5. Символы граней кристаллов

5.1. Символьная характеристика граней

В предыдущем разделе для описания морфологии кристаллов использовались стереографические проекции. Проекция дает наглядное и вполне адекватное представление об огранке кристалла, за исключением относительного развития разных граней. Недостатком проекций является их громоздкость. Это затрудняет использование проекций при работе с большими массивами морфологических данных – например, при описании форм минералов какого-либо месторождения, или вариаций формы того или иного минерала, и т.п. Необходим способ более компактного представления огранки кристаллов. Для этого используют числовые *кристаллографические символы*, присваиваемые граням кристалла. Мы уже сталкивались с символами граней, рассматривая таблицу простых форм 4.2, однако тогда говорить об их смысле было преждевременно. Как видно из этой таблицы, символы граней (в данном случае – символы простых форм) состоят из трех или четырех небольших чисел – *индексов*. Эти числа определяют наклоны граней к осям координатной системы, жестко связанной с кристаллом. Определение значений индексов, а соответственно, и символа грани называется *индицированием*. Прежде, чем переходить собственно к индицированию граней, необходимо ввести координатные системы, в которых индексы определяются.

5.2. Кристаллографические координатные системы

Связанная с кристаллом координатная система должна отражать симметрию кристалла. Поэтому для разных сингоний необходимо использовать разные системы координат, различающиеся углами между координатными осями и масштабами (единицами измерения) по осям. Координатная система наиболее общего вида показана на рис. 5.1. Начало координат помещается в центре кристалла, ось Z направляется вертикально вверх, ось Y – слева направо, ось X – более или менее на наблюдателя, и эти направления соответствуют положительным концам осей координат (координатная система *правая*). Обозначения углов между осями и единиц измерения по осям показаны на рис. 5.1. Координатные оси выбираются вдоль плотных рядов пространственной решетки, и масштабные отрезки по осям *a, b, c* равны периодам идентичности вдоль этих рядов. На кристаллических многогранниках плотным рядам решетки соответствуют оси симметрии, нормали к плоскостям симметрии (инверсионные оси второго порядка), а также реальные или возможные ребра кристалла. По этим направлениям и выбирают координатные оси для макрокристаллов. Если координатные оси совмещаются элементами симметрии кристалла (идут по симметрично-равным направлениям), то единицы измерения по таким осям одинаковы, если же оси не совмещаются элементами симметрии, единицы измерения по ним не равны. Конкретный способ выбора единиц измерения (масштабов) по координатным осям на кристаллических многогранниках будет рассмотрен далее, в разделе 5.6.

Выбор кристаллографической координатной системы называется *установкой кристалла*. Мы подробно рассматривали в разделе 3.2, как надо ориентировать кристаллы при их проектировании. Это, собственно, и есть правила установки. В табл. 5.1 для кристаллов разных сингоний показаны координатные системы с их угловыми и линейными параметрами. Рассмотрим их подробнее.

Триклинная сингония. Поскольку оси и плоскости симметрии отсутствуют, то координатные оси выбираются по трем непараллельным ребрам кристалла. В результате получаем косоугольную систему координат $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$. Отсюда и название триклинной сингонии – три косых (греч. *клинос*) координатных угла. Ребра, по которым проходят координатные оси, не связаны элементами симметрии, поэтому масштабы по осям не равны, $a \neq b \neq c$. Хотя эта координатная система самого общего вида, выбираем мы ее не вполне произвольно. За ось Z принимается ось наиболее развитой

зоны (см. раздел 3.5), т.е. направление, параллельное наибольшему числу граней или ребер. Оси X и Y выбираются по таким ребрам, чтобы углы между координатными осями были, по возможности, близки к 90°. Пример выбора координатных осей для кристалла триклинной сингонии приведен на рис. 5.2.

Моноклинная сингония. Имеется единственная ось симметрии второго порядка – простая или инверсионная (нормаль к плоскости симметрии). Принято выбирать эту ось за координатную ось Y (*минералогическая установка*). Оси X и Z берутся в плоскости, перпендикулярной оси Y, вдоль реальных или возможных ребер кристалла. При этом за ось Z принимается направление оси наиболее развитой зоны. Ось X выбирается так, чтобы ее положительный конец был наклонен к наблюдателю, т.е. чтобы угол β между положительными концами осей X и Z был тупым (рис. 5.3), но по возможности близким к 90°. Таким образом, углы между осями координат α=γ=90°, β>90°. Оси координат не связаны элементами симметрии, и масштабы по осям не равны: $a \neq b \neq c$.

Ромбическая сингония. Имеются три взаимно перпендикулярных оси второго порядка – простые или инверсионные, вдоль которых и выбираются координатные оси. Следовательно, координатные углы прямые, α=β=γ=90°. Такая координатная система называется *ортогональной* (греч. *ортос* – прямой). В планальном виде симметрии поворотная ось симметрии L_2 обязательно берется за ось Z (рис. 5.4а). В аксиальном и аксиально-центральном видах симметрии за ось Z принято выбирать ту L_2, которая параллельна оси наиболее развитой зоны (рис. 5.4б). Какую из оставшихся осей L_2 или L_{i2} взять за ось X, а какую за ось Y – безразлично (если исходить только из морфологии кристалла). Координатные оси не связаны элементами симметрии, и масштабы по осям не равны: $a \neq b \neq c$.

Тетрагональная сингония. Ось четвертого порядка, простая или инверсионная, принимают за координатную ось Z. За оси X и Y выбираются два взаимно перпендикулярных направления в плоскости, перпендикулярной оси Z. Таким образом, координатная система ортогональна, α=β=γ=90°. В качестве осей X, Y выбирают поворотные оси симметрии L_2 или перпендикуляры к продольным плоскостям симметрии (инверсионные оси L_{i2}). Если осей и плоскостей симметрии нет, горизонтальные координатные оси направляются по действительным или возможным взаимно перпендикулярным ребрам кристалла, лежащим в плоскости, перпендикулярной главной оси симметрии (рис. 5.5). Выбор горизонтальных координатных осей неоднозначен. При наличии $4L_2$ или $4m$ имеется две равноправные установки, различающиеся поворотом на 45° вокруг оси L_4. При отсутствии осей второго порядка или плоскостей симметрии вариантов выбора горизонтальных координатных осей может быть еще больше. При любом варианте оси X, Y связаны главной осью симметрии, т.е. симметрично равны. Соответственно, и масштабы по этим осям равны, но отличаются от масштаба по оси Z: $a=b \neq c$.

Кубическая сингония. Имеются три взаимно перпендикулярных оси симметрии – $3L_2$, $3L_{i4}$ или $3L_4$. Эти направления и принимаются за координатные оси, и, таким образом, координатные углы α=β=γ=90°, система ортогональна (рис. 5.6). Все три координатных оси связаны осями третьего порядка, т.е. симметрично равны, и, значит, равны масштабы по осям $a=b=c$. Координатная система кубической сингонии, единственная из всех кристаллографических координатных систем, является привычной Декартовой системой. Заметим, что хотя координатные системы ромбической и тетрагональной сингоний также ортогональны, они не Декартовы, так как масштабы по трем осям координат не равны.

Тригональная и гексагональная сингонии. Эти сингонии отличаются от всех остальных тем, что для них используется четырехосная координатная система. Ось Z направляется по главной оси. Горизонтальные координатные оси X и Y выбирают вдоль осей второго порядка или вдоль перпендикуляров к продольным плоскостям симметрии. Если осей второго порядка и плоскостей симметрии нет, горизонтальные оси координат направляют вдоль реальных или возможных ребер кристалла, лежащих в плоскости, перпендикулярной главной оси симметрии, под углом 120° друг к другу. Направления горизонтальных координатных осей X и Y являются симметрично-равными, так как

они связаны главной осью симметрии. Однако имеется и третье совершенно аналогичное и, значит, равноправное направление, симметрично-равное осям X и Y. Поэтому вводится еще одна горизонтальная ось W, и получаем четырехосную координатную систему (рис. 5.7). Угловые параметры координатной системы α=β=90°, γ=120°, масштабы равны по горизонтальным осям и отличаются от масштаба по оси Z, *a=b≠c*. Такая необычная координатная система используется не только по формальным соображениям равноправия трех эквивалентных горизонтальных осей. Главная причина – обеспечить выполнение во всех сингониях одинаковых соотношений между символами разных граней одной простой формы – мы рассмотрим это в разделе 5.9.

Прежде чем приступать к индицированию граней кристаллов, покажем, как с использованием кристаллографических координат можно компактно записать вид симметрии кристалла.

5.3. Международные обозначения видов симметрии (символика Германа-Могена).

В разделах 2.2 и 2.4 мы для обозначения вида симметрии использовали полный набор его элементов симметрии, записанных в определенном порядке – так называемую учебную формулу симметрии Браве. Такая запись, во-первых, громоздка, и во-вторых, избыточна, так как элементы симметрии не являются независимыми и связаны теоремами сложения. Для каждого вида симметрии можно обойтись определенным минимальным набором независимых (*порождающих*) элементов симметрии, по которым легко восстановить остальные элементы симметрии с помощью теорем сложения.

Прежде всего, введем обозначения для самих элементов симметрии, более компактные, чем обозначения Браве. Поворотные оси симметрии обозначаются арабскими цифрами, соответствующими порядку оси: L_1=1, L_2=2, L_3=3, L_4=4, L_6=6. Инверсионные оси обозначаются также арабскими цифрами, но с черточкой над цифрой, за исключением инверсионной оси второго порядка, для которой оставляют обозначение плоскости симметрии *m*: L_{i1}=C=$\bar{1}$, L_{i2}=*m*, L_{i3}=L_3+C=$\bar{3}$, L_{i4}=$\bar{4}$, L_{i6}=L_3+⊥*m*=$\bar{6}$.

Схема построения международного символа показана в табл.5.2. Символ состоит из трех позиций I, II, III. В каждой позиции записывают обозначение порождающего элемента симметрии, определенным образом ориентированного относительно координатных осей.

В низшей категории на позициях I, II, III записывают обозначения осей симметрии, параллельных координатным осям X, Y, Z соответственно.

В средней категории на позиции I записывают ось симметрии высшего порядка (параллельную оси Z). На позиции II помещают элементы симметрии, параллельные эквивалентным осям X,Y,(W). На позиции III записывают оси симметрии, параллельные диагональному (тетрагональная сингония) или апофемному (гексагональная сингония) направлениям, лежащим под углом α/2 к осям X, Y, (W), где α – элементарный угол поворота главной оси симметрии.

В высшей категории на позиции I записывают оси симметрии, параллельные эквивалентным координатным осям X,Y,Z. На второй позиции записывается цифра 3 или $\bar{3}$, что символизирует четыре оси третьего порядка, т.е. указывает именно на кубическую сингонию. На третьей позиции записывают оси симметрии, параллельные эквивалентным диагоналям между осями X,Y; X,Z; Y,Z.

Отметим еще некоторые особенности символики Германа-Могена:

а. Плоскостям симметрии отдается предпочтение перед осями симметрии. При этом, указывая на какой-либо позиции плоскость *m*, имеем в виду, что соответствующему направлению параллелен перпендикуляр к *m*, т.е. инверсионная ось второго порядка.

б. Если перпендикулярно простой оси симметрии имеется плоскость симметрии, такую комбинацию записывают в виде дроби: 2/*m*, 4/*m*, 6/*m* (комбинация 3/*m* соответствует L_{i3}=$\bar{3}$, которую и показывают в символе). Однако если ось симметрии в такой комбинации порождается другими элементами

симметрии, показанными в символе, то в записи оставляют только обозначение плоскости симметрии, а обозначение оси не записывают. Например, для вида симметрии $3L_23mC$ символ будет не $2/m2/m2/m$, а mmm, так как оси второго порядка порождаются пересечениями плоскостей симметрии. в. В тригональной сингонии направления, параллельные горизонтальным координатным осям, и апофемные направления эквивалентны. Поэтому третья позиция всегда будет пустая. Так, для L_33L_2 записываем 32, для L_33m – $3m$, хотя для соответствующих видов симметрии тетрагональной и гексагональной сингоний символы будут 422, 622, $4mm$, $6mm$.

Международные обозначения видов симметрии приведены в таблицах 2.1 и 4.2. Для лучшего усвоения в табл. 5.3 сведены обозначения видов симметрии в учебной символике Браве, в символике Германа-Могена , и их названия по общей форме и по генераторам (порождающим элементам симметрии).

5.4. Индексы граней Вейса и Миллера.

Теперь вернемся к основной задаче этой главы – как с помощью числовых символов задать положение граней кристалла в кристаллографической системе координат? Грань кристалла есть плоскость, которую можно задать ее уравнением. Для наших целей удобнее всего использовать *уравнение в отрезках* $x/A+y/B+z/C=1$, где A, B, C – отрезки, отсекаемые плоскостью на координатных осях (рис. 5.8). Эти отрезки называют также *параметрами грани*. При этом в соответствии с законом Стенона нам не важны абсолютные величины этих отрезков (линейные параметры), важны лишь наклоны граней к координатным осям (угловые параметры). Эти наклоны определяются *отношениями* отрезков по осям A:B:C, не меняющимися при переносе грани параллельно самой себе. Учтем теперь, что грани соответствуют плоским сеткам решетки, а координатные оси – узловым рядам этой решетки. Следовательно, грань пересекает оси координат не в произвольных точках, а в узлах решетки, отсекая на каждой оси целое число периодов идентичности по этой оси (или, по крайней мере, дробное, но *рациональное* число периодов идентичности, если узлы плоской сетки лежат вне соответствующего ряда) – рис. 5.8. Измеряя отрезки по осям A, B, C в осевых масштабах (периодах идентичности) A/a, B/b, C/c , и беря отношения этих величин, сокращенные до взаимно простых чисел, получим обязательно небольшие целые числа: $A/a : B/b : C/c = p:q:r$. Эти числа, называемые *индексы Вейса*, характеризуют наклоны грани к осям координат X, Y, Z, и, следовательно, могут использоваться для символьного описания положения грани кристалла в выбранной координатной системе. Однако у индексов Вейса есть очень неудобная особенность – для грани, параллельной какой-либо координатной оси, индекс Вейса по этой оси равен бесконечности. Это затрудняет любые расчеты с использованием индексов Вейса. Более удобны величины, обратные индексам Вейса (также сокращенные до взаимно простых чисел), - *индексы Миллера:* $1/p : 1/q : 1/r = a/A : b/B : c/C = h : k : l$. Для грани, параллельной какой-либо координатной оси, индекс Миллера по этой оси равен нулю: $1/\infty = 0$, т.е. числу, гораздо более удобному в расчетах, чем бесконечность.

Индексы Миллера, заключенные в круглые скобки, называются *символом грани (hkl)*. Знаки Место для формулы.отношений в этой записи опускаются, но подразумеваются. Если какой-либо из индексов отрицателен (грань пересекает ось координат с отрицательного конца), то знак минус ставится *над индексом:* $(h\bar{k}l)$, и это читается не «минус *k*», а «*k* с минусом».

5.5. Морфологическое индицирование граней. Закон Аюи.

В предыдущем разделе мы определили индексы Миллера грани кристалла исходя из структурных параметров – периодов идентичности по координатным осям. *Морфологическое индицирование* граней, без использования структурных параметров, основано на *законе Аюи* (или *Гаюи*) – одном из

основных законов геометрической кристаллографии. Этот закон звучит следующим образом: *двойные отношения отрезков, отсекаемых двумя непараллельными гранями кристалла на осях координат* (в оригинале: *на трех пересекающихся ребрах кристалла*), *равны отношениям целых небольших чисел.* Докажем этот закон, исходя из представлений о трехмерно-периодическом строении кристаллов. Рассмотрим две непараллельные грани кристалла, пересекающие координатные оси (или три пересекающихся ребра кристалла) по отрезкам A_1, B_1, C_1 и A_2, B_2, C_2 (рис. 5.9). Измеряя эти отрезки в осевых единицах (периодах идентичности) *a, b, c,* получим, как и раньше: $A_1/a : B_1/b : C_1/c = p_1 : q_1 : r_1$, и $A_2/a : B_2/b : C_2/c = p_2 : q_2 : r_2$. Возьмем теперь двойные отношения $p_1/p_2 : q_1/q_2 : r_1/r_2$. Поскольку p_1, q_1, r_1 и p_2, q_2, r_2 – целые числа, то и их двойные отношения также будут целыми числами (хотя одинарные отношения p_1/p_2, q_1/q_2, r_1/r_2 – не обязательно целые). Таким образом, закон Аюи доказан. Он носит еще названия «закон целых чисел» или «закон рациональности отношений параметров».

Чтобы использовать закон Аюи для морфологического индицирования граней кристалла, выберем параметры одной из граней, показанных на рис. 5.9, за единицы измерения по координатным осям: $A_1 \equiv a$, $B_1 \equiv b$, $C_1 \equiv c$. Тогда, в соответствии с результатами предыдущего раздела, имеем $a/A_2 : b/B_2 : c/C_2 = h_2 : k_2 : l_2$, т.е. получаем индексы Миллера второй грани рисунка 5.9. Далее, используя эти же масштабы, можем проиндицировать и все остальные грани данного кристалла. Грань, выбранная нами за масштабную, называется *единичной гранью*, поскольку она задает единицы измерения по координатным осям, и поскольку ее символ (111) содержит только единицы. Обращаем внимание, что в частных случаях некоторые из индексов могут быть отрицательными, например, $(1\bar{1}1)$ – это не влияет на «единичность» грани.

5.6. Выбор единиц измерения по координатным осям.

5.6.1. Единичная грань в кристаллах разных сингоний.

Масштабы по осям координат, а значит, и единичную грань, нельзя брать произвольно. Соотношения единиц измерения по координатным осям должны согласовываться с симметрией кристалла, как об этом говорилось в разделе 5.2. Общее правило для выбора единичной грани следующее: *единичная грань должна пересекать все три координатных оси в соответствии со степенью эквивалентности осей – т.е. отсекать равные отрезки на эквивалентных осях (совмещаемых элементами симметрии кристалла), и неравные отрезки на неэквивалентных осях (не совмещаемых элементами симметрии кристалла).*

Разберем это положение конкретно для кристаллов разных сингоний.

Кубическая сингония. Все три координатных оси эквивалентны (совмещаются осями третьего порядка). Поэтому единичная грань должна отсекать на них равные отрезки, т.е. быть равно наклонной к координатным осям. Такому требованию отвечают грани тетраэдра или октаэдра (в зависимости от вида симметрии кристалла). Эти грани и являются единичными гранями в кристаллах кубической сингонии, с символом (111). На стереограмме проекция единичной грани занимает строго определенное положение – на выходе оси третьего порядка (рис. 5.10а). На самом деле при индицировании граней кристалла кубической сингонии нет необходимости в единичной грани. На кристалле этих граней может и не быть, и это никак не

затрудняет индицирование. Действительно, так как единицы измерения по всем трем координатным осям одинаковы *a=b=c*, то индексы Миллера индицируемой грани просто равны отношению обратных величин отрезков A,B,C, отсекаемых гранью на координатных осях: *h*:*k*:*l* = *a*/A : *b*/B : *c*/C = 1/A : 1/B : 1/C.

Тетрагональная сингония. Горизонтальные координатные оси X и Y эквивалентны, и не эквивалентны третьей оси Z. Поэтому единичная грань должна отсекать равные отрезки по осям X и Y, и другой по величине отрезок по оси Z, т.е. *a=b≠c.* На стереограмме проекция единичной грани лежит на биссектрисе угла между осями X и Y, т.е. единичная грань равно наклонна к этим осям (рис. 5.10б). Однако наличие такой грани не обязательно. Достаточно, чтобы имелась грань, пересекающая только две неэквивалентных оси X и Z или Y и Z, так как масштабы по осям X и Y равны. Такие грани также можно рассматривать как единичные, поскольку они однозначно задают масштабы по осям, хотя и не все индексы в их символах – единицы. Символы этих граней, соответственно, (101) и (011).

Ромбическая, моноклинная, триклинная сингонии. Все три координатных оси неэквивалентны, и единичная грань должна отсекать на трех осях неравные отрезки, *a≠b≠c*. В принципе, любую грань, пересекающую все три координатных оси, можно выбрать за единичную. На стереограмме проекция единичной грани лежит в общем случае несимметрично относительно выходов координатных осей (рис. 5.10в,г).

Тригональная и гексагональная сингонии. Для этих сингоний координатная система – четырехосная. Три горизонтальных координатных оси X, Y, W эквивалентны, так как совмещаются главной осью симметрии. Четвертая координатная ось Z не эквивалентна горизонтальным осям. По дополнительной координатной оси W вводится четвертый индекс *i*, т.е. символы граней в этих сингониях *четырехчленные*, (*hkil*). Однако четвертый индекс *i* не является независимым. Легко показать, что *h+k=-i,* или *h+k+i*=0 (см. доказательство в учебниках по кристаллографии).

Единицы измерения по трем горизонтальным координатным осям X, Y, W должны быть одинаковы и отличны от масштаба по четвертой оси Z: *a=b=(d)≠c.* Однако понятно, что никакая плоскость не может отсекать равные отрезки по трем горизонтальным координатным осям. Поэтому единичную грань выбирают так, чтобы она отсекала одинаковые отрезки по любым двум из трех горизонтальных координатных осей – либо по X, Y, либо по X,W (или по Y, W, что равнозначно).

В первом случае (рис. 5.13) единичная грань отсекает на отрицательном конце оси W отрезок вдвое меньший, чем на осях X и Y. Соответственно, индекс по оси W будет вдвое больше, и символ единичной грани – (11$\bar{2}$1). Во втором варианте единичная грань параллельна одной из горизонтальных осей X или Y (рис. 5.13), индекс по этой оси равен нулю, и символ единичной грани – (10$\bar{1}$1) либо (01$\bar{1}$1). Положение проекций единичных граней на стереограмме показано на рис. 5.13.

Единичная грань на кристалле любой сингонии, кроме кубической, может быть выбрана по-разному (при достаточно богатой огранке кристалла). Так, для тетрагонального кристалла, изображенного на рис. 5.11, за единичную грань может быть выбрана как грань тетрагональной пирамиды 1, так и грань другой тетрагональной пирамиды 2. Понятно, что смена единичной грани ведет и к изменению символов остальных граней, так как меняются масштабные отрезки по осям координат.

5.6.2. Двуединичные грани.

В кристаллах низшей категории масштабы по трем координатным осям различны, $a \neq b \neq c$. Поэтому единичная грань, задающая эти масштабы, обязана пересекать все три оси координат. Однако такой грани на кристалле может не оказаться. В этом случае для задания единиц измерения по координатным осям используют *две грани*, каждая из которых пересекает две координатных оси и параллельна третьей оси (*разной* для этих двух граней) – рис. 5.14. Такие грани называются *двуединичными*. Они имеют индексы, равные единицам, по двум координатным осям, и индекс, равный нулю, по третьей оси. Нули стоят в символах двуединичных граней на *разных позициях*. Возможные символы двуединичных граней – (101) и (110), или (101) и (011), или (110) и (011), или аналогичные комбинации с некоторыми отрицательными индексами.

Рассмотрим, как определить единицы измерения по координатным осям, используя двуединичные грани. Пусть первая из этих граней отсекает на осях X и Y отрезки A_1 и B_1. Эти отрезки и примем за единицы измерения по осям X и Y, $A_1=a$, $B_1=b$. Пусть вторая грань пересекает оси Y и Z, отсекая на них отрезки B_2 и C_2. Отрезок B_2 в общем случае не равен отрезку B_1, т.е. зафиксированной единице измерения по оси Y. Мысленно перенесем вторую грань параллельно самой себе так, чтобы она отсекла на оси Y отрезок $B_2'=B_1=b$ (наклон грани 2 к координатным осям при этом не изменится). Теперь грань 2 отсекает на оси Z отрезок $C_2' \neq C_2$. Этот новый отрезок и примем за единицу измерения по оси Z, $C_2'=c$.

Как и в случае единичной грани, пары двуединичных граней могут быть выбраны на кристалле по-разному – см. например рис. 5.15. При изменении выбора двуединичных граней будут, как правило, меняться и символы остальных граней кристалла.

5.7. Определение символов граней.

Выбрав единичную грань или две двуединичные грани, т.е. задав масштабы по координатным осям, можем теперь приступить к индицированию остальных граней кристалла. Для этого: а) продляем мысленно индицируемую грань до ее пересечения с координатными осями; б) определяем величины отрезков A, B, C, которые она отсекает на осях; в) измеряем эти отрезки в осевых единицах (масштабах), разделив их величины на масштабы A/*a*, B/*b*, C/*c*; г) берем отношения обратных величин *a*/A : *b*/B : *c*/C; д) приводим к общему знаменателю и сокращаем до взаимно простых чисел *h*:*k*:*l*; е) записываем полученные числа в круглых скобках с учетом их знаков (*hkl*).

Разберем несколько примеров.

Кубическая сингония. На рис. 5.16 изображен кристалл граната в форме тетрагонтриоктаэдра. Единичная грань октаэдра отсутствует, но она в данном случае и не нужна, так как масштабы по координатным осям одинаковы. Достаточно измерить отрезки, отсекаемые индицируемыми гранями на координатных осях. *Грань, помеченная цифрой 1*, отсекает одинаковые отрезки на осях X и Y, и вдвое меньший отрезок на оси Z. Параметры грани 1, 1, ½. Беря отношения обратных величин, получаем 1 : 1 : 2, откуда символ грани (112*). Грань 2* отсекает одинаковые отрезки на осях Y и Z, при этом ось Y грань пересекает с отрицательного

конца. По оси X эта грань отсекает вдвое меньший отрезок. Параметры грани ½, -1, 1, отношение обратных величин 2 : -1 : 1, и символ (2$\bar{1}$1). Аналогично получим и символы всех остальных граней тетрагонтриоктаэдра, подписанные около их проекций на стереограмме.

Тетрагональная сингония. На рис. 5.17 показан кристалл, ограненный тремя тетрагональными пирамидами 1, 2, 3, тетрагональной призмой 4 и моноэдром 5. Горизонтальные оси координат выбраны по перпендикулярам к плоскостям симметрии, проходящим через ребра призмы. За единичную грань можно взять грань любой из трех пирамид. Однако предпочтительно иметь близкие по величине масштабы по неэквивалентным осям X (Y) и Z. Этому условию отвечает *грань 1*, отсекающая по осям X, Y равные отрезки A_1= B_1 и близкий по величине отрезок C_1 по оси Z. Это и будут единицы измерения по координатным осям A_1=B_1=*a(=b),* C_1=*c*. Символ грани (111).

Теперь проиндицируем *грань 2*. Перенесем ее мысленно параллельно самой себе так, чтобы она отсекала на осях X, Y отрезки A_1=B_1, т.е. единицы. По оси Z грань 2 при этом отсечет отрезок C_2, вдвое больший, чем отрезок C_1=*c.* Параметры грани 2 будут 1, 1, 2, отношения обратных величин 1 : 1 : 1/2 , или 2 : 2 : 1, и символ грани 2 равен (221).

Поступим аналогично с *гранью 3*. Пусть после параллельного грани переноса в точки A_1, B_1 на осях X, Y она отсечет на оси Z отрезок C_3= -5/2C_1. Тогда обратные отношения параметров грани будут 1 : 1 : -2/5, и символ этой грани (55$\bar{2}$). Если на глаз трудно определить, во сколько раз отрезок C_3 больше, чем C_1, можно записать символ грани в общем виде (*hhl*), указав, что *h>l*.

Возьмем теперь *грань призмы 4*. Она параллельна оси Z, т.е. ее параметр по этой оси равен бесконечности. По осям X и Y грань отсекает равные отрезки A_4=B_4. Абсолютная величина этих отрезков не имеет значения, поскольку масштабы по осям X и Y одинаковы, *a=b,* и A_4/*a* : B_4/*b* = 1:1. Итак, параметры грани 4 будут 1, 1, ∞, отношения обратных величин 1:1:0, и символ грани (110).

Наконец, возьмем *грань моноэдра 5*. Она параллельна осям X и Y, и параметры по этим осям ∞ и ∞. Параметр по оси Z равен C_5/C_1=C_5/*c*. Во сколько раз C_5 больше или меньше C_1=*c*, не имеет значения. Действительно, взяв обратные отношения параметров, получим 1/∞ : 1/∞: *c*/C_5 = 0:0:1, так как сокращаем индексы до взаимно простых чисел. Символ грани 5, таким образом, равен (001).

Моноклинная сингония. На рис. 5.18 изображен кристалл реальгара AsS, вида симметрии 2/*m,* ограненный пинакоидами 1, 2, и ромбическими призмами 3, 4, 5, 6. Установка моноклинных кристаллов, как говорилось, неоднозначна – жестко закреплена лишь ось координат Y‖L_2. Ось Z выбираем параллельно оси наиболее развитой зоны (грани призм 3, 4 и пинакоида 1). Ось X направляем вдоль перпендикулярной L_2 оси зоны, сложенной гранями 2, 5, 1. Эта ось наклонена на наблюдателя.

Единственная простая форма, грани которой пересекают все три координатные оси – ромбическая призма 6. *Грань 6* мы и выберем в качестве единичной грани. Поскольку ось Z эта грань пересекает с отрицательного конца, символ грани 6 – (11$\bar{1}$). Хотя все индексы – единицы, масштабы по трем координатным осям не равны, A_1=*a* ≠ B_1=*b* ≠ C_1=*c.* Проиндицируем с этими масштабами остальные грани.

Грань 1 пересекает только одну координатную ось Y, и параллельна осям X и Z. Мы уже видели, что для такой грани символ состоит из двух нулей и единицы (грань 5 на кристалле

рис. 5.17). В данном случае единице равен индекс *k*, так как грань 1 пересекает ось Y. Символ грани 1 – (010).

Грань 2 также пересекает только одну координатную ось Z. Ее символ будет (001). Обращаем внимание, что в косоугольных сингониях грань (001) проектируется не в центр круга проекций, поскольку ось X не перпендикулярна оси Z, и соответственно, грань (001) не перпендикулярна оси Z.

Грань 3 отсекает по осям X и Y такие же отрезки, как и грань 6, и параллельна оси Z, т.е. параметры грани 1, 1, ∞, и символ (110).

Грань 4 перенесем параллельно самой себе в точку A_1 на оси X . Тогда на оси Y она будет отсекать отрезок, равный удвоенному отрезку B_1. Оси Z грань 4 параллельна. Таким образом, параметры грани 1, 2, ∞. Отношения обратных величин 1 : ½ : 0, или, после приведения к общему знаменателю, 2 : 1 : 0, и символ грани 4 равен (210).

Грань 5 параллельна оси X, т.е. индекс *h* равен нулю. Перенесем грань 5 параллельно самой себе так, чтобы она пересекала ось Y в точке B_1. Тогда ось Z она будет пересекать в точке $C_5=C_1$, т.е. отсекать единичный отрезок. Индексы *k* и *l* , следовательно, равны единицам. Символ грани 5 будет (011).

Если бы на кристалле рис. 5.18 отсутствовала ромбическая призма 6 с единичной гранью, можно было бы воспользоваться для выбора единиц измерения по осям *двуединичными гранями 4 и 5* с символами (110) и (011) соответственно. Символы остальных граней при этом не изменились бы. В качестве двуединичных граней можно было бы также взять *грани 3 и 5*, и тогда у грани 3 символ был бы (110). Грань 4 изменила бы свой символ на (120). Действительно, перенесем грань 4 параллельно самой себе в точку $A_3=a$, по которой грань 3 пересекает ось X. Тогда на оси Y грань 4 отсекает отрезок B_4, вдвое меньший единичного отрезка$B_3=b$, ее параметр по этой оси 1/2, и индекс 2.

Тригональная сингония. На рис. 5.19 показан кристалл кварца, вид симметрии $L_33L_2=32$. Кристалл огранен стандартным для кварца набором простых форм – большим и малым ромбоэдрами 1 и 2, тригональной дипирамидой 3, гексагональной призмой 4 и тригональным трапецоэдром 5. Горизонтальные координатные оси X, Y, W направляем вдоль осей второго порядка.

За *единичную* грань выберем *грань 1* большого ромбоэдра, отсекающую на координатных осях X и –W равные отрезки $A_1=D_1=a$ и параллельную оси Y. На оси Z грань 1 отекает отрезок $C_1=c$. В соответствии с разделом 5.6 символ этой грани (10$\bar{1}$1).

Грань 2 малого ромбоэдра отсекает равные отрезки на координатных осях Y и –W, параллельна оси X, и на оси Z отсекает такой же отрезок C_1, как и грань 1. Символ грани 2 будет (01$\bar{1}$1), т.е. ее также можно рассматривать как единичную грань, эквивалентную грани 1 (но обращаем внимание, что это грани *разных* простых форм, хотя и одного наименования).

Грань 3 тригональной дипирамиды отсекает на координатных осях X и Y равные отрезки $A_3=B_3$; на оси –W она отсекает вдвое меньший отрезок, $-D_3=A_3/2$. При этом отрезок D_3 примерно равен отрезку D_1, который отсекает на этой оси грань 1, т.е. $D_3=D_1=a$. Тогда $A_3=B_3=2D_3=2a$. Параметры грани 3 по горизонтальным осям будут, следовательно, 2, 2, -1. Отрезок C_3, отсекаемый гранью 3 на оси Z, вдвое больше отрезка C_1, т.е. $C_3=2C_1=2c$, и параметр грани 3 по этой оси также будет 2. Беря обратные отношения параметров, 1/2 : 1/2 : -1 : 1/2

или 1:1:-2:1, получаем символ грани 3 равным (11$\bar{2}$1). В соответствии с разделом 5.6 это также единичная грань, выбранная по второму из рассмотренных в этом разделе вариантов.

Грань 4 гексагональной призмы отсекает на эквивалентных осях X и –W равные отрезки, и параллельна координатным осям Y и Z. Символ содержит две единицы и два нуля, (10$\bar{1}$0).

Грань 5 тригонального трапецоэдра занимает общее положение, отсекая на координатных осях неравное число единичных отрезков. Точно измерить параметры грани в единицах A_1=*a* и C_1=*c* затруднительно, и символ грани рационально записать в общем виде (*hk*$\bar{i}$*l*), указав соотношения между индексами. Самый короткий отрезок грань 5 отсекает на оси –W, следующий по величине – на оси X. Отрезок, отсекаемый гранью на оси Y, значительно больше, равно как и отрезок, отсекаемый на оси Z (масштаб по оси Z, C_1=*c,* близок к масштабам по горизонтальным осям A_1=*a*). Поскольку индексы Миллера обратны параметрам грани, то соотношения индексов будут *-i>h>>k≈l.* Далее мы покажем, как в таких случаях можно определить индексы существенно точнее, или даже абсолютно точно (раздел 5.10).

5.8. Типы символов граней

На рассмотренных примерах видно, как характер символа грани зависит от ее положения относительно осей координатной системы, связанной с кристаллом. Дадим краткую сводку возможных типов символов граней кристаллов.

1. Грань пересекает одну координатную ось и параллельна двум другим осям. Символ грани состоит из единицы (по пересекаемой оси) и двух нулей: (100), ($\bar{1}$00), (010), (0$\bar{1}$0), (001), (00$\bar{1}$). Такие грани называются *координатными* – первой, второй или третьей координатной, в зависимости от того, какую координатную ось пересекает грань (на каком месте в символе стоит единица).

2. Грань параллельна одной из координатных осей. Индекс по этой оси равен нулю, и символ грани – (*0kl*), (*h0l*), (*hk0*), с положительными или отрицательными значениями ненулевых индексов.

3. Грань параллельна одной из координатных осей, а на двух других осях отсекает одинаковое число масштабных отрезков. Символ грани состоит из двух единиц и нуля: (110), (101), (011) и аналогичные символы с минусами над одной или двумя единицами: ($\bar{1}$10), (0$\bar{1}\bar{1}$) и т.п. Обращаем внимание, что абсолютные значения отсекаемых на осях отрезков могут быть неравными, если оси не эквивалентны.

4. Грань пересекает три координатных оси, и на двух из них отсекает одинаковое число масштабных отрезков. Индексы по этим двум осям одинаковы: (*hhl*), (*hkh*), (*hkk*) и т.п.

5. Грань пересекает три координатных оси, и на всех осях отсекает одинаковое число масштабных отрезков. Это единичная грань (111). Абсолютные величины отсекаемых отрезков при этом равны только для эквивалентных осей.

6. Грань пересекает три координатных оси, отсекая на них разное число масштабных отрезков. Это грань общего положения с символом общего вида (*hkl*), *h≠k≠l*.

7. Индексы двух параллельных граней равны по абсолютной величине, но противоположны по знакам.

Еще раз напомним, что индексы в символе грани отражают наклоны грани к координатным осям *относительно наклонов единичной грани*. Перенос грани параллельно самой себе не

изменяет ее наклонов к координатным осям и, соответственно, не меняет символа грани. Мы постоянно пользовались такими переносами грани при ее индицировании (раздел 5.7). Отсюда следует, что у кристаллов одного и того же вещества (и при одинаковой установке!) *символы соответственных граней одинаковы*.

Для данного кристалла, при данной его установке, и при данном выборе единичной грани, индекс в символе грани тем больше, чем круче грань наклонена к соответствующей координатной оси (меньше отсекаемый на оси отрезок).

5.9. Символы простых форм

Для разных граней одной простой формы численный набор индексов в их символах один и тот же. Символы разных граней различаются либо порядком и знаками индексов, либо только их знаками. В качестве примера на рис. 5.16б дана стереограмма простой формы тетрагонтриоктаэдра, и у проекции каждой грани подписан ее символ – видно, что все эти символы состоят из двойки и двух единиц, записанных в разном порядке и с разными знаками.

Именно для того, чтобы данное правило соблюдалось для всех сингоний, и используются четырехиндексные символы в тригональной и гексагональной сингониях. Рассмотрим, например, символы граней гексагональной призмы, перпендикулярных координатным осям X, Y, W (рис. 5.20). В четырехиндексной системе символы всех граней состоят из двух единиц и двойки по горизонтальным осям и нуля по вертикальной оси, т.е. численный набор индексов одинаков для всех граней данной простой формы. Для разных граней меняются только порядок первых трех индексов и их знаки. Теперь уберем из символов дополнительные индексы *i*. Тогда символы некоторых граней будут состоять из двух единиц и нуля, а других граней – из единицы, двойки и нуля (рис. 5.20). Таким образом, в трехиндексной системе общее правило для символов граней одной простой формы не соблюдается.

Обращаем внимание, что это правило справедливо именно и только в прямой формулировке – т.е. символы граней одной простой формы имеют одинаковый численный набор индексов. Обратное не верно. Одинаковый численный набор индексов вовсе не говорит, что мы имеем дело с гранями одной простой формы. Так, в примитивном виде симметрии кубической сингонии грани (111) и ($\bar{1}$11)принадлежат двум разным тетраэдрам. В тетрагональной сингонии грани (100) и (001) – это грани тетрагональной призмы и пинакоида или моноэдра, и т.п. Вопрос о принадлежности грани к одной простой форме решается не по символам граней, а по тому, связаны эти грани элементами симметрии или нет.

В качестве символа простой формы используют символ одной из ее граней с максимальным числом положительных индексов, заключенный в фигурные скобки. Так, символ тетрагонтриоктаэдра (рис. 5.16) будет {112}, символ гексагональной призмы (рис. 5.20) равен {11$\bar{2}$0}. Символы всех простых форм для 32-х видов симметрии представлены в таблице 4.2 – во многих случаях в общем виде, без численных значений индексов. По символам мы можем различить одноименные простые формы с разным наклоном граней относительно координатных осей – например, два тетрагонтриоктаэдра {112} и {223}.

5.10. Индицирование граней с использованием закона зон Вейса.

5.10.1. Закон зон Вейса. Вывод возможных граней кристалла методом развития зон.

Морфологическое индицирование граней кристаллов существенно облегчается при использовании закона зон. В разделе 3.5 мы ввели понятие зоны, оказавшееся очень полезным при проектировании граней кристаллов. Напомним, что *зоной* называется комплекс граней, пересекающихся в параллельных ребрах (т.е. параллельных одному направлению). На стереограмме грани одной зоны лежат на одной дуге большого круга (дуге, опирающейся на диаметр круга проекций) – см. рис.3.5. Если грань принадлежит одновременно двум зонам, ее проекция лежит на пересечении дуг большого круга – проекций этих зон. Это является следствием одного из фундаментальных законов геометрической кристаллографии – *закона зон (поясов) Вейса*: *плоскость, параллельная двум пересекающимся ребрам кристалла, представляет собой возможную грань кристалла, а прямая, параллельная линии пересечения двух граней кристалла, является его возможным ребром.*

На основе закона зон можно графически на стереограмме вывести возможные грани кристалла и затем проиндицировать полученные грани. Такой способ вывода граней кристалла носит название *метод развития зон*. В качестве исходных обычно используют три пары координатных граней и единичную грань (хотя можно взять любые четыре грани, лежащие попарно в трех пересекающихся зонах). Обращаем внимание, что фактическое наличие координатных граней на кристалле не обязательно. Если выполнена установка кристалла (выбраны координатные оси), то положение на стереограмме, которое должны занимать проекции координатных граней, определяется однозначно – по параллельности каждой из координатных граней двум координатным осям (см. рис. 5.21).

Для демонстрации метода развития зон рассмотрим стереограмму ромбического кристалла, на которой нанесены проекции координатных граней и единичной грани (рис. 5.22).

1. Проведем зоны (дуги большого круга) через координатные грани (100) – (010), (100) – (001), (010) – (001) – рис. 5.22а.

2. Проведем зоны через единичную грань и координатные грани (111) – (100), (111) – (010), (111) – (001). Пересечение зон типа 2 с зонами типа 1 даст, в соответствии с законом зон, три новые возможные грани 1, 2, 3 – рис. 5.22б.

3. Проведем зоны через эти новые грани 1 - 2, 1 – 3, 2 – 3, и получим еще три грани 4, 5, 6 – рис. 5.22в.

4. Проводя далее зоны через прежние и вновь получаемые грани, можем вывести бесконечное количество возможных граней кристалла.

Теперь встает вопрос, какие из этого множества возможных граней могут реально появляться на кристалле. Ответ дает рассмотренный в разделе 4.8 *закон Браве*. Переформулированный с точки зрения символьной характеристики граней, закон Браве гласит, что *кристалл ограняется гранями с малыми значениями индексов Миллера* (именно такие грани имеют наиболее высокие ретикулярные плотности). «Малыми» являются значения индексов в пределах 0 – 5, редко до 10. Таким образом, проиндицировав полученные путем развития зон

грани, мы можем отобрать те из них, появление которых в огранке кристалла наиболее вероятно.

Перейдем теперь собственно к определению символов граней.

5.10.2. Зональные изменения индексов Миллера

Качественно (на уровне «больше-меньше») индексы грани в ее символе можно определять по положению проекции грани на стереограмме, используя закономерности зональных вариаций индексов Миллера. В качестве реперных при этом выступают координатные грани (100), (010), (001) и единичная грань (111).

Рассмотрим зону, проходящую через пару параллельных координатных граней кристалла, например, (100) и ($\bar{1}$00) – рис. 5.23а. Все грани этой зоны параллельны одному направлению (оси зоны), выход которого на стереограмме показан квадратиком. Следовательно, все грани этой зоны пересекают координатную плоскость YZ по параллельным прямым. Поэтому отношение отрезков, отсекаемых всеми этими гранями на координатных осях Y и Z, т.е. отношение параметров граней B_i/C_i, одно и то же. Значит, постоянно и отношение индексов граней по осям Y и Z, $k : l = const$. В серии зон, проходящих через первые координатные грани, отношение $k : l$ растет в направлении выхода оси Y на стереограмме, и падает в направлении выхода оси Z (рис. 5.23а). В зоне этой серии, проходящей через единичную грань, индексы k и l равны (но не обязательно единицы!), и общий вид символа – (hkk). Значение h граней в зонах этой серии растет по мере смещения проекции грани вдоль зоны к выходу оси X, и падает к проекции плоскости YZ. На пересечениях этих зон с проекцией плоскости YZ индексы h=0 (символы граней – (0kl)). При дальнейшем смещении вдоль зон к отрицательному концу оси X значения h становятся отрицательными, возрастая по абсолютной величине.

Аналогично в зонах, проходящих через координатные грани (010) и (0$\bar{1}$0, постоянны отношения индексов $h : l$, а в зонах, проходящих через (001) и (00$\bar{1}$),постоянны отношения $h : k$. Изменения значений индексов вдоль этих зон и от зоны к зоне показаны на рис. 5.23б и 5.23в соответственно.

Рассмотренные закономерности зонального изменения индексов в символах граней позволяют по положению проекции грани на стереограмме легко оценить соотношения индексов (что больше чего). На рис. 5.24 приведена стереограмма моноклинного кристалла, на которой нанесены проекции координатных граней и единичной грани. Для общности нанесены также проекции двуединичных граней, соответствующие данной единичной грани. Зачерненным кружком показана проекция индицируемой грани с символом общего вида (hkl). Проведем зоны (большие круги) через эту грань и три пары координатных граней. По положению зоны (100) – (hkl) – ($\bar{1}$00) относительно единичной грани видим, что $k>l$. По положению зоны (010) – (hkl) – (0$\bar{1}$0) заключаем, что $h<l$. Наконец, по положению зоны (001) – (hkl) – (00$\bar{1}$) относительно единичной грани находим, что $h<k$. Обобщая эти результаты, получаем соотношение индексов для символа данной грани: $h<l<k$.

5.10.3. Закон компликаций Гольдшмидта. Метод сложения символов.

Используя закон зон, можно достаточно точно определить и численные значения индексов в символе грани. Воспользуемся для этого *законом компликаций* (лат. *компликатио* – усложнение), который предложил Ф.Гольдшмидт в развитие закона зон Вейса. Согласно закону компликаций, в пределах данной зоны между лежащими в ней основными гранями появляются *компликационные* грани, притупляющие ребра основных граней. Символ компликационной грани равен сумме символов основных граней, между которыми компликационная грань находится. Соответственно, способ определения символов таких «усложняющих» граней получил название *метод сложения символов*. Например, единичную грань можно рассматривать как компликационную для координатной грани и двуединичной грани (рис. 5.25), (100) + (011) = (111) или (001) + (110) = (111).Таким способом мы можем найти положение отсутствующей на кристалле единичной грани по координатным и двуединичным граням.

В более общем виде этот метод можно сформулировать следующим образом: *символ грани, лежащей между двумя другими гранями в одной с ними зоне, есть линейная комбинация символов этих двух граней.* Если символы исходных граней обозначить как $(hkl)_1$ и $(hkl)_2$, то символ компликационной грани $(hkl)_3 = m(hkl)_1 + n(hkl)$, где коэффициенты m и n – небольшие целые числа. Один из коэффициентов может быть и отрицательным. Соотношение коэффициентов m/n прямо зависит от того, к какой из исходных граней ближе наклонена промежуточная грань (ближе лежит на стереограмме). Значения m и n подбирают «на глазок», поэтому индексы, определенные по граням *одной* зоны, не точны. Однако если индицируемая грань лежит на пересечении *двух* зон, и в каждой из них располагается между двумя гранями с известными символами, то индицирование выполняется точно – подбором таких значений m и n в каждой из двух зон, которые дадут одинаковый результат. Метод сложения символов рационально сочетать с методом развития зон для получения удобно расположенных граней, которые можно использовать в качестве «слагаемых».

Рассмотрим применение метода сложения символов на примере кристалла циркона, аксиально-центральный вид симметрии тетрагональной сингонии (рис. 5.26). Кристалл огранен двумя тетрагональными призмами 1 и 2, тетрагональной дипирамидой 3 и дитетрагональной дипирамидой 4. Горизонтальные координатные оси X, Y выбраны перпендикулярно граням призмы 1. Символ грани 1 – (100), грани 2 – (110). Грань 3 естественно взять за единичную, (111). Определим символ грани общего положения 4. Грань 4 лежит в зонах (100) – (111) и (110) – (1$\bar{1}$1). Попробуем найти символ грани 4 простым сложением (т.е. с единичными коэффициентами при слагаемых). Складывая (100) и (111), получим (211). Складывая (110) и (1$\bar{1}$1) получим (101). Значения символов не совпадают, значит, единичные коэффициенты не годятся. Удвоим в первой сумме символ (100), а во второй сумме удвоим символ (110). Получаем в первой сумме (200) + (111) = (311), во второй сумме – (220) + (1$\bar{1}$1) = (311). Символы совпали, таким образом, символ грани 4 - -(311). В данном случае мы обошлись без развития зон, но пришлось заниматься подбором коэффициентов из-за не очень удачного расположения исходных граней.

Если, напротив, воспользоваться развитием зон, можно обойтись без подбора коэффициентов, простым сложением символов. Зона (1$\bar{1}$1) – (110) пересекается с зоной (100)

– (001) (третья координатная грань на кристалле отсутствует, но ее положение известно – на выходе оси симметрии L_4). На пересечении этих зон возникает возможная грань 5 с символом (1$\bar{1}$1) + (110) = (201). Грань 4 лежит в зоне (201) – (110). Складывая эти символы, получаем (201) + (110) = (311). Проверим правильность определения символа. Зона (311) - (3$\bar{1}$1) на пересечении с зоной (100) – (201) порождает возможную грань 6 с символом (311) + (3$\bar{1}$1) = (602) = (301), или же (100) + (201) = (301). Полученное совпадение доказывает правильность символа (311) для грани 4.

Как правило, метод сложения символов позволяет точно проиндицировать нужную грань. Однако не всегда это удается сделать достаточно быстро. Может понадобиться предварительно вывести развитием зон и проиндицировать значительное количество промежуточных граней. В таких случаях более рационально использовать еще один метод, основанный на законе зон – *метод перекрестного умножения символов.* Этот метод позволяет по символам двух пересекающихся зон вычислить символ грани, лежащей на их пересечении. Но для этого сначала нам надо определить, что такое символ зоны и как его найти.

5.10.4. Символы направлений (зон). Уравнение Вейса.

Зона характеризуется своей осью, т.е. направлением, которому параллельны все грани зоны. Положение направления в координатной системе кристалла однозначно определяется наклонами направления к координатным осям. Перенесем рассматриваемое направление параллельно самому себе так, чтобы оно прошло через начало координат (рис. 5.27). Возьмем произвольную точку на этом направлении, и определим координаты этой точки *x, y, z.* Отношение координат (измеренных в единичных отрезках), сокращенное до взаимно простых чисел, и даст символ направления: $x/a : y/b : z/c = r : s : t$. Символ направления записывается в квадратных скобках: [*rst*]. Как видим, в символе направления, в отличие от символа грани, используются индексы Вейса. Поскольку индекс ∞ в данном случае не возникает, то переходить к индексам Миллера нет необходимости.

Между символом грани (*hkl*) и символом параллельного этой грани направления [*rst*] (или символом оси зоны, в которой лежит эта грань) существует взаимосвязь, выражаемая *уравнением Вейса*: $hr + ks + lt = 0$. Для гексагональной и тригональной сингоний , с четырехиндексными символами граней, уравнение Вейса записывается несколько по-другому: $(h-i)r + (k-i)s + lt = 0$. Числа в скобках называются *субиндексами*.

5.10.5. Индицирование граней методом перекрестного умножения.

Чтобы получить символ грани, находящейся на пересечении двух зон, нужно знать символы этих зон. Пусть эти символы будут [$r_1s_1t_1$] и [$r_2s_2t_2$]. Искомый символ грани - (*hkl*). Поскольку грань лежит одновременно в двух зонах, мы можем записать систему из двух уравнений Вейса, связывающих символы грани и каждой из двух зон:

$$hr_1 + ks_1 + lt_1 = 0$$
$$hr_2 + kl_2 + lt_2 = 0$$

Поскольку число уравнений (два) меньше числа неизвестных (три), эта система неопределенна и имеет бесконечное множество решений вида:

$$h = \begin{vmatrix} s_1 & t_1 \\ s_2 & t_2 \end{vmatrix} W = D_1 W,\ k = \begin{vmatrix} t_1 & r_1 \\ t_2 & r_2 \end{vmatrix} W = D_2 W,\ l = \begin{vmatrix} r_1 & s_1 \\ r_2 & s_2 \end{vmatrix} W = D_3 W,$$

где D_1, D_2, D_3 – определители, составленные из коэффициентов уравнений (т.е. индексов в символах зон), а W – произвольная постоянная. Поскольку нам нужны *отношения* индексов $h : k : l$, то произвольная постоянная в этих отношениях сокращается, и мы получаем $h : k : l = D_1 : D_2 : D_3$. Раскрывая определители, имеем:

$$h : k : l = (s_1 t_2 - s_2 t_1) : (t_1 r_2 - t_2 r_1) : (r_1 s_2 - r_2 s_1).$$

Чтобы не ошибиться в вычислениях, используют мнемоническое правило, которое и называется *перекрестным умножением.* Выписывают два раза в строчку индексы первой зоны, под ними так же индексы второй зоны. Затем отбрасывают первый и последний столбцы, а оставшиеся индексы перемножают перекрестно, верхние на нижние, как показано косыми черточками, начиная слева. Отношения разностей перекрестных произведений, сокращенные до взаимно простых чисел, и дают искомый символ грани

$$\begin{array}{cccccc} r_1 & s_1 & t_1 & r_1 & s_1 & t_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 & r_2 & s_2 & t_2 \end{array}$$

$$(s_1 t_2 - s_2 t_1) : (t_1 r_2 - t_2 r_1) : (r_1 s_2 - r_2 s_1) = h : k : l,$$

т.е. получили то же, что и при непосредственном раскрытии определителей.

В свою очередь, символ каждой из зон, по которым мы определяли символ грани, лежащей на их пересечении, можем получить перекрестным умножением символов двух граней, лежащих в соответствующей зоне. Итак, для нахождения неизвестного символа грани надо знать символы четырех других граней, лежащих попарно в двух пересекающихся на искомой грани зонах. Метод перекрестного умножения при этом придется применить три раза: 1) по символам двух граней определить символ одной из зон; 2) по символам двух других граней найти символ второй зоны; 3) по найденным символам двух зон определить символ грани, лежащей на их пересечении.

Заметим, что в результате перекрестного умножения мы можем получить как символ искомой грани, так и символ грани, ей параллельной, т.е. с противоположными знаками индексов. Это зависит от порядка записи исходных символов зон – какой символ записывается сверху, какой – снизу. Точно так же при определении символа зоны получаем символы двух противоположных направлений, параллельных оси зоны, в зависимости от порядка записи исходных символов граней. Специально за этим можно не следить, так как всегда легко сообразить по знакам индексов, получили мы символ нужной грани, или же грани, ей параллельной.

Полезно помнить, что если ось зоны параллельна какой-либо координатной грани – (100), (010), (001), - то в символе зоны соответственно первый, второй или третий индекс равен нулю. Если направление параллельно двум координатным граням (т.е. ребру между ними), то два соответствующих индекса равны нулю, а третий – единице. Эти три направления [100], [010], [001] являются координатными осями X, Y, Z. В ряде случаев символ направления, перпендикулярного определенной грани, совпадает с символом этой грани: 1) в кубической сингонии – для всех граней; 2) в средних сингониях – для всех граней вертикальной зоны [001]

и для граней (001) и (00$\bar{1}$); 3) в ромбической сингонии – для координатных граней; 4) в моноклинной сингонии – для граней (010) и (0$\bar{1}$0).

Покажем действие метода перекрестного умножения на примере кубического кристалла нашатыря NH_4Cl – рис. 5.28. Кристалл огранен тетрагонтриоктаэдром {211} и общей формой – пентагонтриоктаэдром {*hkl*}. Определим численное значение символа грани 2 пентагонтриоктаэдра. Эта грань лежит на пересечении зон (100) – (121) и (110) – (101). Получим сначала символы этих двух зон, а затем по символам зон – искомый символ грани 2:

$$\begin{array}{cccccc|c} 1 & 2 & 1 & 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array} \qquad \begin{array}{cccccc|c} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{cccccc|c} 0 & 1 & \bar{2} & 0 & 1 & \bar{2} \\ 1 & \bar{1} & \bar{1} & 1 & \bar{1} & \bar{1} \end{array}$$

[01$\bar{2}$] [1$\bar{1}$1] ($\bar{3}\bar{2}\bar{1}$) = (321)

Как и в методе сложения символов, если подходящих зон на кристалле не найдется, их можно получить методом развития зон.

Теперь посмотрим, как пользоваться перекрестным умножением в случае кристаллов гексагональной и тригональной сингоний, с четырехиндексными символами граней. Как говорилось выше, в уравнении Вейса в этих случаях вместо индексов *h* и *k* используют субиндексы (*h* – *i*) и (*k* – *i*). Символ зоны после перекрестного умножения получается трехиндексным, и дополнительный индекс находим как сумму первых двух индексов с обратным знаком. Аналогично поступаем при вычислении символа грани по четырехиндексным символам двух зон. Однако если символы зон как таковые нам не нужны, можно использовать более простую процедуру, без вычисления субиндексов.

Для каждой зоны подвергнем перекрестному умножению символы лежащих в ней двух граней, опустив в этих символах третьи индексы *i*. Полученные в результате трехчленные числа *не являются символами зон!* Подвергнув теперь эти числа перекрестному умножению, получим трехиндексный символ грани, лежащей на пересечении зон. Дополнительный индекс *i* найдем как сумму первых двух индексов с обратным знаком.

В качестве примера определим символ грани 1 тригонального трапецоэдра кристалла кварца (рис. 5.29). Эта грань лежит на пересечении зон (11$\bar{2}$0) – (2$\bar{2}$01) и (10$\bar{1}$0) – (11$\bar{2}$1). Выполним перекрестное умножение символов этих пар граней без третьих индексов, а затем перекрестное умножение полученных троек чисел:

$$\begin{array}{cccccc|c} 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & \bar{2} & 1 & 2 & \bar{2} & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{cccccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array} \qquad \begin{array}{cccccc|c} 1 & \bar{1} & \bar{4} & 1 & \bar{1} & \bar{4} \\ 0 & \bar{1} & 1 & 0 & \bar{1} & 1 \end{array}$$

1$\bar{1}\bar{4}$ 0$\bar{1}$1 ($\bar{5}\bar{1}\bar{1}$) = (511)

Вычислив третий индекс -(5 + 1) = -6, получим окончательно символ грани 1 тригонального трапецоэдра: (51$\bar{6}$1). Заметим, что метод сложения символов в данном случае использовать было бы затруднительно.

Таким образом, используя метод перекрестного умножения, мы можем точно проиндицировать грани с достаточно сложными символами. Но поскольку этот метод все же довольно громоздкий, его применяют, если трудно определить символ грани более простыми способами.