 90°$ $\beta \neq 90°$

Моноклинная сингония ($a \neq b \neq c$)

$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$

Триклинная сингония ($a \neq b \neq c$)

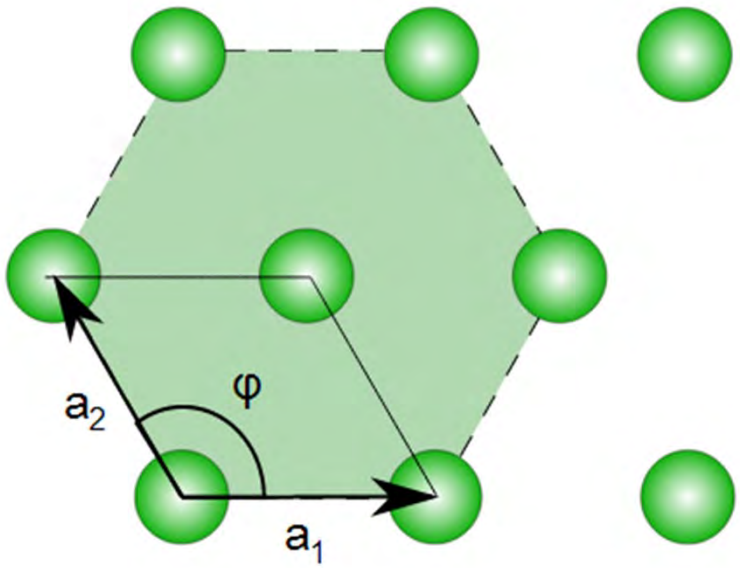


$|a_1| \neq |a_2|$, $\varphi \neq 90°$

Гексагональная система координат

$\alpha = \beta = 90°$ $\gamma = 120°$

Гексагональная и тригональная сингонии ($a = b \neq c$)



$|a_1| = |a_2|$, $\varphi = 120°$

Символы граней

Таким образом, для того чтобы определить символ грани (*hkl*) необходимо:

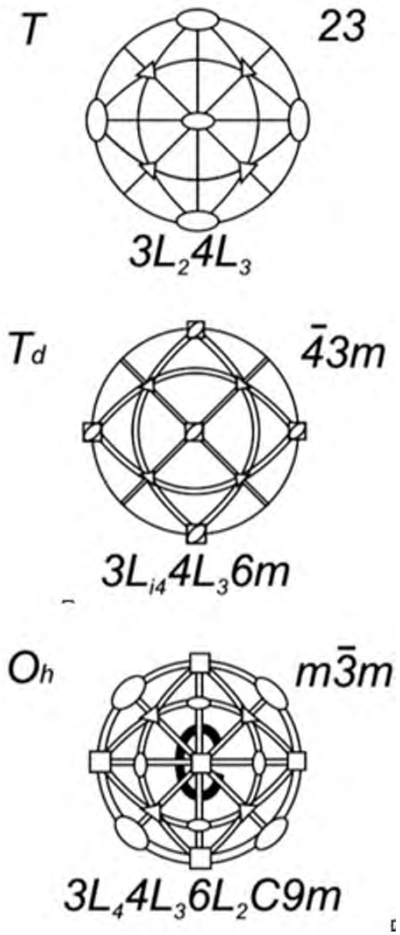
1. Определить единичную грань (111) пересекающую все кристаллографические оси.

2. Сравнить единичные отрезки (111), с отрезками отсеченными другой гранью (*abc*) по кристаллографическим осям *X*, *Y* и *Z*.

$$\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{a}} \quad \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{b}} \quad \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{c}} = (hkl)$$

Символы граней

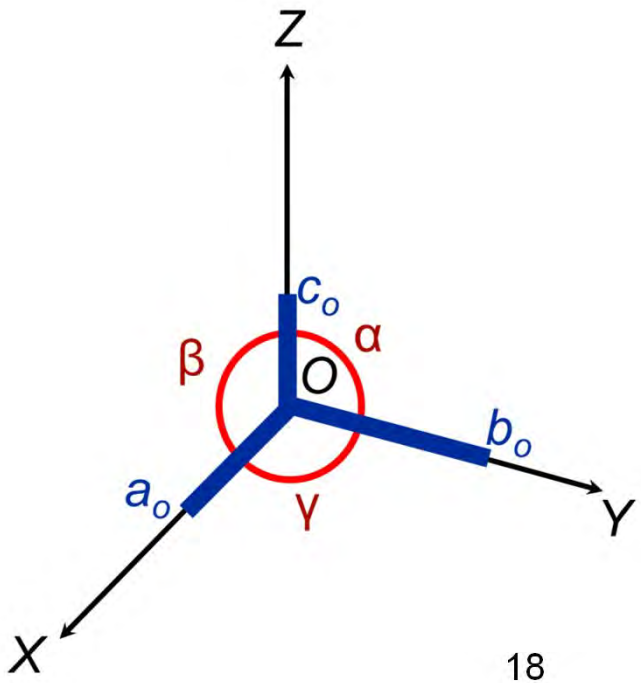
Кубическая сингония



Координатные оси выбираются по трем взаимно перпендикулярным
- осям 4-го порядка
- инверсионным осям 4-го порядка
- осям 2-го порядка

$$a = b = c$$

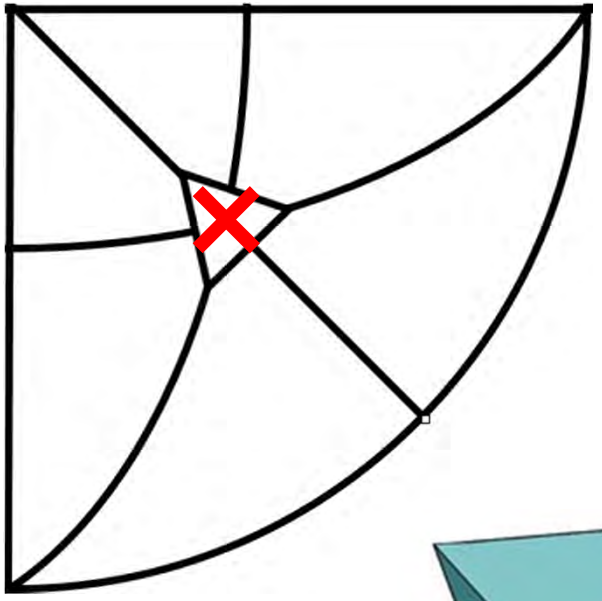
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$$

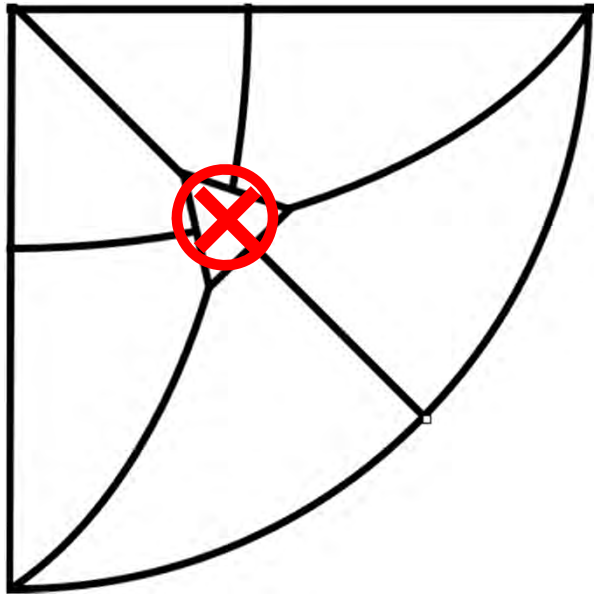


Символы граней

Кубическая сингония

Единичная грань (111) отсекает **равные** отрезки по осям (фиксирована!!)





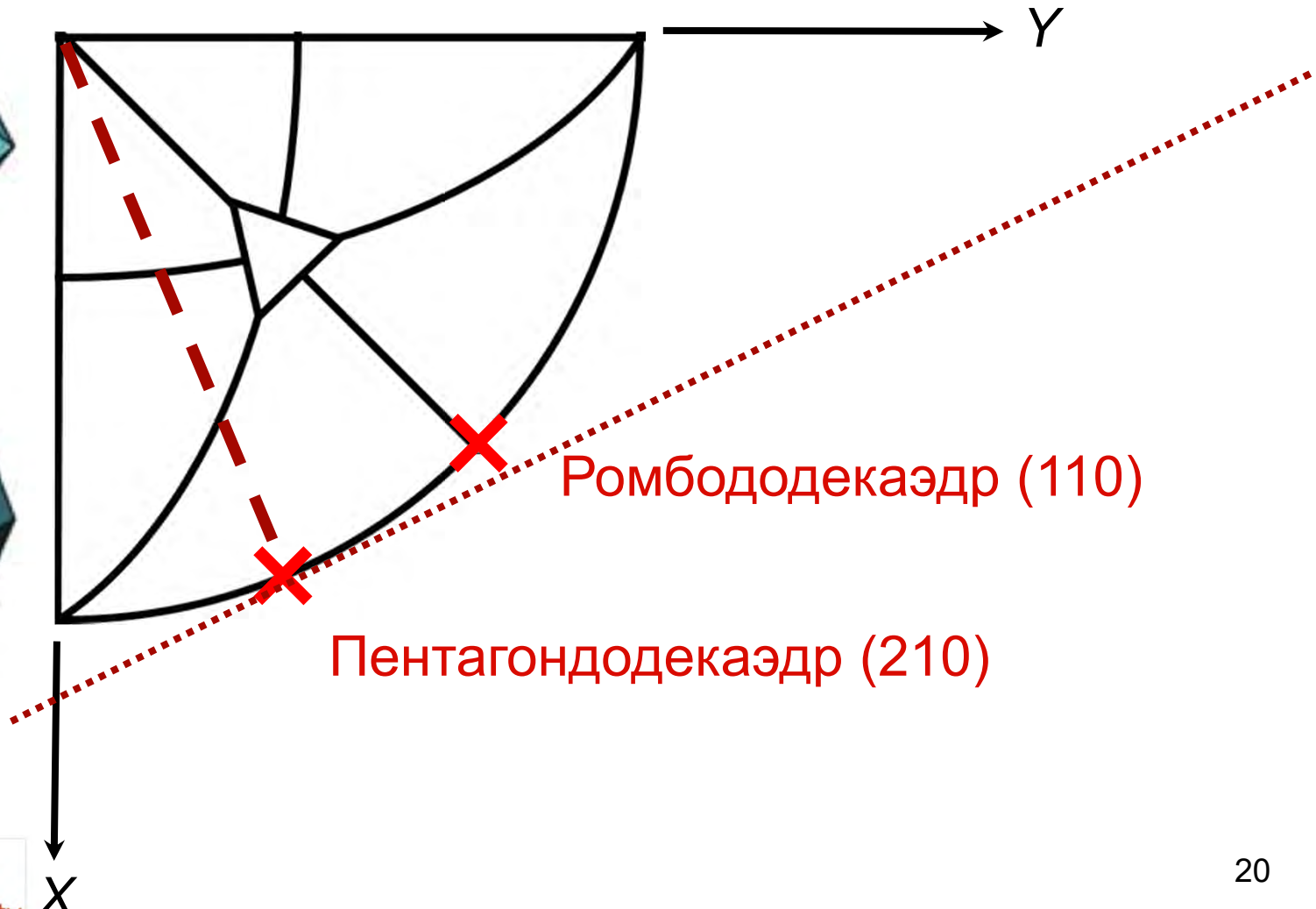
Тетраэдр

Октаэдр

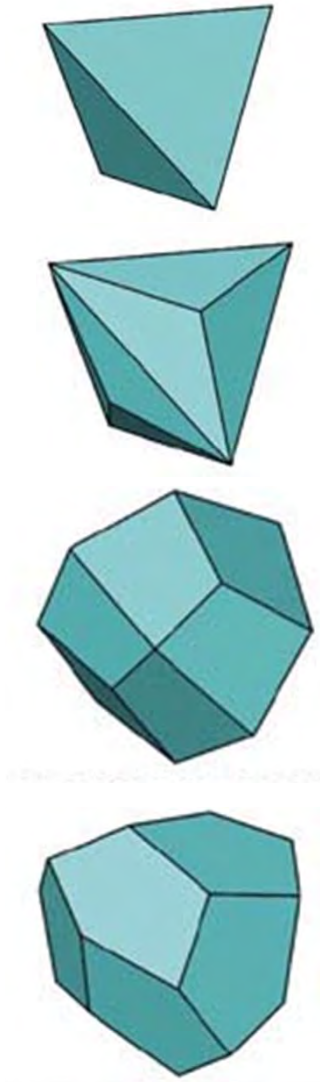
Символы граней

Кубическая сингония

$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{b}\ \frac{1}{c} = (hkl)$$

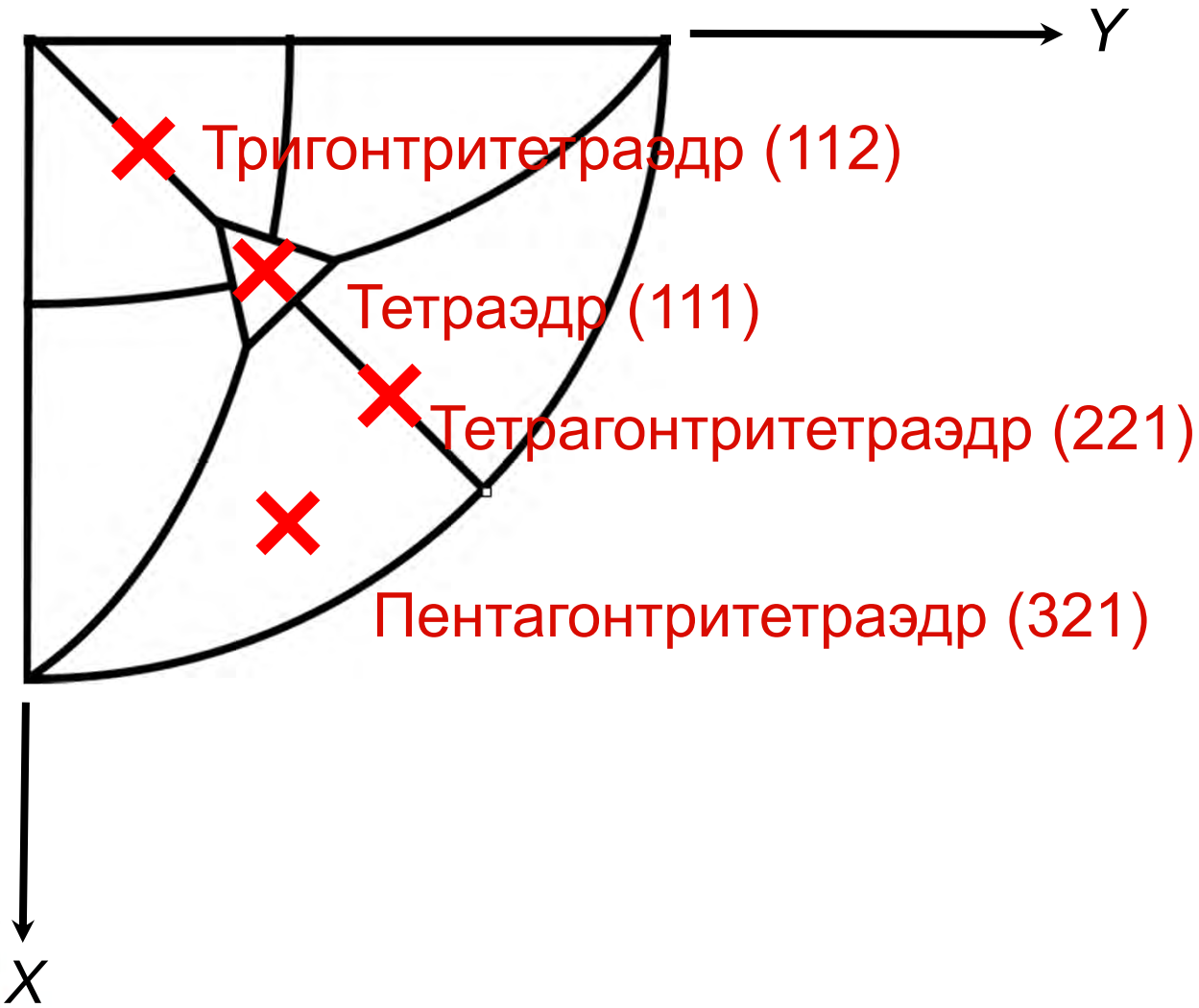


Символы граней



Кубическая сингония

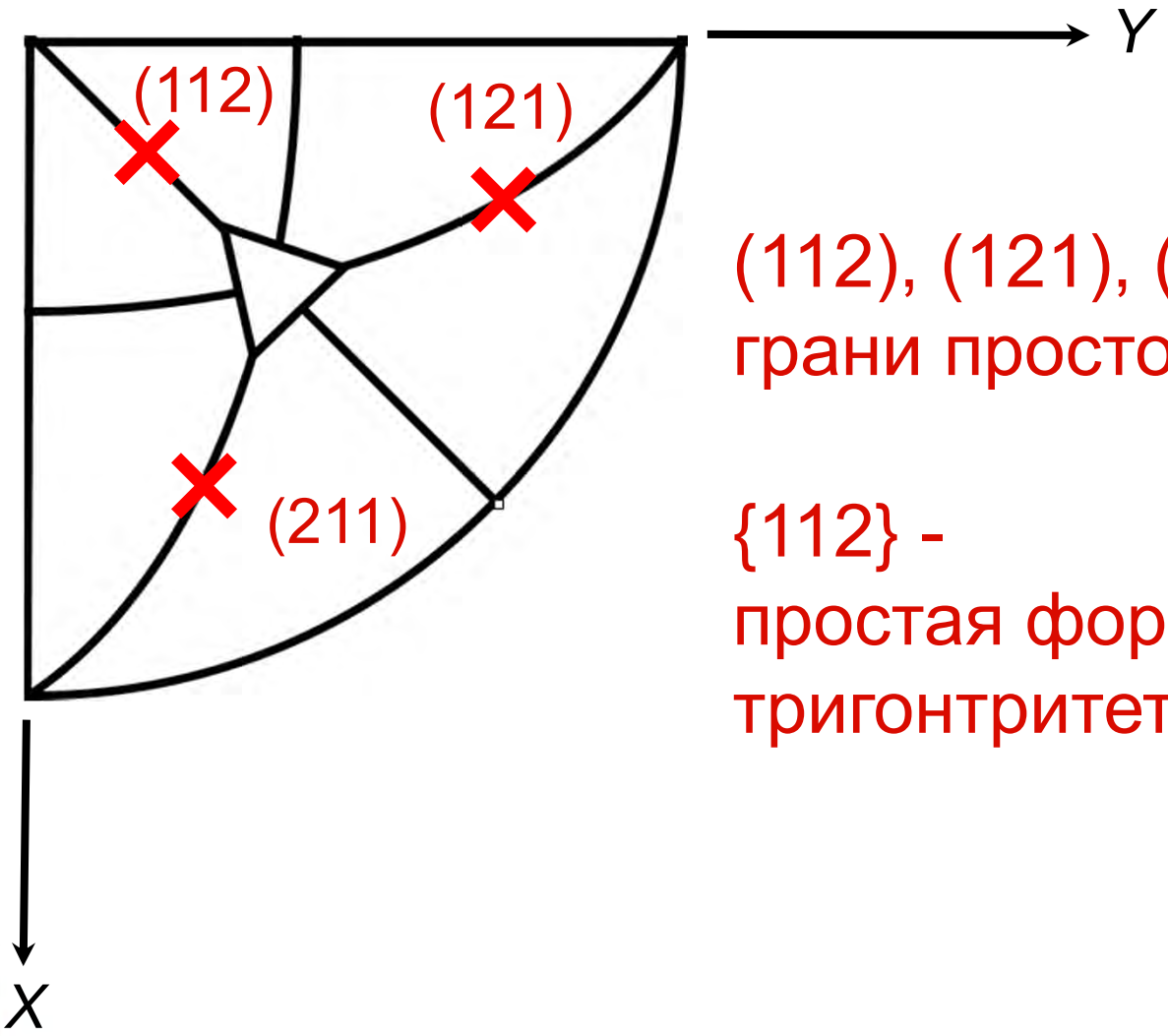
$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{b}\ \frac{1}{c} = (hkl)$$



Символы граней

Кубическая сингония

$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{b}\ \frac{1}{c} = (hkl)$$

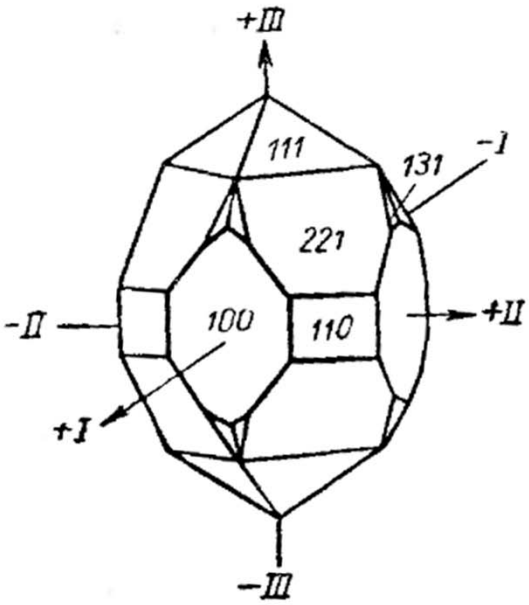


(112), (121), (211) - грани простой формы

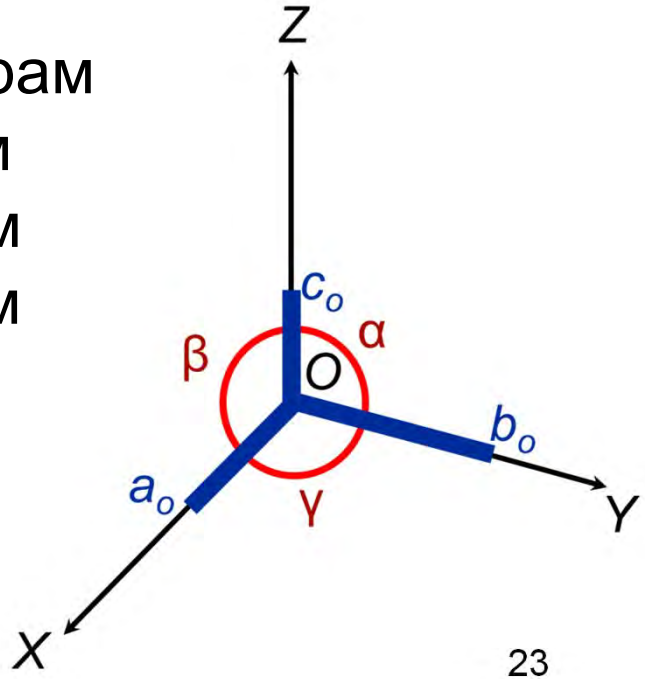
{112} - простая форма тригонтритетраэдр

Символы граней

Тетрагональная сингония



1. Ось Z выбирается вдоль оси 4-го порядка
2. Оси X и Y
- по простым или инверсионным осям второго порядка
- или по перпендикулярам к вертикальным граням
- или по существующим или возможным ребрам кристалла



$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$$

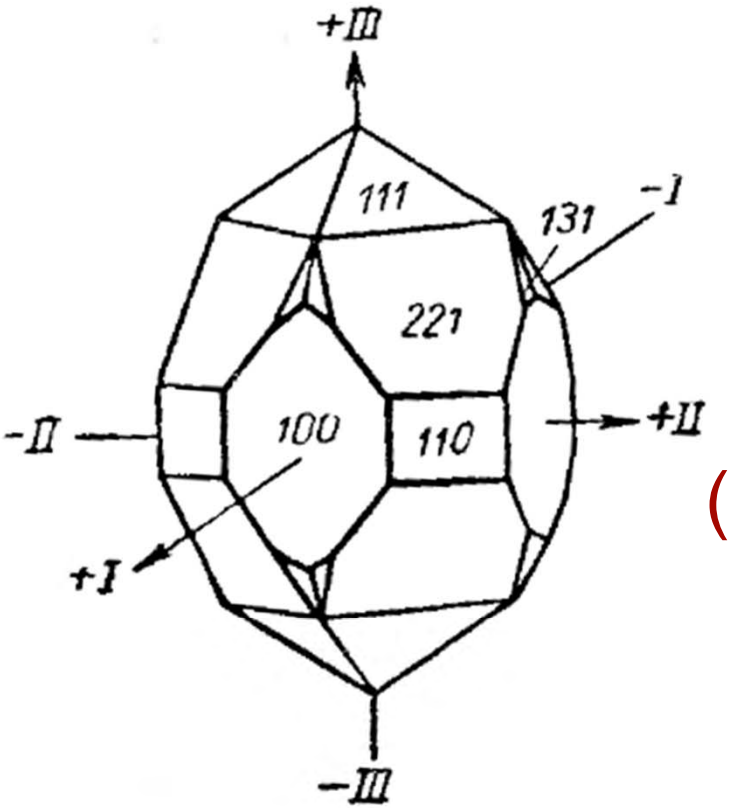
St.Petersburg State University

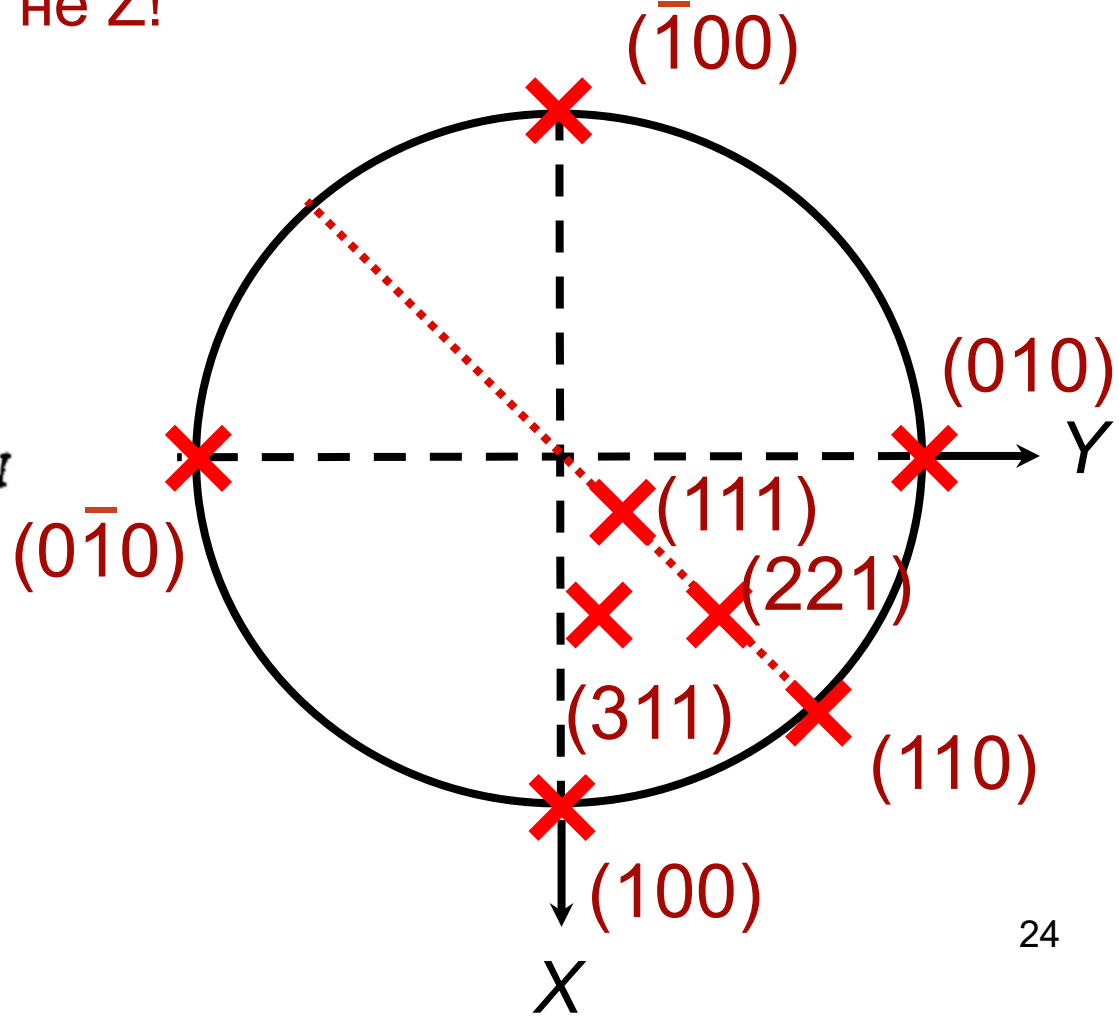
Символы граней

Тетрагональная сингония

$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{b}\ \frac{1}{c} = (hkl)$$

Единичная грань (111) занимает фиксированное положение относительно X и Y, но не Z!



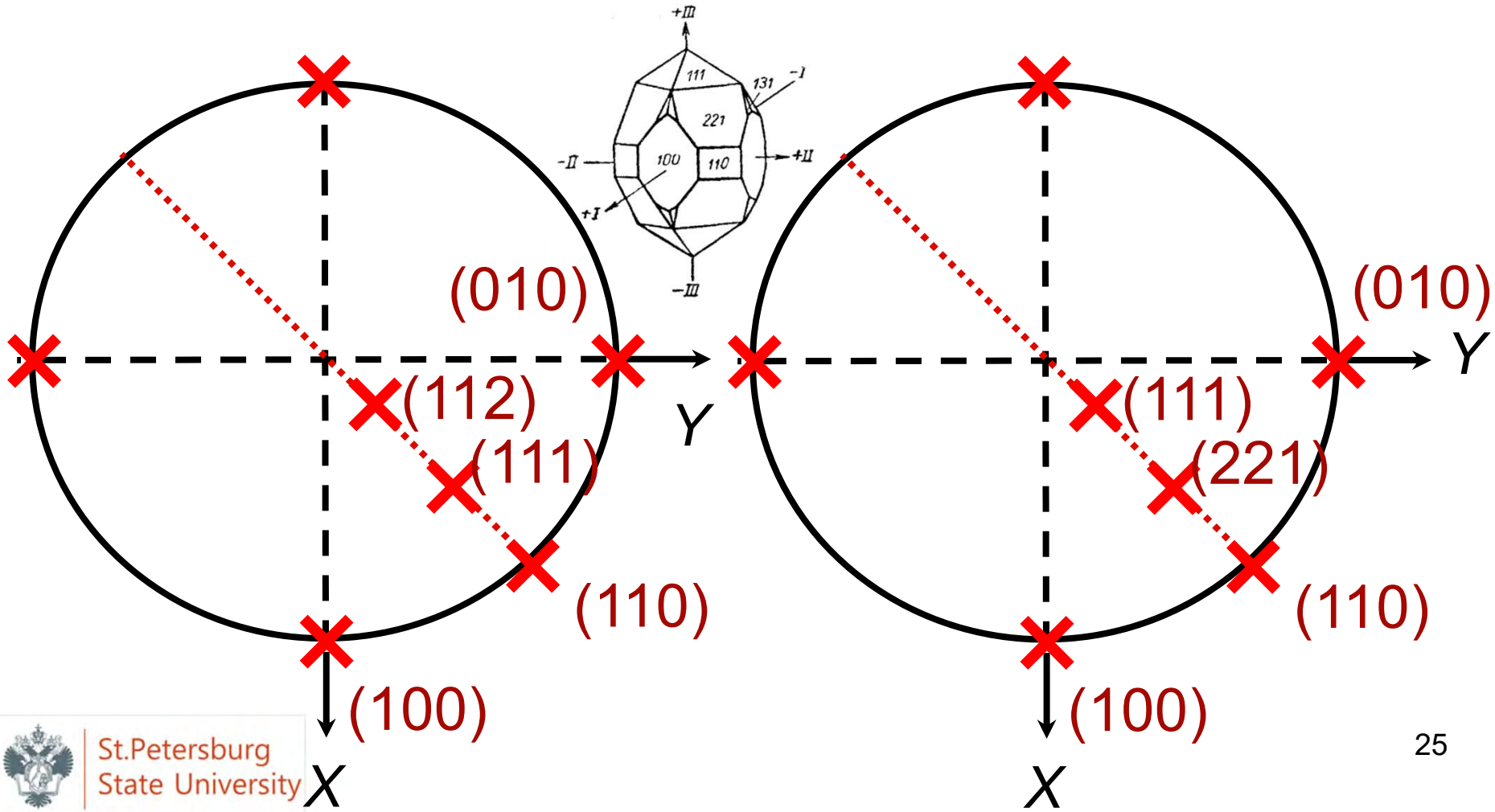


Символы граней

Тетрагональная сингония

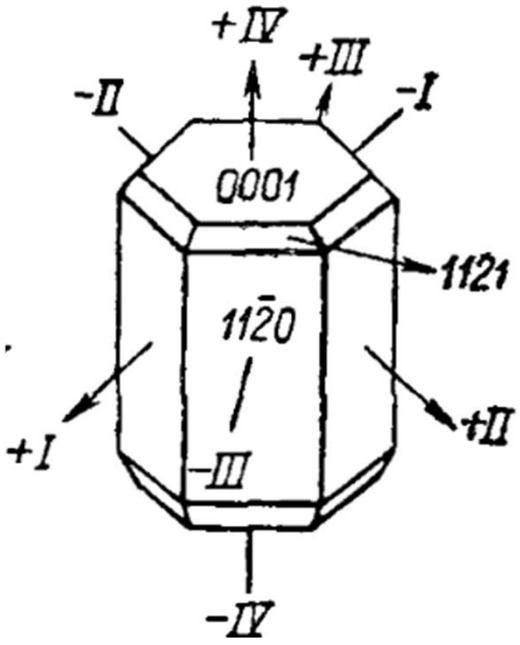
$$\frac{1}{a}\ \frac{1}{b}\ \frac{1}{c} = (hkl)$$

Возможны варианты выбора единичной грани

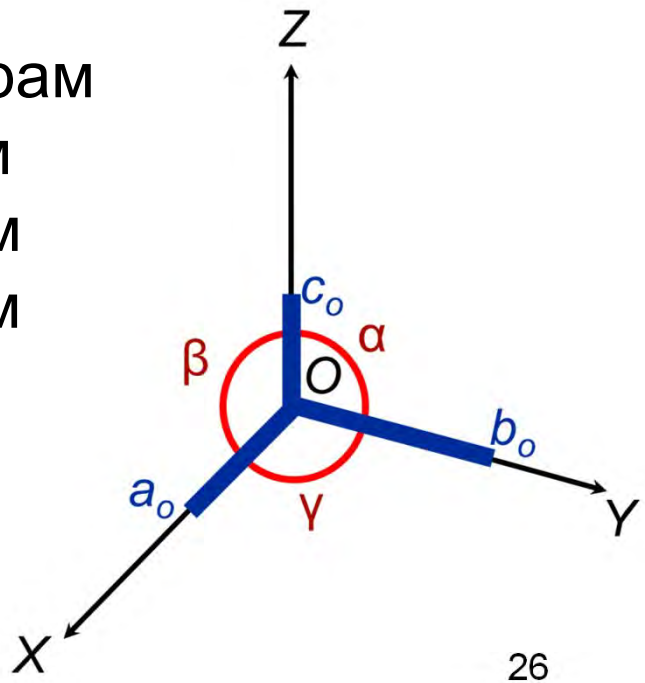


Символы граней

Тригональная и гексагональная сингонии



1. Ось Z выбирается вдоль оси 3-го или 6-го порядка
2. Оси X и Y
- по простым или инверсионным осям второго порядка
- или по перпендикулярам к вертикальным граням
- или по существующим или возможным ребрам кристалла



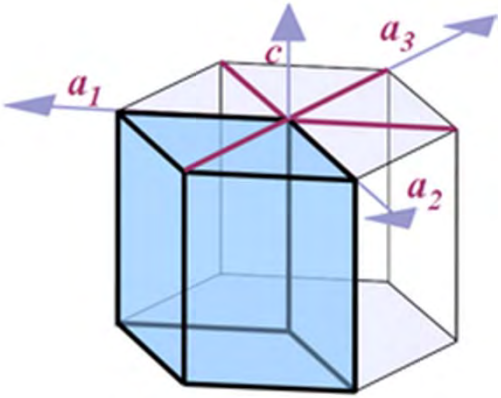
$$a = b \neq c$$

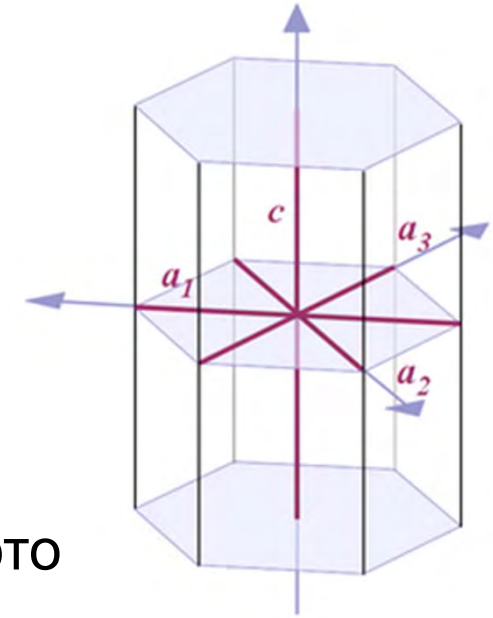
$$\alpha = \beta = 90^o \quad \gamma = 120^o$$

Символы граней

Тригональная и гексагональная сингонии

В силу структурных особенностей, в гексагональной системе координат вводится третья горизонтальная ось (*W*), равнодействующая осям *X* и *Y*





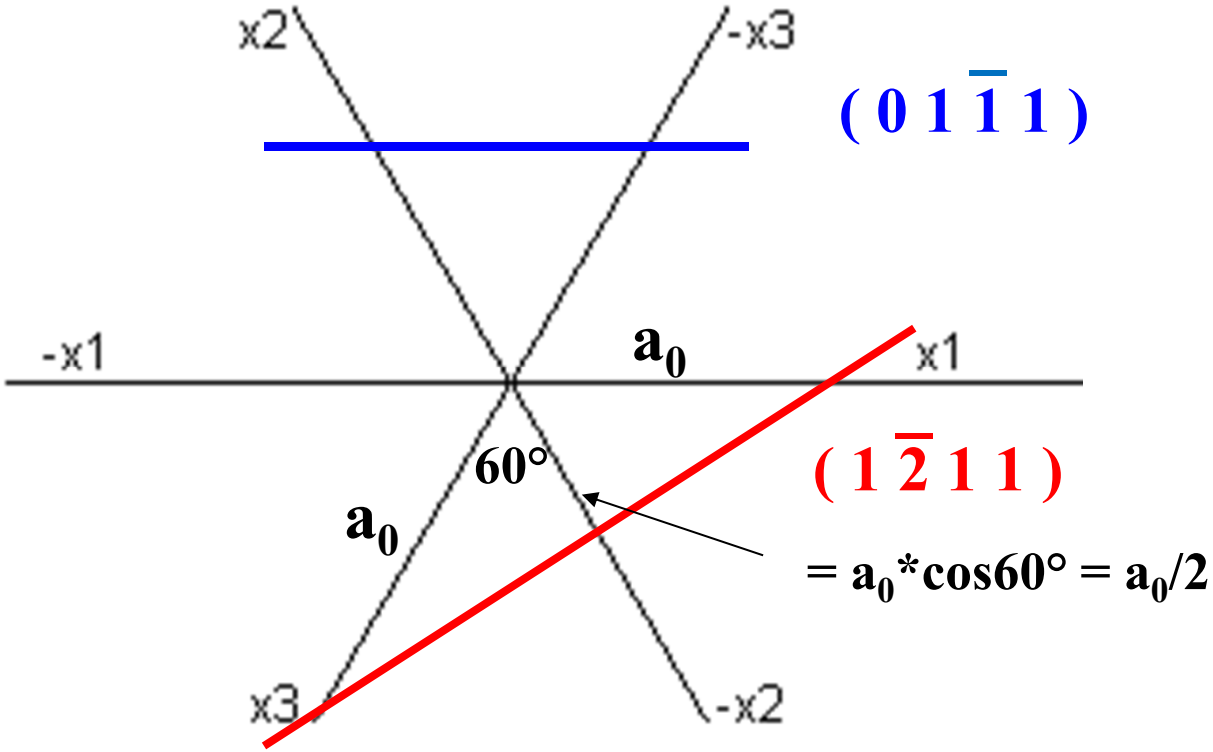
Символ грани тогда будет выглядеть (*hkil*), где *i* – это символ относительно оси *W*, причем соотношение индексов описывается уравнением:

$$h + k + i = 0$$

Символы граней

Тригональная и гексагональная сингонии

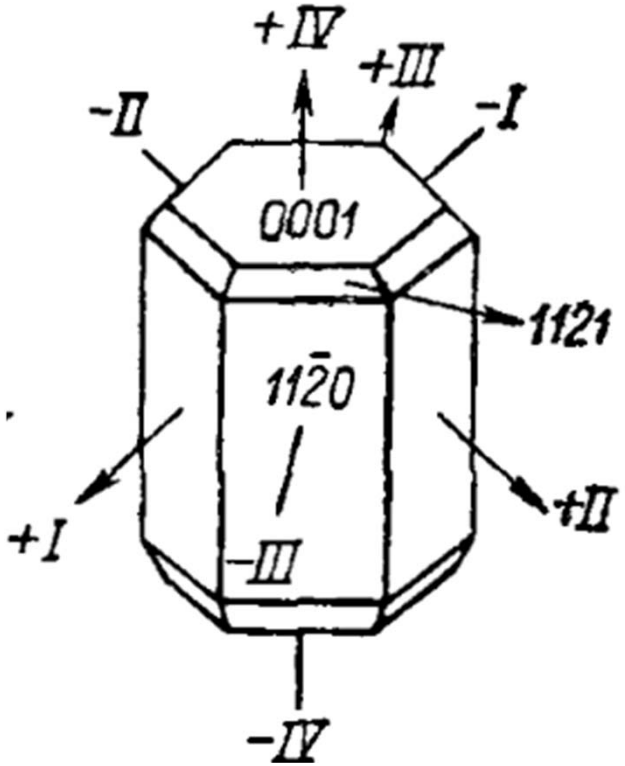
В гексагональной системе координат не может существовать плоскости, отсекающей одинаковые отрезки по всем трем горизонтальным осям, поэтому возможны два варианта выбора единичной грани

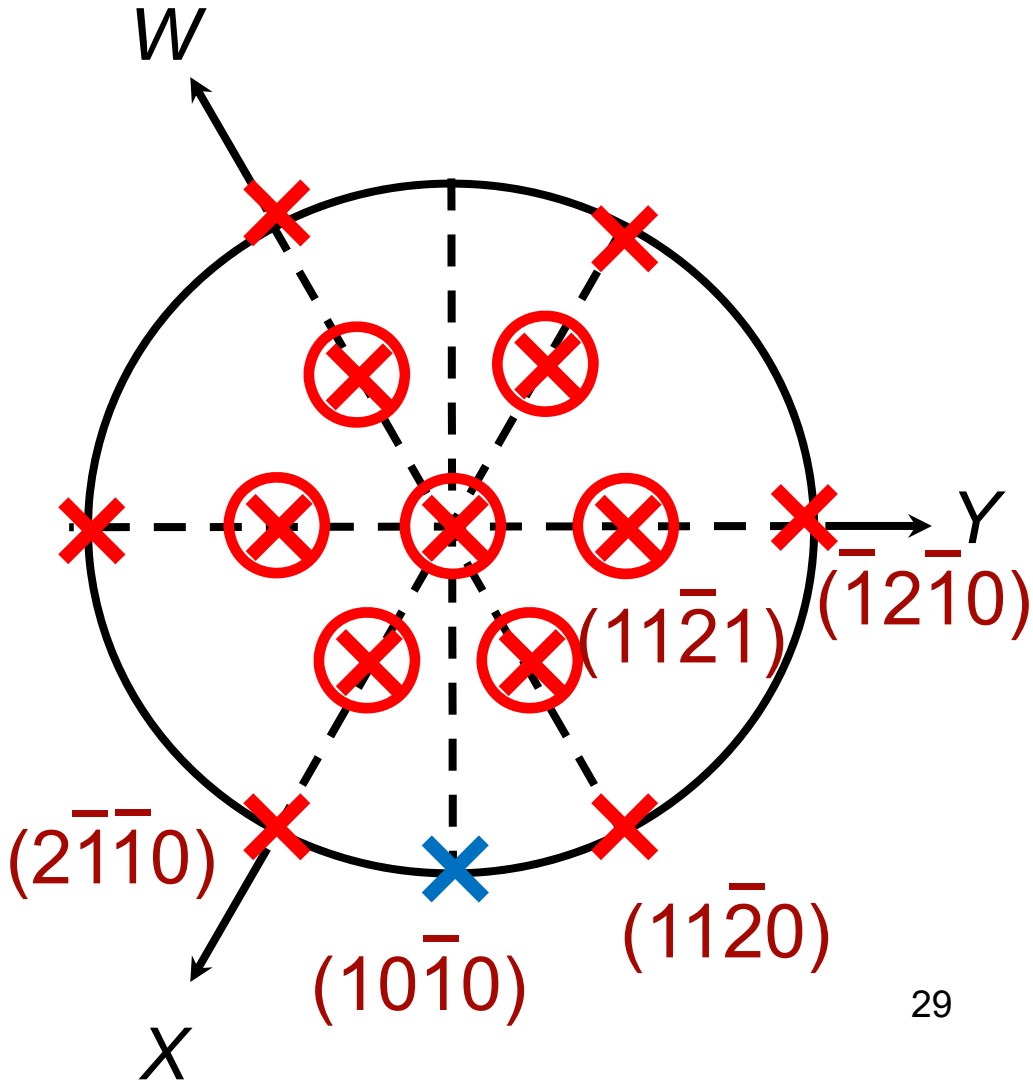


St.Petersburg State University

Символы граней

Тригональная и гексагональная сингонии





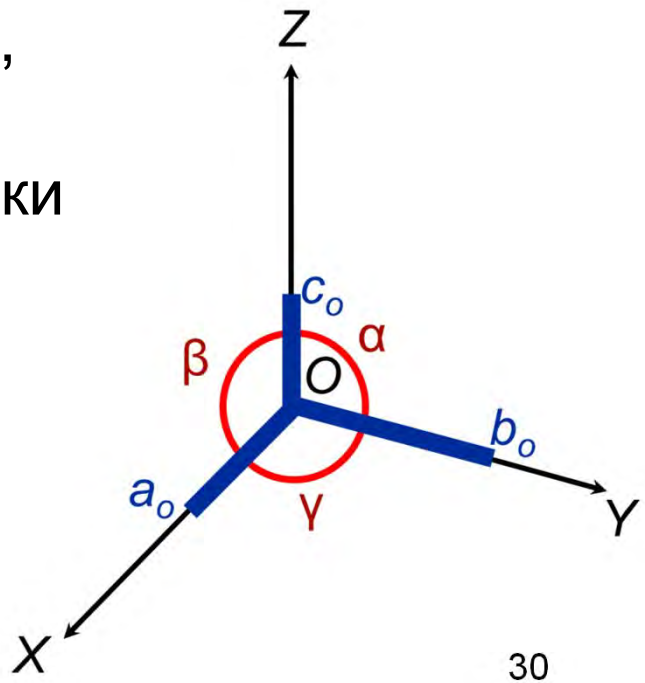
St.Petersburg State University

Символы граней

Ромбическая сингония

Оси выбираются по простым или инверсионным осям второго порядка; если есть только одна ось второго порядка, она ставится вертикально.

Оси *X*, *Y* и *Z* являются уникальными, поэтому за единичную принимают грань, наклонную ко всем трем осям и отсекающую близкие по значению отрезки



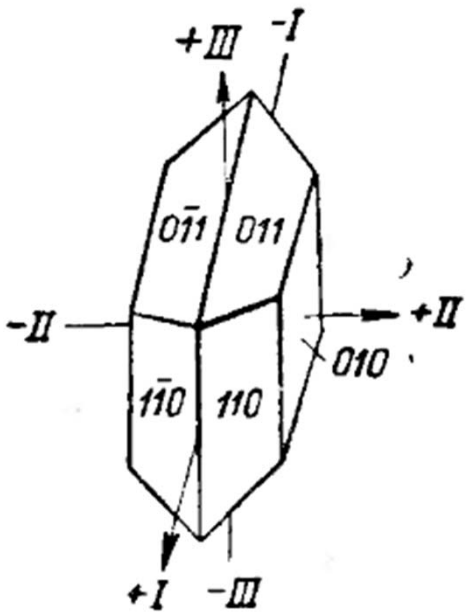
$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$$

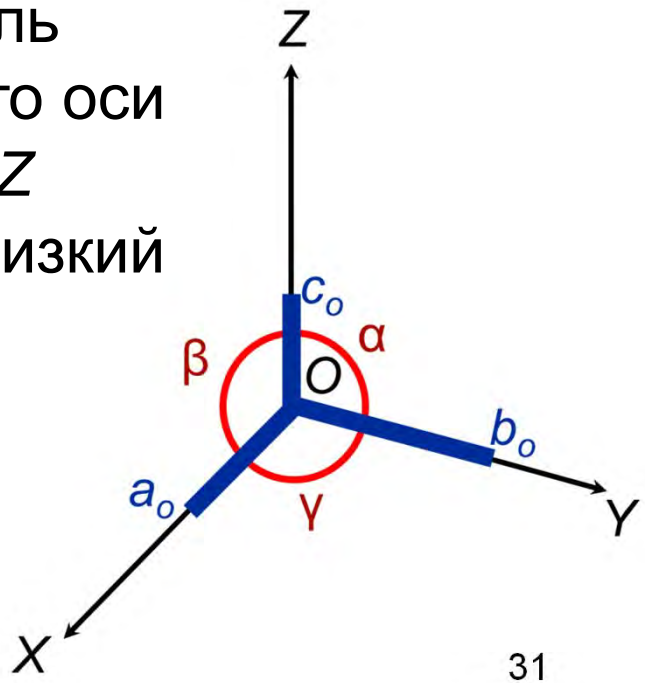
St.Petersburg State University

Символы граней

Моноклинная сингония



1. Ось *Y* выбирается по простой или инверсионной оси второго порядка.
2. Ось *Z* выбирается по оси наиболее развитой зоны.
3. Ось *X* выбирается вдоль ребра, перпендикулярного оси *Y* и образующего с осью *Z* угол, как можно более близкий к 90°.

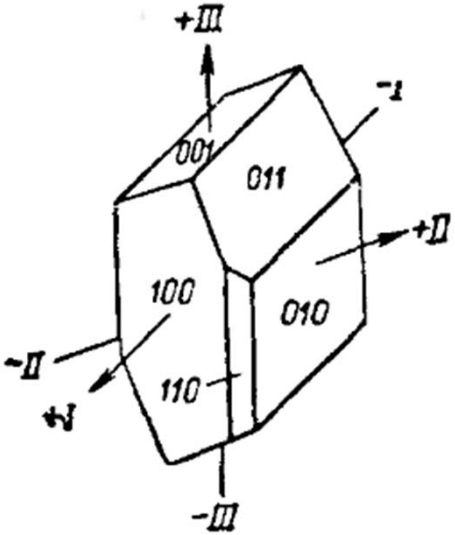


$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^o \quad \beta \neq 90^o$$

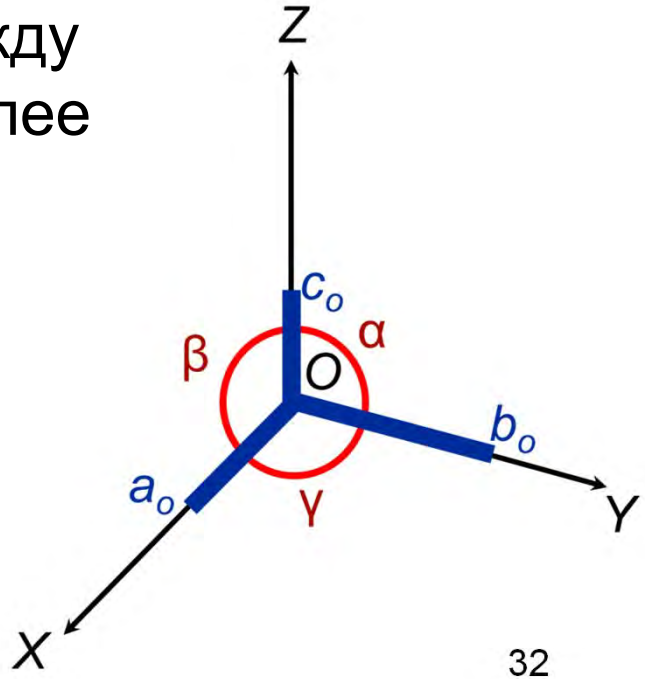
Символы граней

Триклинная сингония



1. Ось *Z* выбирается как ось наиболее развитой зоны.

2. Оси *X* и *Y* выбираются вдоль ребер кристалла таким образом, чтобы углы между ними были как можно более близкими к 90°.



$$a \neq b \neq c$$

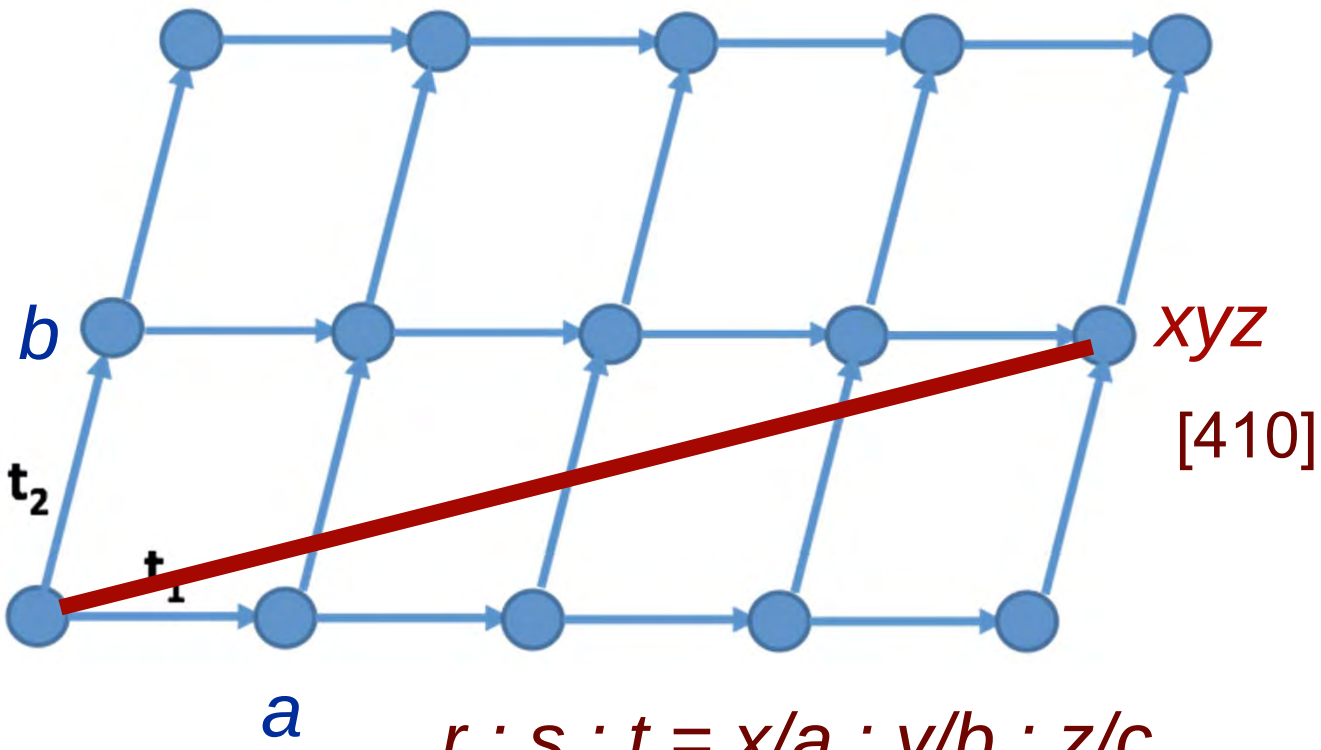
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^o$$

Кристаллографические системы координат

Категория	Линейные параметры	Сингония	Угловые параметры
Низшая	$a \neq b \neq c$	Триклинная	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^o$
		Моноклинная	$\alpha = \gamma = 90^o$ $\beta \neq 90^o$
		Ромбическая	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
Средняя	$a = b \neq c$	Тетрагональная	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
		Тригональная	$\alpha = \beta = 90^o$ $\gamma = 120^o$
		Гексагональная	
Высшая	$a = b = c$	Кубическая	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$

Символы направлений

Символы направлений = символы ребер кристалла



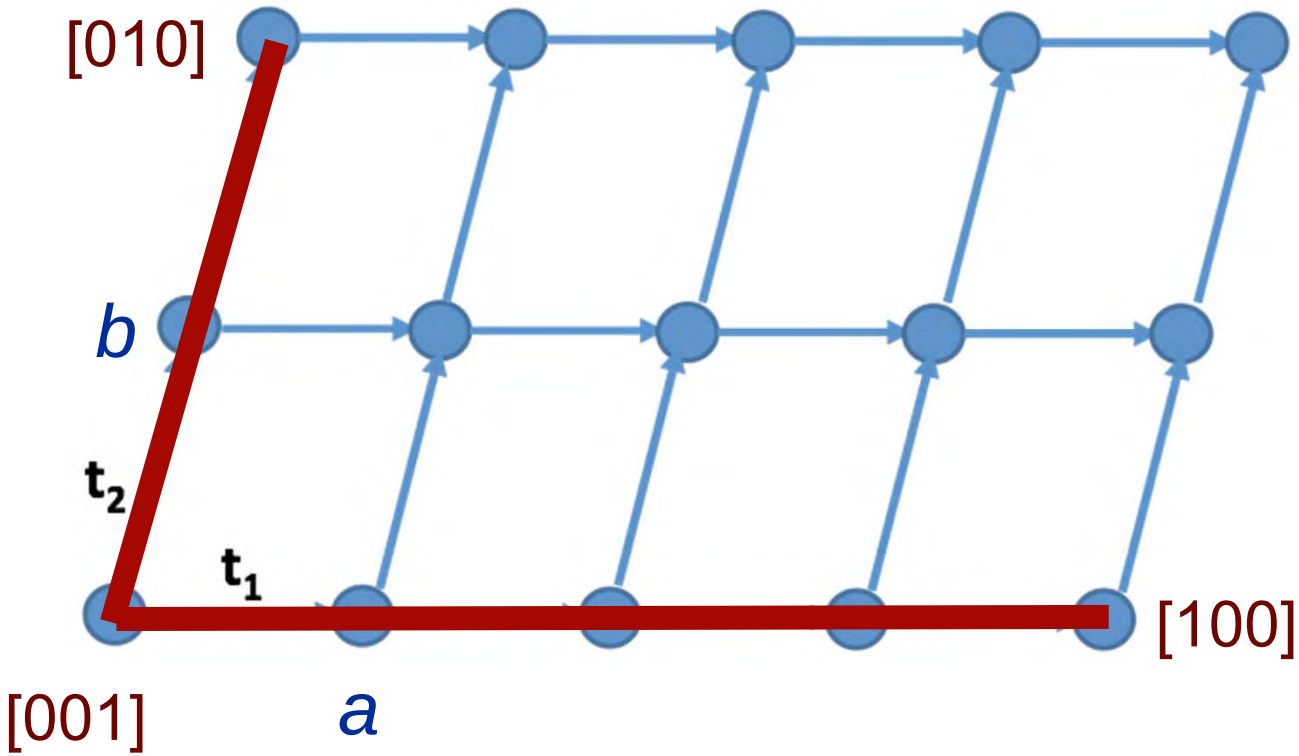
$$r : s : t = x/a : y/b : z/c$$

$$x = 4a; \quad y = 1b; \quad z = 0c$$

$$r : s : t = 4 : 1 : 0$$

Символы направлений

В отличии от символов граней, в символах ребер используются **прямые**, а не обратные отношения



Индекс направления записывается как [*hkl*] и, например, для <u>ортогональных систем</u> координат является перпендикуляром к грани с таким же числовым значением

Символы направлений

Как соотносятся символы грани (*hkl*) и символы ребра [*rst*], принадлежащего этой грани?

$$hr + ks + lt = 0$$

Пусть две грани (*hkl*) и (*mnp*) пересекаются.
Каковы будут символы направления (ребра), по которым они пересекаются?

$$hr + ks + lt = 0$$

$$mr + ns + pt = 0$$

$$r : s : t = (kp - nl) : (lm - hp) : (hn - km)$$

Символы направлений

<u>Метод перекрестного умножения</u>

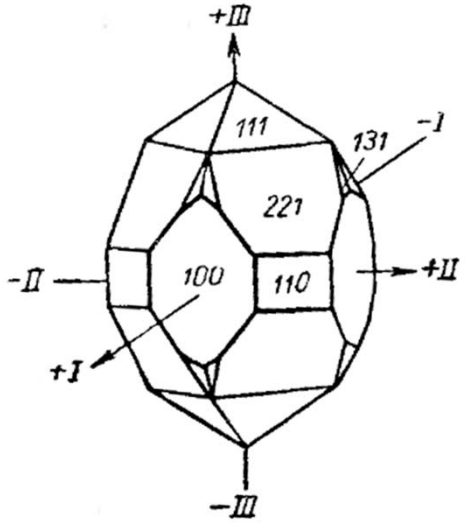
$$r : s : t = (kp - nl) : (lm - hp) : (hn - km)$$

$$\begin{array}{c|ccccc|c} h & k & l & h & k & l \\ & & \times & \times & \times & \\ m & n & p & m & n & p \end{array}$$

Символы направлений

<u>Метод перекрестного умножения</u>

$$r : s : t = (kp - nl) : (lm - hp) : (hn - km)$$



$$\begin{array}{c|cccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ & \times & \times & \times & & \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

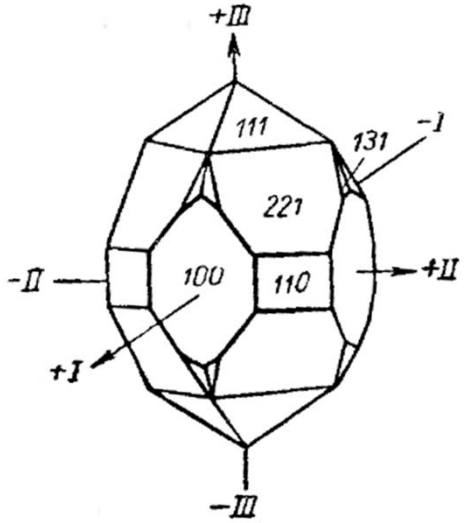
(0-0):(0-0):(1-0)

0:0:1 = [001]

Символы направлений

<u>Метод перекрестного умножения</u>

$$r : s : t = (kp - nl) : (lm - hp) : (hn - km)$$



$$\begin{array}{c|cccc|c} 2 & 2 & 1 & 2 & 2 & 1 \\ & & \times & \times & \times & \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

$$(0-1):(1-0):(2-2)$$

$$-1:1:0 = [\bar{1}10]$$

Закон Вейсса

Христиан Вейсс
(1780-1856)

Определение зоны (пояса)

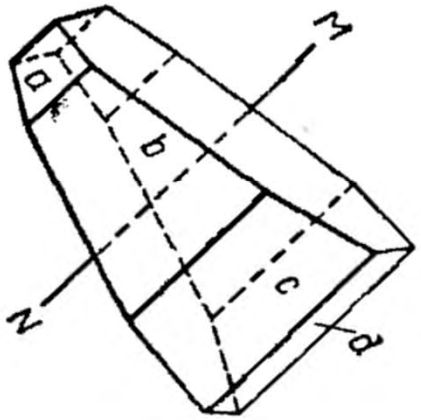
Поясом или *зоной* называется совокупность граней кристалла, пересекающихся по параллельным ребрам.

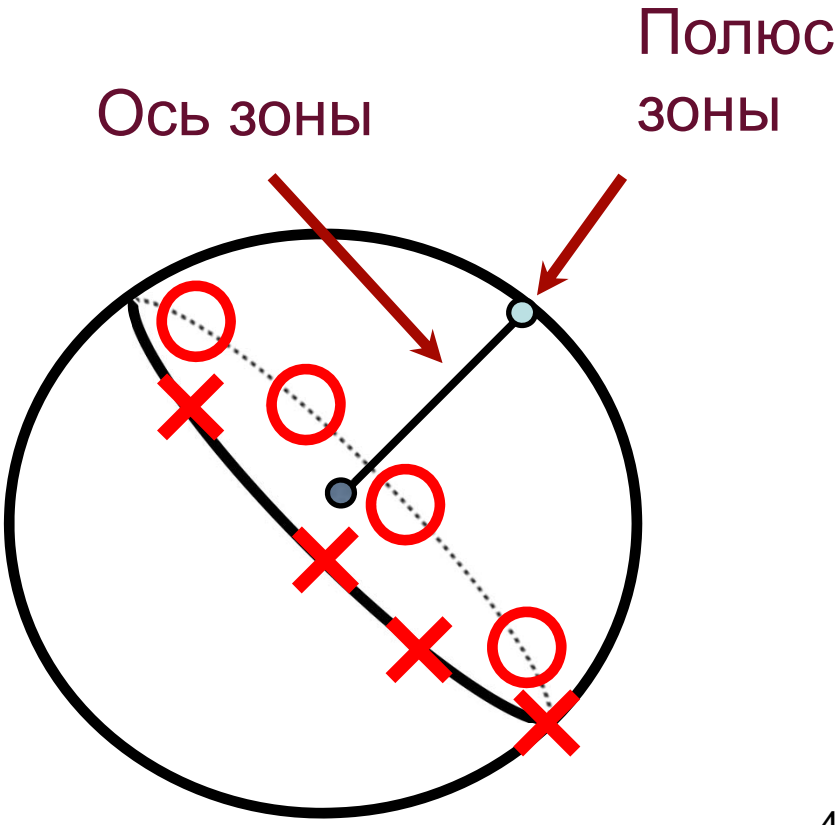
Направление, параллельное всем ребрам зоны, называется осью зоны.

Закон Вейсса

Христиан Вейсс
(1780-1856)

Грани зоны всегда лежат на дуге большого круга





Закон Вейсса

Христиан Вейсс
(1780-1856)

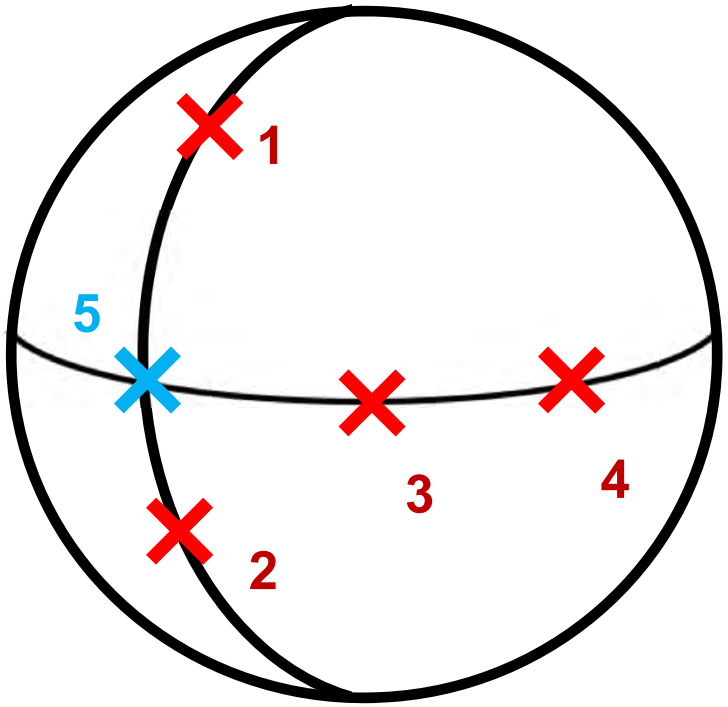
Формулировки закона:

1. Любая грань кристалла принадлежит по меньшей мере двум его поясам.

2. Плоскость, параллельная двум ребрам кристалла, представляет собой его возможную грань, а прямая, параллельная линии пересечения двух граней, является его возможным ребром.

Закон Вейсса

Поиск возможных граней кристалла:

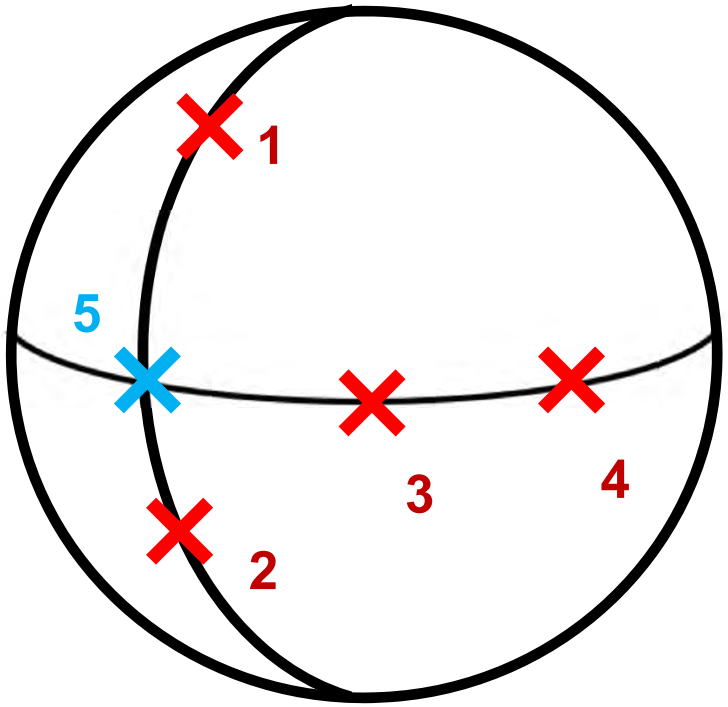


1. Две грани определяют зону: проводим через них дугу большого круга, соответствующую расположению граней зоны.

2. На пересечении дуг двух зон находится возможная грань кристалла.

Закон Вейсса

Поиск возможных граней кристалла:



1 - (123)

2 - (121)

3 - (111)

4 - (211)

5 - ?

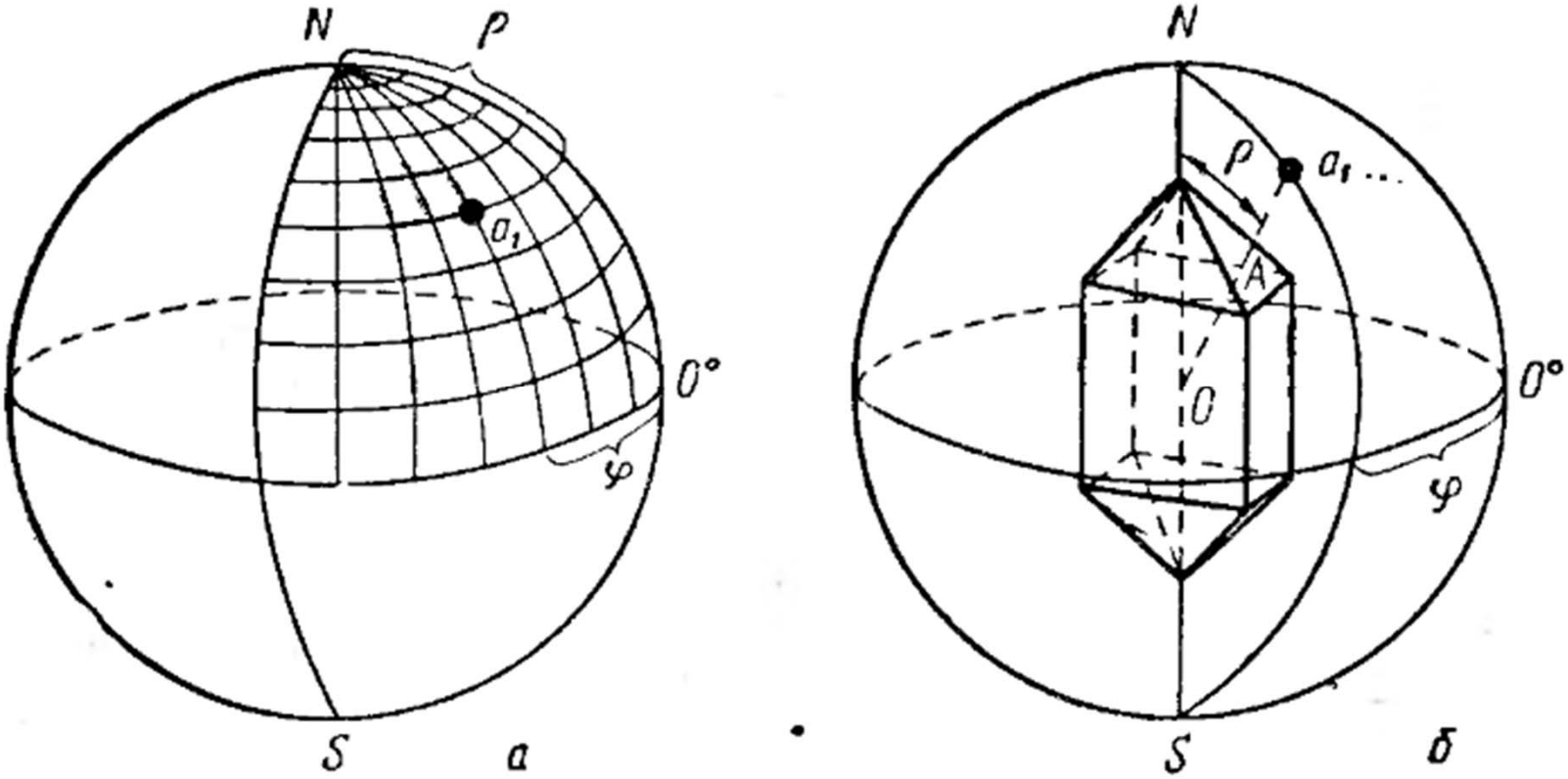
(123) + (121) = (244) = (122)

(*hkl*) + (211) = (111)

(122) + (211) = (333)

Стереографические проекции

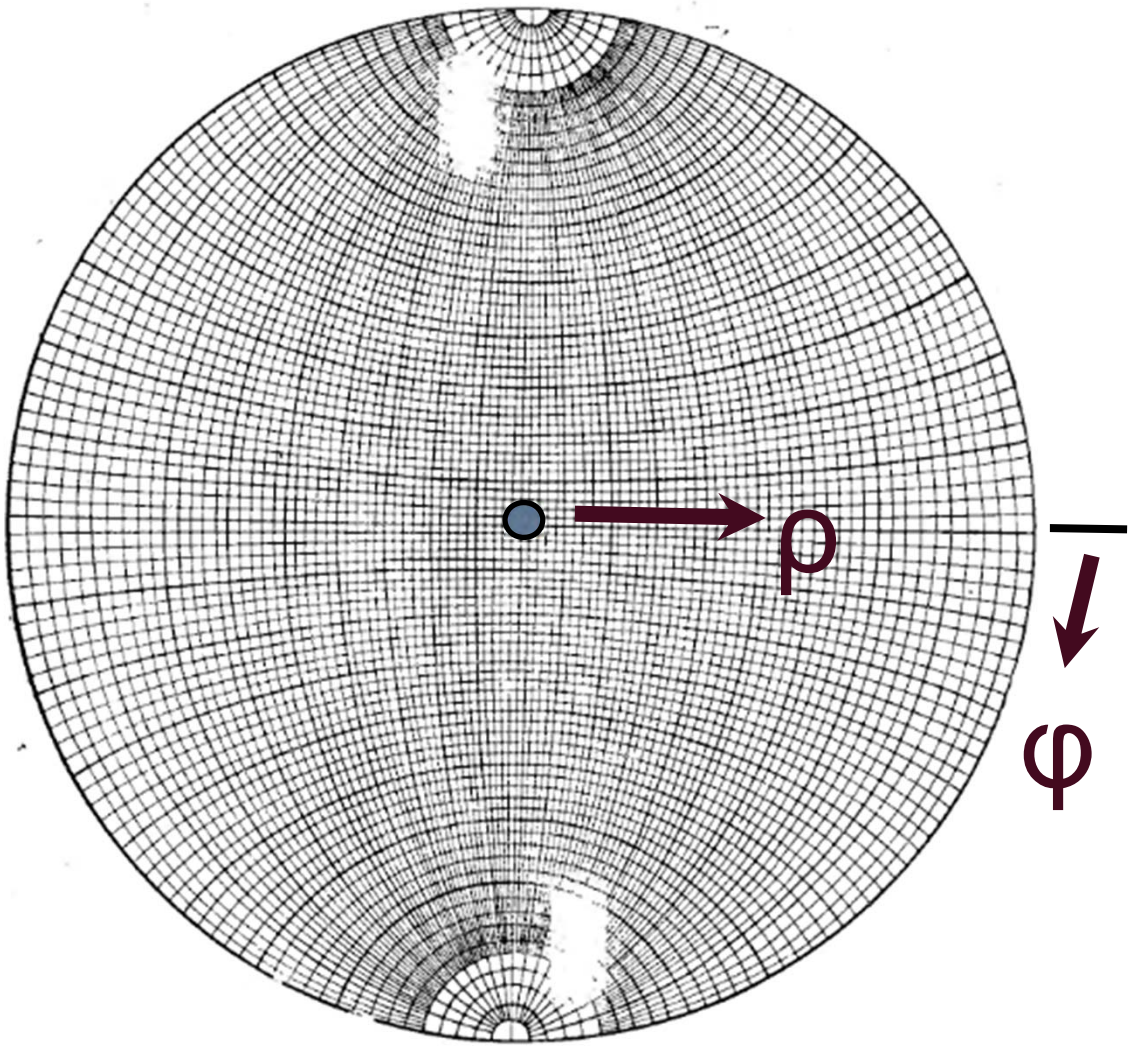
Сферические координаты граней



(φ, ρ)

Стереографические проекции

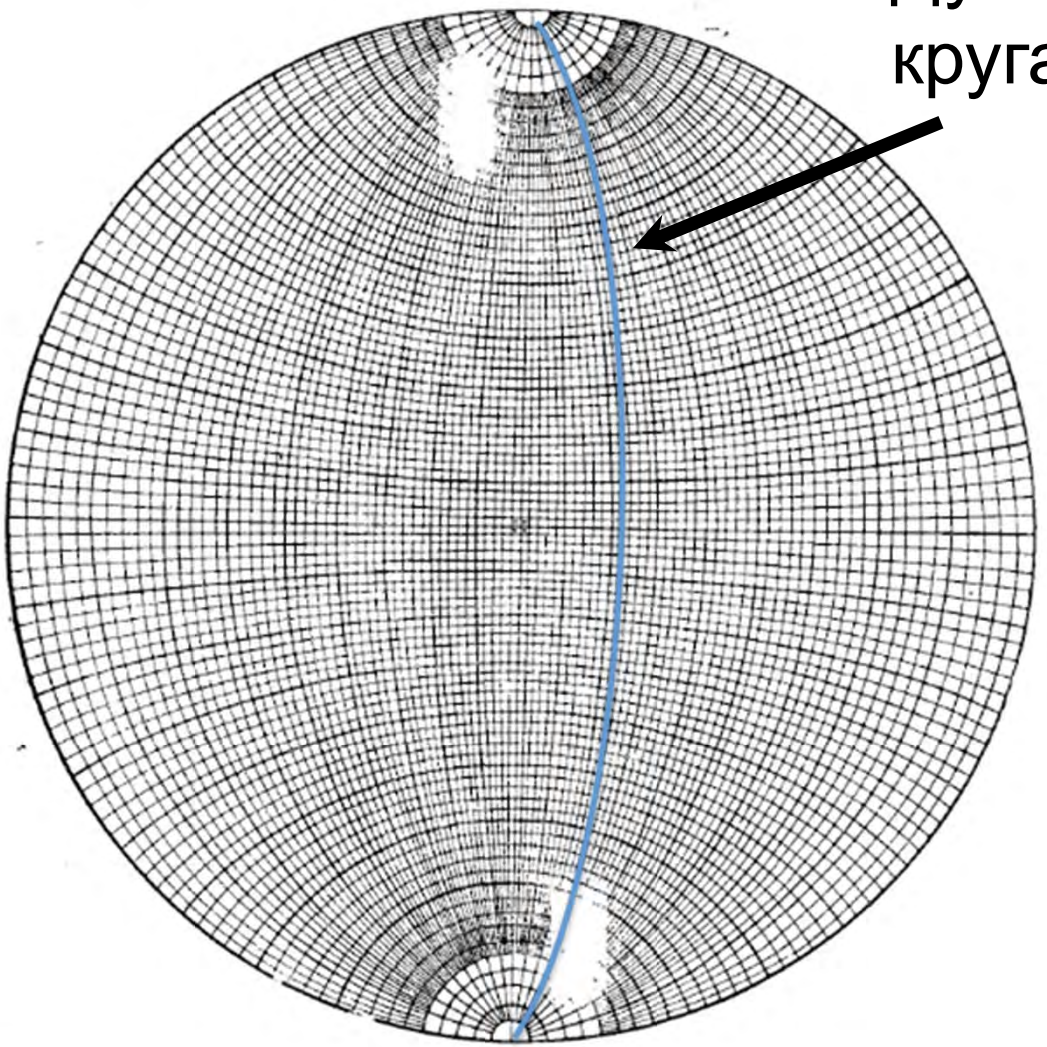
Сетка Вульфа



St.Petersburg State University

Стереографические проекции

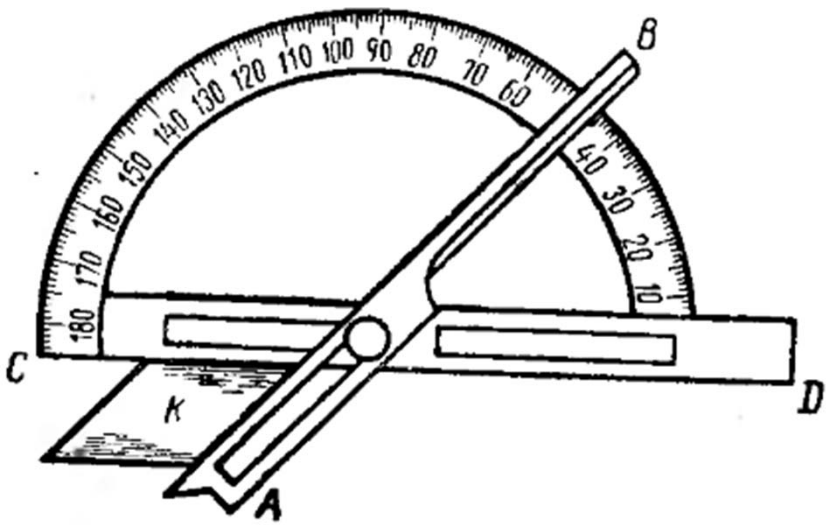
Сетка Вульфа

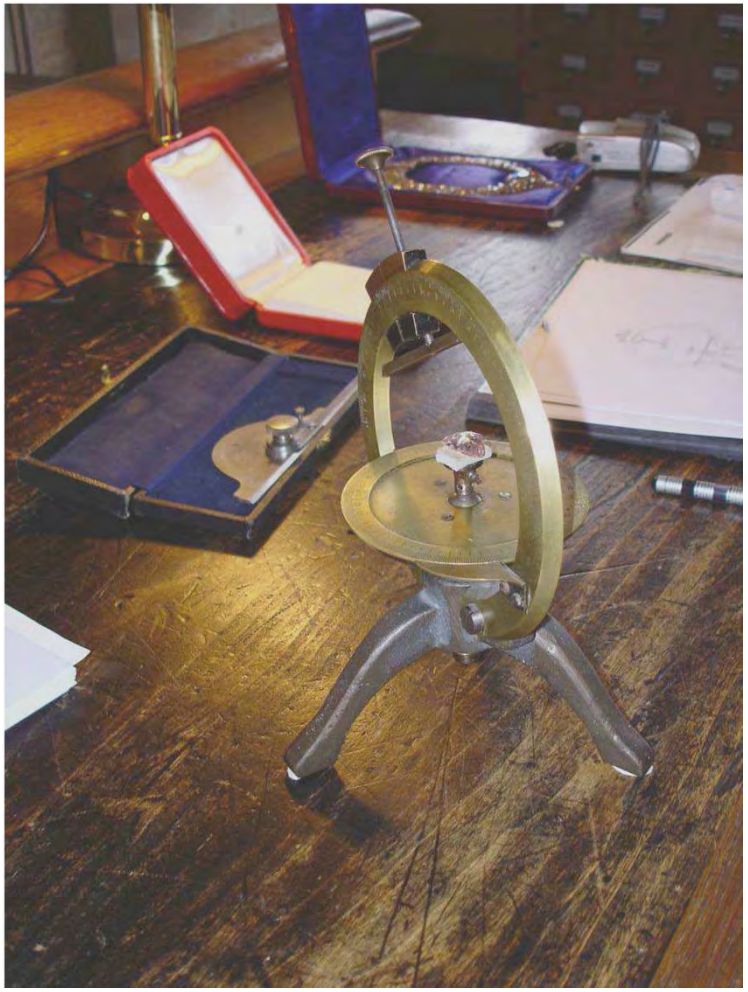


St.Petersburg State University

Измерение кристаллов

Гониометрия

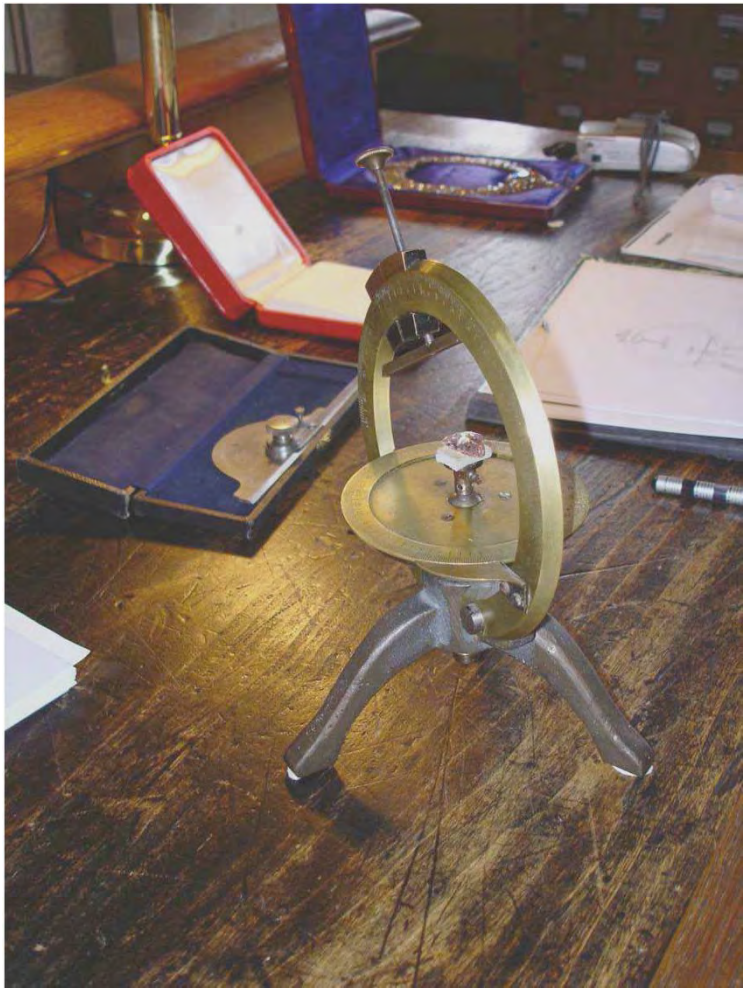




Arnould Carangeot (1746-1802)

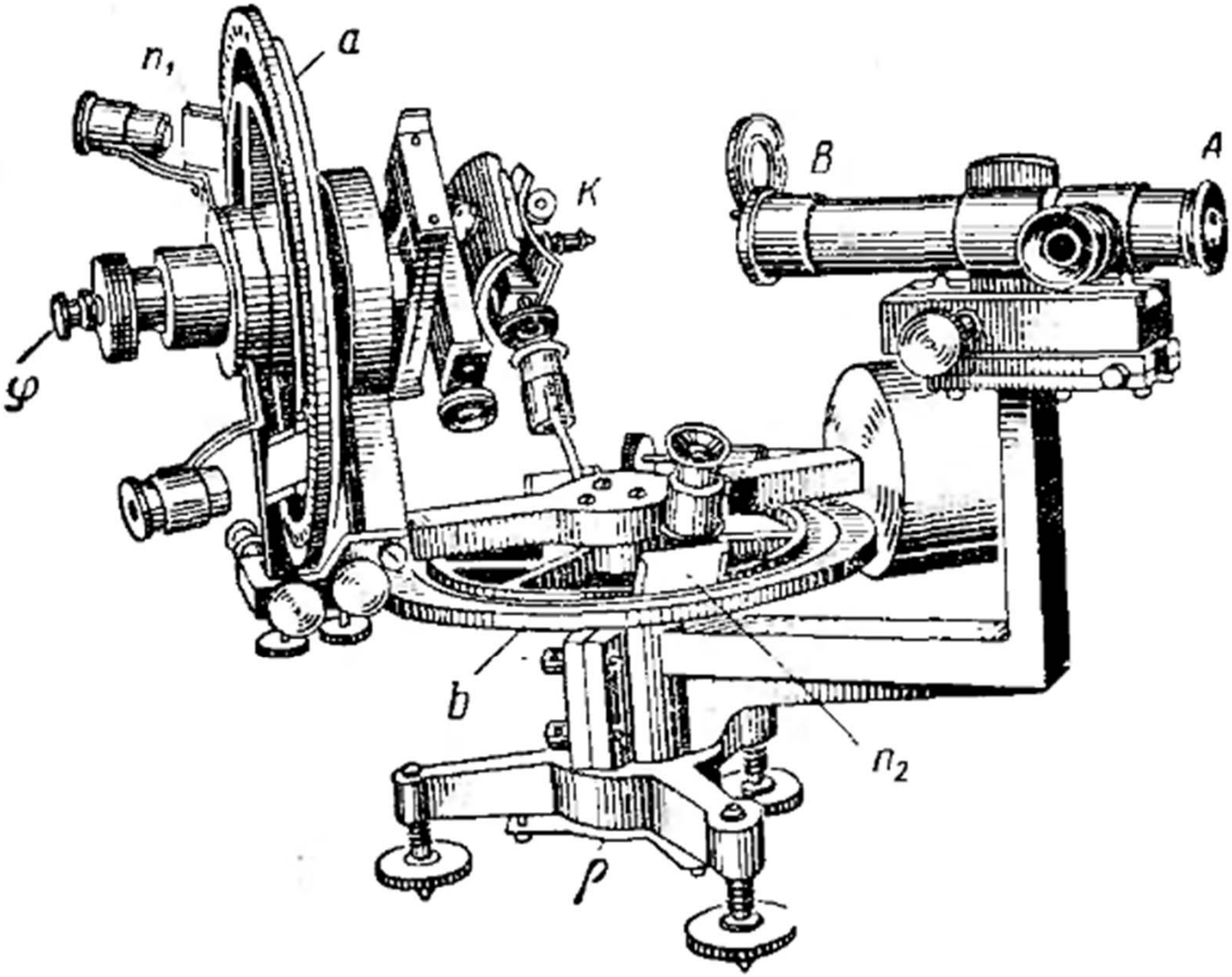
Измерение кристаллов

Гониометрия



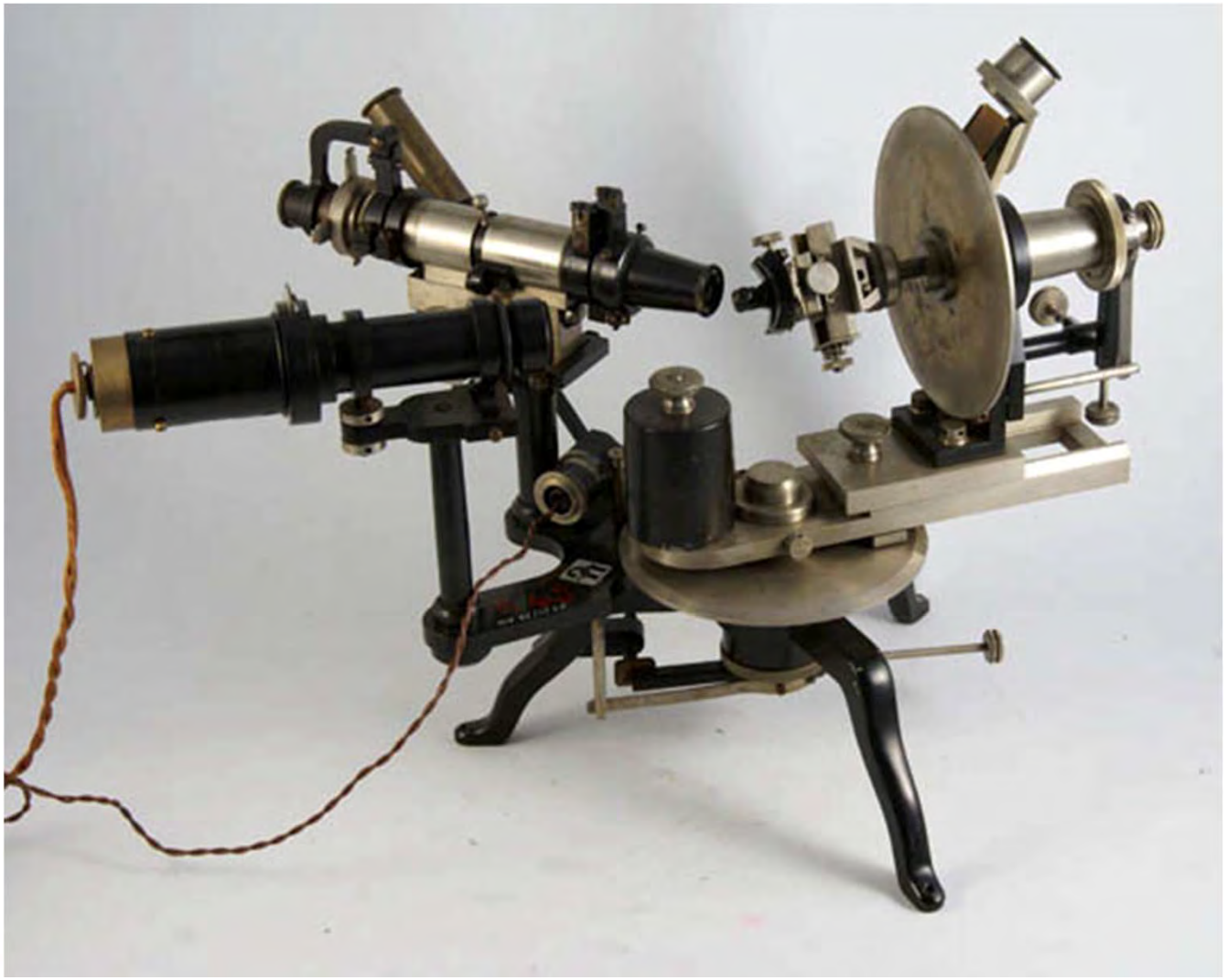
Измерение кристаллов

Двукружный отражательный гониометр



Измерение кристаллов

Двукружный отражательный гониометр



St.Petersburg
State University