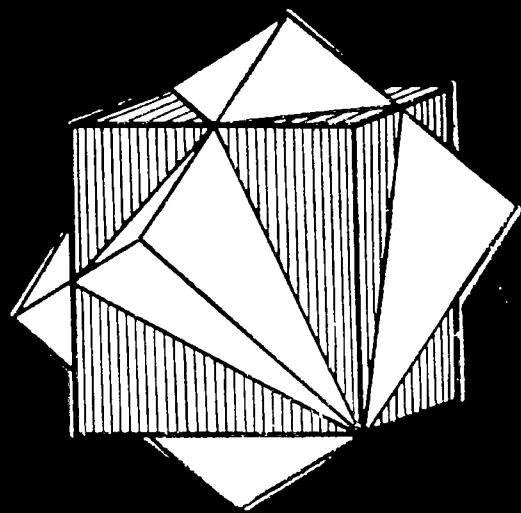


ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ



Ю. Г. ЗАГАЛЬСКАЯ
Г. П. ЛИТВИНСКАЯ

ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Под редакцией академика Н. В. БЕЛОВА

ДОПУЩЕНО МИНИСТЕРСТВОМ ВЫСШЕГО
И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ СССР
В КАЧЕСТВЕ УЧЕБНОГО ПОСОБИЯ
ДЛЯ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ ВУЗОВ

УЧЕБНИК

ИЗДАТЕЛЬСТВО
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
1973

Гос. публ. :
научно-техн. : ая
библиотека : ОР
ОКЗЕМПЛАР
ЧИТАЛЬНОГО ЗАЛА

54
15087

74-127

© ИЗДАТЕЛЬСТВО МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА, 1973 г.

3 $\frac{0293-097}{077(01)-73}$ 136-73

50—60 лет назад, в дни юности автора этих строк, кристаллография была островком — маленькой фигуркой в середине мощного треугольника из физики, химии и минералогии, ближе к последней вершине. Сейчас наша наука бурно выплескивается за все три стороны треугольника и за его вершины, но, конечно, не поглощает и не заливает их, но подстилает, становится их фундаментом. Основной треугольник превратился в кристаллографический шестиугольник — дитригон. Между физикой и химией разместились металловедение, металлофизика («аморфный» металлический слиток оказался массой кристаллических индивидуумов). Между химией и минералогией, вообще говоря, каменными науками, — огромное здание экспериментальной минералогии и петрографии с такими важнейшими и в то же время каждодневными объектами человеческой культуры, как цемент, керамика и стекло. Между физикой и минералогией лежит область синтетических кристаллов, подбор их на основе богатого минералого-кристаллографического опыта. Без монокристалльных деталей, часто тончайших, но монокристалльных пленок не может обойтись ни одна радиосхема, ни одно выпрямляющее устройство, ни множество контрольных аппаратов.

В чем же внутреннее существо некоторой мегаломании, таящейся в сознании современного кристаллографа-кристаллохимика?

Если основной характеристикой кристалла для такого авторитета, как В. И. Вернадский, была «векториальность», в связи с чем в отличие от прочих специальностей «естественного разряда» физико-математического факультета студентам-минералогам коротко преподносилась математика углов — сферическая тригонометрия, лежащая в основе тогдашнего инструмента геометрической кристаллографии, то сейчас наше кристаллохимическое мышление опирается на геометрию дисконтинуума — мира дискретных точечных частиц, но мира исключительно упорядоченного.

Если одним из достижений физики середины XIX в. была кинетическая теория газов — законы поведения хаотических потоков

дискретных частиц, то современный кристаллограф-кристаллохимик мыслит высокоорганизованными массами кристаллического дисконтинуума, которые управляются законами трансляционной симметрии с многочисленными и разнообразными эффектами. Они давно известны в плоских картинах пестрых обоев и тканей. Расширение их на трехмерный дисконтинуум и есть современная кристаллография-кристаллохимия с ее «шеренгами-рядами», решетками Бравэ и элементарными параллелепипедами.

Векториальность — сферическая тригонометрия — расширилась, развила и образовала вершину стереометрической фигуры на базе основного треугольника — дитригона, т. е. вершину тетраэдра или дитригональной пирамиды. Эта математическая вершина кристаллохимического полиэдра характеризуется большим числом особенностей, не сразу усваиваемых рядовым математиком: разные масштабы вдоль координатных осей, не одномерные, а трехмерные ряды Фурье, прямая и обратная решетки, использование четырехмерной геометрии в полной мере и в ограниченной (черно-белая симметрия). Разве могут по красоте и наглядности сравниться обычные группы подстановок с кристаллографическими иллюстрациями абстрактной теории групп. Немыслимая в условиях групп подстановок 48-членная группа выглядит элементарно просто в виде соответствующей матрицы 48×48 — квадрата Кейли — или на 48-граннике с расписанными на всех гранях операциями симметрии, теми единственными, которые переводят начальную грань в нами выбранную. Исключительно наглядной становится некоммутативность умножения на примере $3 \times 2_x \neq 2_x \times 3$. Убедительно демонстрируется нелепость спора о преимущественном значении инверсионной оси 6-го порядка («новая» геометрическая кристаллография) по сравнению с зеркальной («старая»). Обе оси равноправны с групповой точкой зрения и вместе с поворотной шестерной осью дружно, не мешая друг другу, строят, например, группу гексагональной бипирамиды.

Качественно новые требования, предъявляемые самой жизнью к современной геометрической кристаллографии, заставляют пересматривать и совершенствовать преподавание этой дисциплины не только будущим специалистам-кристаллографам, но и более широкому кругу лиц, чья деятельность связана с самыми различными направлениями геологических наук, а также физики, химии, биологии. Спокойная — описательная — методика, преподавание «на уровне памяти» оказываются уже несостоятельными, и в поисках иных путей передачи знаний, воспитания творчески мыслящих научных работников естественно обратиться прежде всего к такому хорошо проверенному в смежных науках и оправдавшему себя способу, как решение задач — задач, которые не только убеждают учащегося в практической значимости полученных сведений, помогают закрепить пройденный материал, проверить глубину и прочность знаний, но — и это не менее важно — развивают способность к логическому мышлению, учат ставить и разрешать проблемы,

самостоятельно, творчески мыслить. Несколько сотен тщательно разработанных задач и упражнений — от самых простых, доступных тем, кто делает лишь первые шаги в изучении кристаллов, до таких, которые продиктованы самой жизнью и решение которых представляет научный и практический интерес — охватывают весьма широкий круг вопросов кристаллографии.

Предлагая эти задачи, авторы были вынуждены проделать большую работу по пересмотру и переработке теоретического материала, особенно тех его разделов, которые либо вовсе не затрагиваются в многочисленных учебниках по кристаллографии, либо изложены недостаточно полно и четко. Так, вместо весьма расплывчатых «правил сложения элементов симметрии», в которых на равных правах выступают теоремы, следствия и частные случаи этих теорем, в настоящем учебнике дается фактически одна, выводящаяся из теоретико-групповых представлений «осевая» теорема Эйлера, точнее ее частный случай, рассматривающий взаимодействие осей второго порядка — поворотных и инверсионных. В доступной даже не слишком искушенному в вопросах высшей алгебры форме преподносится понятие о матричном представлении симметрических операций, своеобразен и четок вывод кристаллографических координатных систем — сингоний, алгоритм вывода классов, вывод простых форм. Очень важен для решения многих кристаллографических задач вопрос о преобразовании координатных систем, который затрагивается лишь в руководствах по рентгеноструктурному анализу, причем попытки механического применения правил, справедливых в микрокристаллографии, к решению вопросов, касающихся конечных фигур — кристаллических многогранников, часто приводят к грубым и досадным ошибкам. Интересен и полезен параграф, в котором разбираются вопросы симметрии и проектирования двойников.

Не следует, однако, думать, что новая геометрическая кристаллография исключительно усложнена. Наоборот, многие вопросы классической кристаллографии, недостаточно четкие либо усложненные непродуманной греческой и латинской филологией, упростились и получили четкость в новой. Таково странное положение с пятерной осью, неожиданно выпадающей из единой группы старших осей, с пятнадцатью кубическими формами, выводящимися из простейших, а не наоборот, и в то же время готовыми отразить все нужные нюансы, которые вызываются происхождением их от разных простейших.

Все сказанное позволяет заключить, что предлагаемый учебник по геометрической кристаллографии, оригинальный по форме и по существу, весьма актуален; он отражает те изменения, которым подвергся традиционный способ преподавания кристаллографии на кафедре кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета МГУ. Это первый опыт в написании учебника такого рода, и, хотя отдельные его части, изданные ротاپринтным способом, уже проверены практикой в ряде учебных заведений Совет-

ского Союза, естественно, что он не может быть лишен изъянов, поэтому редактор и авторы будут весьма благодарны за все замечания и исправления.

Авторы и редактор пользуются также возможностью поблагодарить всех сотрудников кафедры, причастных к созданию этого учебника, особенно Ю. К. Егорова-Тисменко за прекрасное выполнение некоторых оригинальных рисунков.

Академик Н. В. БЕЛОВ

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

§ 1. Элементы симметрии кристаллов. Операции симметрии

Кристаллическими называют твердые, однородные, анизотропные вещества, способные в подходящих условиях самоограниться, т. е. принимать формы многогранников, хотя сейчас можно считать общеизвестным, что основная характеристика кристаллического

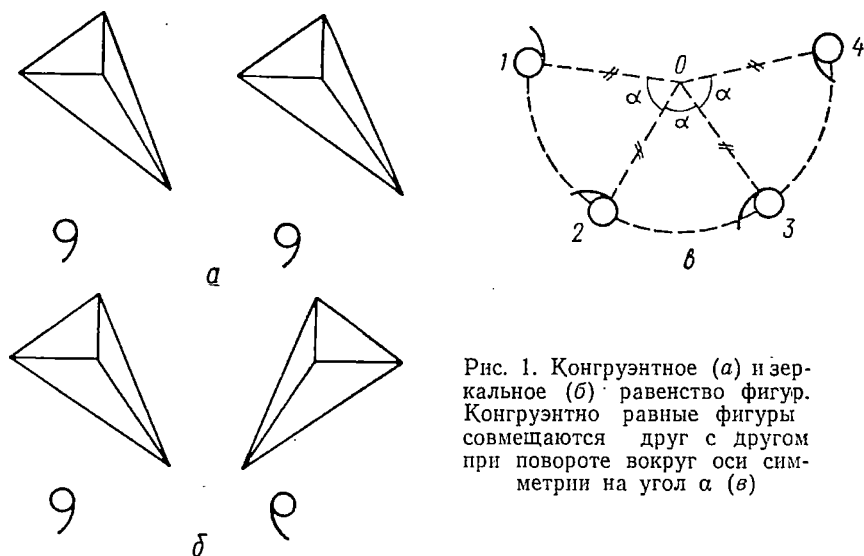


Рис. 1. Конгруэнтное (а) и зеркальное (б) равенство фигур. Конгруэнтно равные фигуры совмещаются друг с другом при повороте вокруг оси симметрии на угол α (в)

состояния заключается в трехмерной периодичности расположения материальных частиц (подробнее см. стр. 30).

Идеально развитый кристалл представляет собой многогранник, равные элементы которого (грани, ребра, вершины) могут быть совмещены друг с другом путем операций симметрии — поворотов или отражений. Геометрические образы (плоскости,

прямые линии, точки), с помощью которых задаются и осуществляются симметрические операции, называются элементами симметрии. Нетрудно видеть, что элементы симметрии суть геометрические места инвариантных точек.

В зависимости от характера операций различают элементы симметрии 1-го и 2-го родов. Элементы симметрии 1-го рода «связывают» друг с другом конгруэнтно равные фигуры (или их части), т. е. фигуры, совмещающиеся при наложении (или «вложении»), в то время как элементы симметрии 2-го рода связывают зеркально равные — энантиоморфные — фигуры (или их части), т. е. фигуры, относящиеся друг к другу как предмет и его зеркальное отражение. Условно назвав фигуру (или ее часть) по какому-нибудь признаку «правой», очевидно, следует «правыми» называть все фигуры, конгруэнтно равные первой¹, а «левыми» — энантиоморфно равные ей. Таким образом, операции элементов симметрии 1-го рода связывают «правые» фигуры с «правыми», «левые» с «левыми» (рис. 1, а), а элементов симметрии 2-го рода — «правые» с «левыми» (рис. 1, б).

ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ 1-го РОДА

Поворотные оси симметрии. Поворотной осью симметрии называют прямую, при повороте вокруг которой на некоторый угол фигура совмещается сама с собой, т. е. совмещаются ее равные

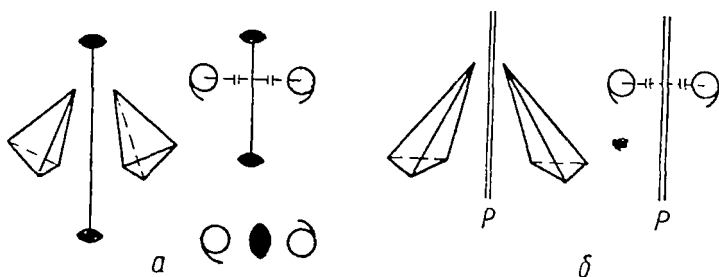


Рис. 2. Элементы симметрии 1-го (а) и 2-го (б) родов:
а — поворотная ось 2-го порядка; б — зеркальная плоскость симметрии

части, и фигура занимает в пространстве положение, эквивалентное исходному (рис. 1, в; 2, а).

Наименьший угол поворота α вокруг оси, который приводит фигуру к самосовмещению, называют элементарным углом поворота оси симметрии, его величина определяет порядок оси n , т. е. число самосовмещений фигуры за время полного поворота на 360° ($n = \frac{360^\circ}{\alpha}$).

¹ «Отпечаток» на первой фигуре правую руку, увидим ее на всех конгруэнтно связанных фигурах.

В геометрических фигурах возможны оси симметрии любых порядков, в кристаллических же многогранниках порядок оси ограничен числом $n=1, 2, 3, 4$ и 6 , т. е. в кристаллических многогранниках невозможны оси симметрии 5-го и выше 6-го порядков; этот основной закон симметрии кристаллов установлен эмпирически и доказан на основании решетчатого строения кристаллов (см. стр. 32).

Оси симметрии в символике Бравэ («учебной») обозначают буквой L с цифровым индексом n , указывающим порядок оси, — L_n . В «международных» символах (по Герману — Могену) повторные оси обозначают арабскими цифрами, соответствующими порядку оси (например $L_2=2, L_3=3...$). Графически оси разных порядков изображаются многоугольниками: \bigcirc — L_6, \square — $L_4,$

\triangle — L_3 и сферическим двугольником (фюзю) \bigcirc — L_2 .

Для описания операций используют те же значки, что и для элементов симметрии, причем показатель степени означает в этом случае число повторенных элементарных поворотов, а минус при показателе степени — поворот в противоположном направлении. Так, если $L_6^1(6^1)$ — поворот на 60° по часовой стрелке, то $L_6^{-1}(6^{-1}) = L_6^5(6^5)$ — такой же поворот против часовой стрелки. Таким же образом

$$L_6^2(6^2) = L_3^1(3^1),$$

$$L_6^3(6^3) = L_2(2), L_6^4(6^4) = L_3^{-1}(3^{-1}) \text{ и } L_6^6(6^6) = 1$$

единицей обозначают операцию идентичности, или тождественности).

ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ 2-го РОДА

Зеркальная плоскость симметрии — плоскость, «отражаясь» в которой как в «двустороннем зеркале», правая фигура (часть фигуры) совмещается с левой (рис. 2, б); таким образом, фигуры, связанные плоскостью симметрии, относятся друг к другу как предмет и его зеркальное отражение.

Зеркальная плоскость симметрии обозначается буквой P (по Бравэ) или m (по Герману — Могену). Графически плоскость изображается жирной или двойной линией.

Центр инверсии (центр симметрии) можно представить как «зеркальную точку», отражаясь в которой, правая фигура (часть

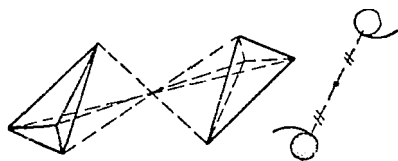


Рис. 3. Фигуры связаны отражением в центре инверсии

фигуры) совмещается с левой, т. е. фигуры, связанные инверсией, относятся друг к другу как предмет и его фотографическое изображение (рис. 3). Иными словами, любой точке фигуры, обладающей центром инверсии, соответствует эквивалентная точка на

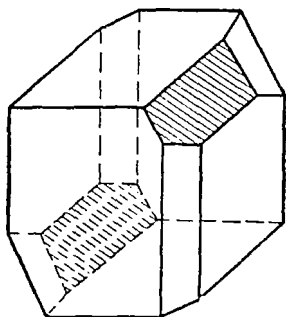
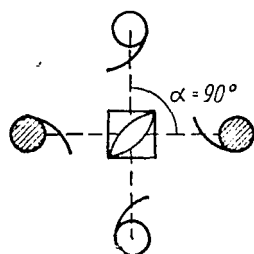
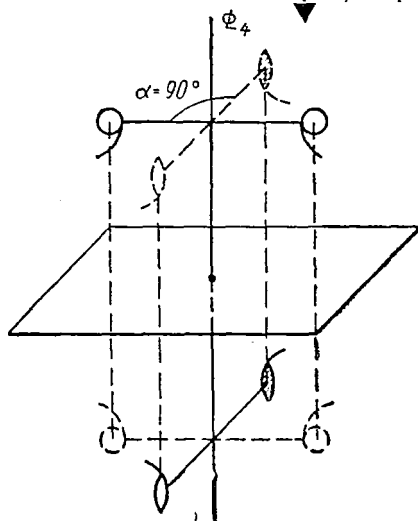


Рис. 4. Многогранник, единственный элемент симметрии которого — центр инверсии

Рис. 5. Фигуры связаны симметрическими операциями зеркальной оси 4-го порядка. Считать фигуры справа от оси Φ_4 (на левом рис.) обращенными к читателю своей изнанкой



продолжении прямой, соединяющей первую точку с центром, причем расстояния от центра до обеих точек равны между собой; поэтому каждой вершине centrosимметричного многогранника соответствует равноудаленная от центра эквивалентная вершина, каждому ребру — равноудаленное, равное, параллельное, но противоположно направленное ребро, а каждой грани — равноудаленная, равная, антипараллельная грань (рис. 4). Центр инверсии обозначают буквой S (по Бравэ) и \bar{I} (по Герману — Могену), графически отмечают точкой или также буквой S .

Фигура, имеющая центр инверсии, разделяется на две зеркально равные, но антипараллельные части любой плоскостью, прохо-

дядшей через центр инверсии, тогда как фигура, обладающая плоскостью симметрии, разделяется на две зеркально равные части только одной этой плоскостью. Любое сечение через двойную ось симметрии даст две конгруэнтно совпадающие половины.

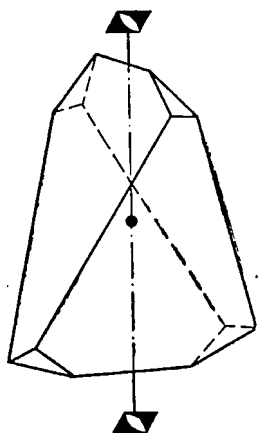


Рис. 6. Многогранник, единственный элемент симметрии которого — зеркальная ось симметрии 4-го порядка (4)

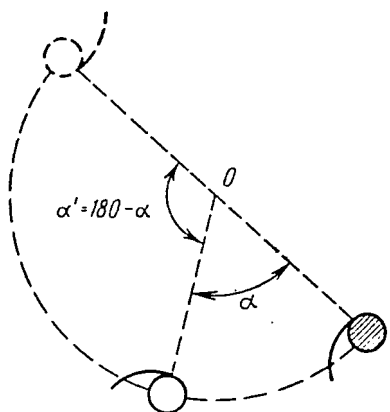


Рис. 7. Зависимость между зеркальным и инверсионным поворотами

$$\left(\Phi_{n=} \frac{360}{\alpha} = \bar{L}_{n'=}^{-1} \frac{360}{180-\alpha} \right)$$

Сложные оси симметрии позволяют совмещать равные части фигуры путем двойной операции — поворота на определенный угол, задаваемый порядком оси, и отражения либо в плоскости, перпендикулярной к оси вращения, либо в точке на этой оси. В первом случае ось называют зеркальной (альтернирующей), во втором — инверсионной. В общем случае каждое из совместных действий — поворот и отражение — мнимые (рис. 5, 6).

Зеркальные оси обозначают Φ_n (или λ_n) и \bar{n} ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \dots$), инверсионные — \bar{L}_n или L_{in} и \bar{n} ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \dots$). Специальные графические обозначения необходимы в кристаллах лишь для сложных осей 4-го порядка ($\bar{4}$).

Из рис. 7 можно увидеть, что операция каждой зеркальной оси с элементарным углом α может быть заменена операцией инверсионной оси с элементарным углом поворота $\alpha' = 180 - \alpha$:

$$\Phi_{n=} \frac{360}{\alpha} = \bar{L}_{n'=}^{-1} \frac{360}{180-\alpha},$$

поэтому при описании симметрии кристаллов пользуются каким-либо одним видом сложных осей: инверсионными или зеркальными.

Для осей некристаллографических порядков в приведенную выше формулу вводится коэффициент q — наименьшее целое число, приводящее к целочисленному значению n' :

$$\Phi_{n=\frac{360}{\alpha}} = \mathcal{L}_{n'=\frac{360q}{180-\alpha}}^{-1}.$$

Нетрудно убедиться (см. упражнения 13, 14), что преобразования большинства сложных осей могут быть заменены отдельными действительными операциями:

$$\begin{aligned}\Phi_1(\mathcal{L}_2) &= P, \\ \Phi_2(\mathcal{L}_1) &= C, \\ \Phi_3(\mathcal{L}_6) &= L_3P (P \perp L_3), \\ \Phi_6(\mathcal{L}_3) &= L_3C.\end{aligned}$$

Оригинальной (незаменяемой) оказывается в кристаллах лишь ось 4-го порядка, причем $\Phi_4 = \mathcal{L}_4^{-1}$.

Чтобы решить, какими простыми элементами симметрии можно заменить преобразования сложных осей любых (некристаллографических) порядков, можно прибегнуть к аналогии: так, для осей нечетных порядков ($n=2k+1$) справедливы закономерности, выведенные для оси 3-го порядка, т. е.

$$\Phi_{2k+1} = \mathcal{L}_{(2k+1)2} = L_{2k+1} \cdot P;$$

сложные оси четных порядков ($n=4k+2$ и $n=4k+4$) подчиняются закономерностям, полученным соответственно для осей 6-го и 4-го порядков (см. также задачу 1).

Из вышензложенного ясно, что симметрия любого многогранника, т. е. закономерная повторяемость одинаковых его частей, может быть описана только осями симметрии — простыми (поворотными) и сложными (зеркальными или инверсионными), однако на практике сложные оси 1-го и 2-го порядков обычно заменяют их эквивалентами — плоскостью симметрии и центром инверсии.

Комплекс элементов симметрии кристалла записывается (в обозначениях Бравэ) в виде формулы в такой последовательности: оси симметрии (начиная с более высоких порядков), плоскости симметрии, центр инверсии; коэффициент перед буквенным обозначением показывает число соответствующих элементов симметрии. Целесообразно (см. о международных символах, стр. 26) различать неэквивалентные и эквивалентные одноименные элементы симметрии, понимая под последними элементами, связанные какими-либо операциями симметрии. Так, $L_4 4L_2 5PC$ можно записать как

$$L_4 2L_2' 2L_2'' 2P' 2P'' P''' C.$$

Любое симметрическое преобразование — поворот с отражением или без него — удобно представить с помощью координат исходной и преобразованной точек. Так, поворот вокруг вертикальной оси на 180° (2_z) запишем как $xyz \rightarrow \overline{xyz}$, поворот вокруг вертикальной оси 4-го порядка по часовой стрелке (4_z^1) — $xyz \rightarrow \overline{yxz}$, отражение в горизонтальной плоскости симметрии (m_z) — $xyz \rightarrow \overline{xyz}$, инверсия (i) — $xyz \rightarrow \overline{xyz}$ (см. также стр. 41).

Симметрическое преобразование можно представить и как преобразование некоторой координатной системы относительно неподвижного объекта и записать его с помощью матриц — таблиц коэффициентов, определяющих соотношение между исходной и преобразованной координатными системами. О матричном представлении симметрических операций см. стр. 79.

Совокупность симметрических операций, характеризующих симметрию кристалла, представляет собой эффектный пример замкнутой (конечной) математической группы, иными словами, сочетания симметрических операций, а значит и элементов симметрии, не случайны, а подчиняются всем положениям теории абстрактных групп. В частности, для групп симметрии справедливо положение о том, что «произведение» двух любых членов группы должно принадлежать этой же группе, т. е. результат двух последовательно выполненных операций симметрии равносителен результату третьей операции, которую можно назвать произведением первых двух. Обычно, однако, говорят, что взаимодействие двух элементов симметрии порождает третий элемент симметрии, принадлежащий данной группе, но способный в других группах играть самостоятельную роль, т. е. существовать без породивших его операций.

Математическая справка. Группой называется множество элементов (чисел, геометрических объектов, физических величин, симметрических операций и т. д.), которое подчиняется следующим условиям.

1. Определена алгебраическая операция — так называемое «групповое умножение», позволяющее любой паре элементов a, b данного множества поставить в соответствие их произведение — третий элемент c , принадлежащий этому множеству: $a \cdot b = c$, причем в общем случае $ab \neq ba$.

2. Групповое умножение ассоциативно: $(ab)c = a(bc)$.

3. Группа содержит единичный элемент e , удовлетворяющий условию: $ae = ea = a$.

4. Для каждого элемента группы существует обратный элемент: $aa^{-1} = e$.

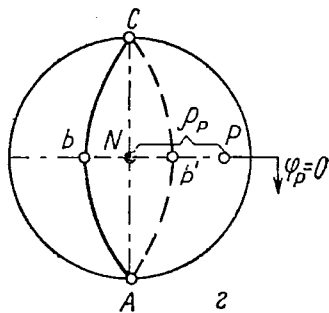
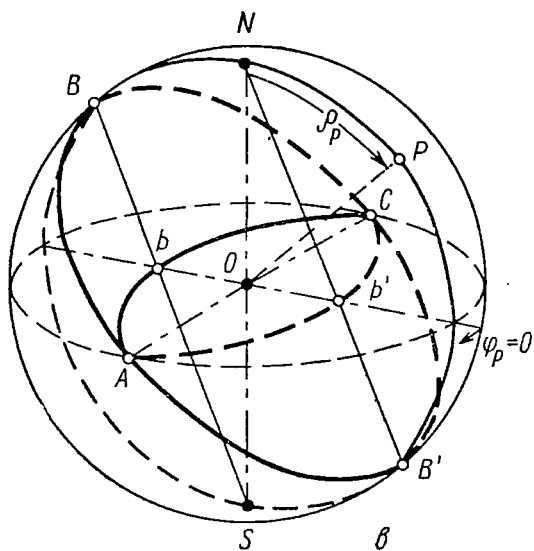
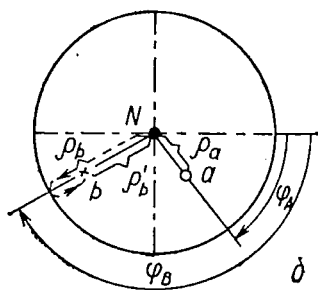
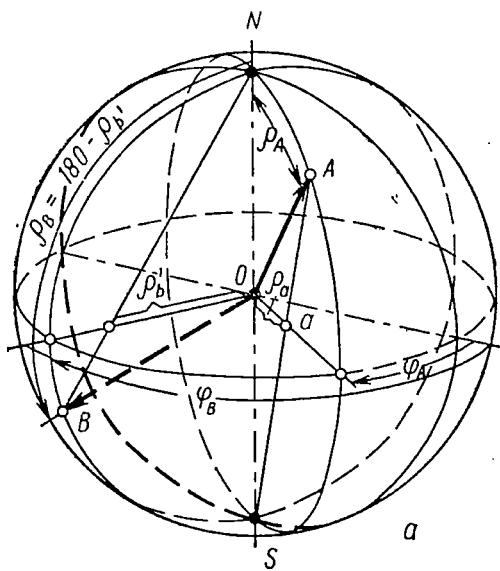
Различают группы конечные (замкнутые) и бесконечные; число элементов конечной группы определяет ее порядок.

Часть группы, которая сама по себе представляет группу, называется подгруппой данной группы.

Группу называют циклической, если все ее элементы суть степени одного элемента.

В группах симметрии групповым умножением, как было сказано, считают взаимодействие элементов симметрии. Обратная операция — поворот в противоположную сторону. Единичный элемент группы — операция идентичности, которой соответствует ось 1-го порядка.

Зная основные правила взаимодействия элементов симметрии (основные теоремы умножения симметрических операций), нетрудно вывести все возможные в кристаллографии сочетания элементов симметрии — так называемые виды, или классы, симметрии (точечные группы).



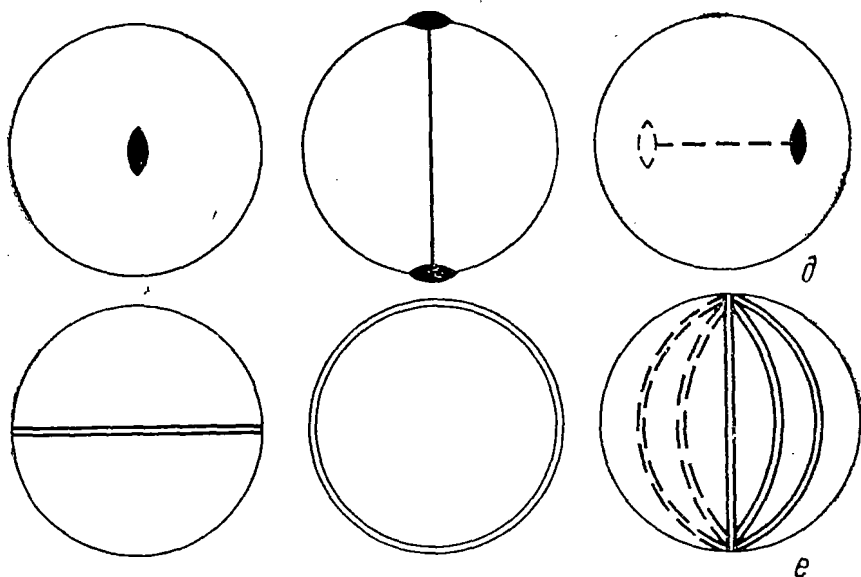


Рис. 8. К методу стереографического проектирования:
a, б — построение стереографической проекции направления; *в, г* — то же для плоскостей; *д* — стереографические проекции вертикального, горизонтального и наклонного направлений; *е* — то же для плоскостей

§ 2. Стереографические проекции. Сетка Вульфа

Для графического изображения элементов симметрии, а также граней и ребер кристалла наиболее удобна стереографическая проекция, главное достоинство которой заключается в том, что угловые величины — основная морфологическая характеристика кристалла (см. «Закон постоянства углов», стр. 32) — выступают на стереограмме в неискаженном виде.

При построении стереографической проекции кристалл помещают в центр воображаемой сферы (сферы проекций), которую любое направление, идущее из центра кристалла, пересечет в точке, называемой сферическим полюсом направления (точки *A* и *B* на рис. 8, *a*), а плоскость — по окружности (дуга *ABCB'*, рис. 8, *в*). Полученная сферическая проекция позволяет зафиксировать координатами φ и ρ положение направления и плоскости, если последнюю задать ее нормалью. Для этого надо, приняв некоторую точку сферы за полюс, нанести градусную сеть и один из ее меридианов посчитать нулевым. Из рис. 8, *a, в* очевидно, что φ отвечает географической долготе, а ρ — полярному расстоянию, причем $0 \leq \varphi \leq 360^\circ$ и $0 \leq \rho \leq 180^\circ$.

Стереографическими проекциями направлений *OA* и *OB* (рис. 8, *a, б*) будут точки *a* и *b*, в которых лучи зрения *SA* и *NB* (*SN* — ось проектирования) пересекут экваториальную

плоскость—плоскость проекций. Подчеркнем, что точку зрения для направлений с $\rho \leq 90^\circ$ следует выбирать в южном полюсе (S) сферы, а для направлений с $\rho \geq 90^\circ$ — в северном (N). Нетрудно убедиться, что вертикальные направления спроектируются в центре экваториального круга (основного круга проекций), горизонтальные — на окружности этого круга, а наклонные — внутри его (рис. 8, δ).

Можно показать (рис. 8, ϵ , z), что стереографической проекцией плоскости ($ABCB'$), проходящей через центр сферы проекций, будет дуга большого круга ($AbCb'$), т. е. дуга, опирающаяся на диаметр. Стереографическая проекция горизонтальной плоскости совпадает с окружностью основного круга проекций; при выведении из горизонтального положения получим на стереограмме две симметричные дуги («видимую» и «невидимую» части плоскости), причем по мере увеличения угла наклона плоскости кривизна дуг будет уменьшаться и в пределе, в случае вертикальной плоскости, эти дуги сольются с диаметром (рис. 8, e).

Легко доказывается, что плоскость, не проходящая через центр сферы проекций, спроектируется в виде дуги малого круга.

Грани кристалла при стереографическом проектировании обычно заменяют нормальными, опущенными на них из центра тяжести кристалла, а ребра — перпендикулярными к ним плоскостями. Такие проекции называются гномостереографическими. Грани верхней и нижней полусфер ($\rho \leq 90^\circ$ и $\rho \geq 90^\circ$) принято отмечать на стереограмме разными значками, например кружками и крестиками соответственно.

На стереограмме координату φ отсчитывают по окружности основного круга проекций от точки пересечения ее с нулевым меридианом (отсчет ведется по часовой стрелке), а координату ρ — по радиусу от центра круга проекций.

Для точного проектирования пользуются специальным транспарантом — сеткой Вульфа (см. приложение I), представляющей собой стереограмму градусной сети сферы проекций на ее меридиональную плоскость при точке зрения на экваторе сферы. При работе с сеткой Вульфа надо иметь в виду, что меридианы и параллели сетки играют лишь вспомогательную роль как дуги больших и малых кругов; истинный полюс сферы проекций (N) совпадает с центром сетки Вульфа, из меридианов сферы оставлены лишь два — это вертикальный и горизонтальный диаметры сетки, причем последний соответствует нулевому меридиану, экватор сферы совпадает с окружностью сетки. Таким образом, углы φ отсчитывают по окружности сетки Вульфа, а ρ — от ее центра по горизонтальному или вертикальному диаметру.

Сетка Вульфа позволяет графически, без дополнительных расчетов, решать многие задачи геометрической кристаллографии, связанные с угловыми характеристиками кристалла; все построения проводятся на прозрачной бумаге с фиксированным центром — полюсом N .

Для измерения на стереограмме углового расстояния между двумя точками надо, вращая восковку относительно сетки Вульфа, привести эти точки либо на один меридиан сетки, если точки принадлежат одной полусфере, либо на два меридиана, симметричных относительно вертикального диаметра сетки, если точки находятся в разных полусферах ($\rho < 90^\circ$ и $\rho > 90^\circ$). Отсчет углового расстояния между точками ведется по отрезку меридиана сетки Вульфа, заключенному между ними, причем во втором случае — через полюс сетки. Если точки представляют собой стереографические проекции направлений, то дуга большого круга, проходящая через них, будет стереографической проекцией плоскости, проходящей через эти направления. Если же точки служат гномостереографическими проекциями плоскостей, то такая дуга будет гномостереографической проекцией ребер, по которым пересекаются эти плоскости. Переход от гномостереографической проекции какого-либо элемента к его стереографической проекции несложен, так как сводится к нахождению либо дуги (экватора) к заданному полюсу, либо полюса к заданной дуге. Для этого, поставив точку, принятую за полюс, на горизонтальный диаметр сетки Вульфа и отсчитав по нему в обе стороны по 90° , находим два симметричных меридиана — видимую и невидимую части искомой дуги. Для решения обратной задачи совмещаем заданную дугу с соответствующим меридианом сетки и находим на угловом расстоянии в 90° ее полюс.

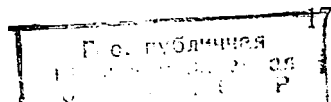
Для измерения угла между двумя дугами надо построить вспомогательную дугу, полюсом которой служит точка пересечения заданных дуг; искомый угол просчитывается по отрезку вспомогательной дуги, заключенному между заданными дугами.

Геометрическое место точек, равноудаленных от заданной, можно найти, построив на стереограмме малую окружность, стереографический центр которой совпадает с заданной точкой. Для этого, вращая сетку Вульфа, совмещаем эту точку то с одной, то с другой параллелью сетки, отсчитывая каждый раз по меридиану в обе стороны нужные угловые расстояния. Полученные точки принадлежат одной окружности, вычертить которую можно либо найдя геометрический центр круга, либо воспользовавшись одной из параллелей сетки Вульфа как лекалом.

§ 3. Основные теоремы умножения симметрических операций

Теорема 1. Взаимодействие двух осей симметрии 2-го порядка, пересекающихся под углом λ , порождает поворотную ось симметрии с элементарным углом $\alpha = 2\lambda$.

Модельное доказательство. Асимметрическая фигурка 1 (рис. 9, а) переводится в положение 2 поворотом вокруг горизонтальной оси 2-го порядка (L_2). Если фигурку 1 условно назвать «левой», то «левой» следует назвать и фигурку 2, которая после поворота покажет наблюдателю свою изнанку. Поворот фигурки 2



вокруг оси L''_2 переведет ее в положение 3, оставив по-прежнему «левой» (к наблюдателю снова обращена «лицевая» сторона фигурки).

Две «левые» фигурки — 1 и 3 — равны конгруэнтно и расположены таким образом, что могут быть совмещены друг с другом поворотом вокруг вертикальной оси L_n на угол $\alpha = 2\lambda$. Ось L_n перпендикулярна к плоскости осей 2-го порядка.

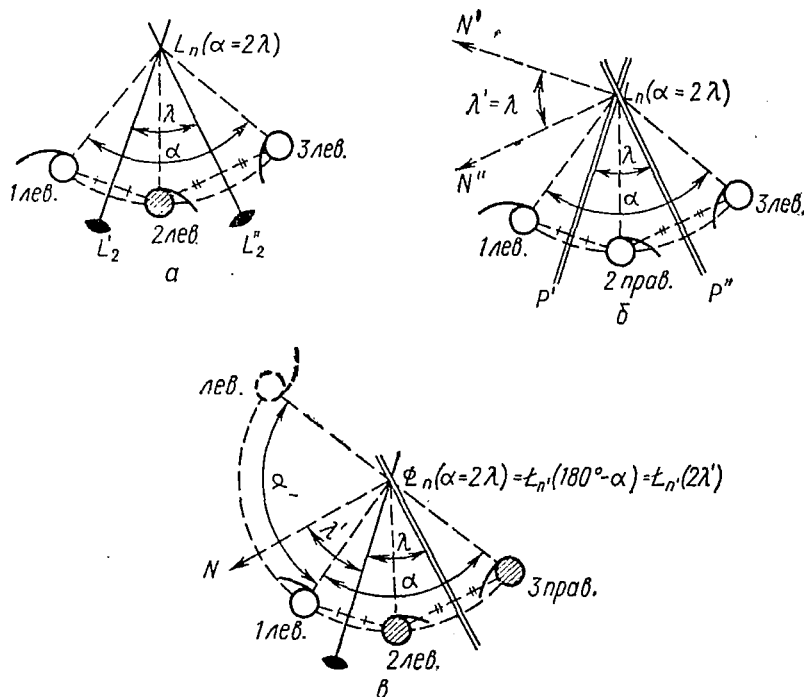


Рис. 9. К теоремам взаимодействия элементов симметрии

Теорема 2. Взаимодействие двух плоскостей симметрии, пересекающихся под углом λ , порождает поворотную ось симметрии с элементарным углом поворота $\alpha = 2\lambda = 2\lambda'$ (λ' — угол между осями направлениями — нормальными к плоскостям симметрии).

Модельное доказательство. «Левая» фигурка 1 (рис. 9, б) переводится отражением в зеркальной плоскости P' в «правую» фигурку 2. Фигурка 3, полученная зеркальным отражением фигурки 2 в плоскости P'' , снова «левая». Две «левые» фигурки 1 и 3 равны конгруэнтно и могут быть совмещены друг с другом поворотом на угол $\alpha = 2\lambda$ вокруг оси L_n , перпендикулярной плоскости чертежа. Поскольку нормаль к плоскости совпадает с L_2 , можно сказать,

что $L_{n=\frac{360}{2\lambda}}$ — результат взаимодействия двух инверсионных осей 2-го порядка, образующих угол λ' ($=\lambda$).

Теорема 3 («промежуточная»). Взаимодействие оси 2-го порядка и плоскости симметрии, пересекающихся под углом λ , порождает зеркальную ось симметрии с углом $\alpha=2\lambda$ или эквивалентную ей инверсионную ось симметрии с углом α' , равным удвоенному углу между особыми направлениями ($2\lambda'$) — осями 2-го порядка, поворотной и инверсионной.

Модельное доказательство. «Левая» фигурка 1 (рис. 9, в) переводится горизонтальной осью L_2 в положение 2, поворачиваясь к наблюдателю своей «изнанкой», но оставаясь при этом «левой». Фигурка 2 переводится в положение 3 отражением в плоскости симметрии, т. е. фигурка 3, зеркально равная фигурке 2, становится «правой». «Левая» и «правая» фигурки — 1 и 3 — могут быть совмещены друг с другом лишь действием сложных осей симметрии, либо зеркальной с элементарным углом поворота $\alpha=2\lambda$, либо инверсионной с элементарным углом поворота $\alpha'=180-\alpha=2\lambda'$.

Во всех трех случаях порожденная ось проходит через точку пересечения исходных особых направлений перпендикулярно плоскости последних. Для каждой теоремы справедливы перестановки, т. е. из трех операций за порождающие можно принять две любые операции, например для теоремы 3:

$$L_2 \cdot P = \Phi_n,$$

$$P \cdot \Phi_n = L_2,$$

$$L_2 \cdot \Phi_n = P.$$

Нетрудно увидеть, что три разобранные теоремы фактически составляют одну: взаимодействие двух осей симметрии 2-го порядка, поворотных или инверсионных, приводит к возникновению проходящей через точку их пересечения третьей оси симметрии с элементарным углом поворота, вдвое превышающим угол между исходными осями; результирующая ось окажется поворотной, если исходными будут две одинаковые оси (обе поворотные или обе инверсионные), и инверсионной, если оси будут разными. Большинство остальных правил взаимодействия элементов симметрии оказывается естественными следствиями или частными случаями этой фундаментальной теоремы, представляющей в свою очередь частный случай теоремы Эйлера о взаимодействии двух осей любых порядков. Так, рождение центра инверсии при взаимодействии четной оси симметрии и перпендикулярной к ней плоскости симметрии — частный случай теоремы 3:

$$L_2 \cdot P_{\perp} = \Phi_2 = \bar{L}_1 = \text{центр инверсии.}$$

Эти правила позволяют вывести все точечные группы — классы симметрии, за исключением классов с несколькими осями высшего

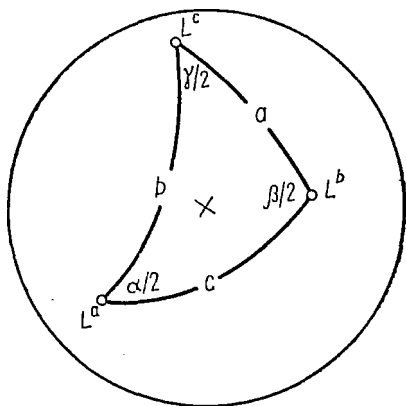


Рис. 10. К осевой теореме Эйлера: L^a , L^b , L^c — стереографические проекции осей симметрии (вершины сферического треугольника); a , b , c — углы между осями (стороны сферического треугольника); α , β , γ — элементарные углы поворота осей L^a , L^b , L^c соответственно

порядка. В последнем случае можно воспользоваться общей теоремой Эйлера² (см. также стр. 22).

При выводе классов симметрии удобны обозначения Шенфлиса, позволяющие одним символом (одной буквой с соответствующим индексом) охарактеризовать не только весь набор элементов симметрии конкретного класса, но обозначить целое семейство родственных классов. Для «раскрытия» символов Шенфлиса необходимо знание правил взаимодействия элементов симметрии.

§ 4. Обозначение классов симметрии по Шенфлису

Классы с единственной осью симметрии (циклические классы) обозначают буквой C с цифровым индексом, показывающим порядок оси³ ($C_3 = L_3$). Буква i в индексе указывает на инверсионную ось, S обозначает класс с единственной зеркальной осью; так, вместо C_{4i} можно записать S_4 , вместо C_{3i} и C_2 — S_6 и S_2 соответственно.

Классы с побочными осями (осями 2-го порядка, перпендикулярными главной оси) обозначают буквой D с цифровым индексом,

² По Эйлеру (рис. 10), две оси L^a и L^b (элементарные углы поворота α и β), пересекающиеся под углом c , рожают ось симметрии L^c с углом поворота γ . Зависимость между элементарными углами поворота осей (α , β , γ) и углами пересечения осей (a , b , c) определяется из следующей формулы сферической тригонометрии:

$$\cos c = \frac{\cos \gamma/2 + \cos \alpha/2 \cos \beta/2}{\sin \alpha/2 \operatorname{sig} \beta/2},$$

аналогично записываются формулы для вычисления углов $a(\widehat{L^b L^c})$ и $b(\widehat{L^a L^c})$.

Заметим, что ось L^c поворотная, если L^a и L^b одинаковы (обе поворотные или обе инверсионные), в противном случае ось L^c инверсионная.

³ Обычная ошибка считать C обозначением не класса, а оси.

показывающим порядок главной поворотной оси и число побочных осей ($D_3=L_33L_2$).

Для обозначения зеркальных плоскостей используют дополнительные буквенные индексы: v — в классах C для плоскостей меридиональных, т. е. параллельных единственной поворотной оси; h — для плоскости экваториальной, т. е. перпендикулярной единственной, или главной, оси; d — для плоскостей, делящих пополам угол между побочными осями (плоскость — «делитель»), и s — для плоскостей «безразличной» ориентации ($C_{3v}=L_33P$, $C_{2h}=L_2PC$, $D_{4h}=L_44L_25PC$, $D_{2d}=L_42L_22P$ и $C_s=P$).

Классы с несколькими осями высшего порядка обозначаются буквами O (осевой комплекс — $3L_44L_36L_2$) и T (осевой комплекс — $3L_24L_3$). Индексы h и d указывают на координатные и диагональные плоскости соответственно. Если имеются оба типа плоскостей, в символ вписывают лишь координатные.

§ 5. Схематический вывод групп (классов) симметрии

Все сочетания элементов симметрии можно разделить на два типа: А — с одним или несколькими единичными направлениями (E), т. е. направлениями, не повторяющимися какими-либо операциями симметрии; Б — без единичных направлений.

А. КЛАССЫ С ЕДИНИЧНЫМИ НАПРАВЛЕНИЯМИ

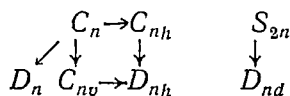
С единственным, или главным, особым направлением совмещаем поворотные оси, а также зеркальные (или инверсионные) оси четных порядков (операции сложных осей нечетных порядков представляют собой комбинации действительных операций: $\Phi_3=L_3P$, $\tilde{L}_3=L_3C$) (см. задачу I).

Не нарушая «единичности» заданного направления, к нему можно добавить:

- плоскость симметрии, проходящую через E ,
- плоскость симметрии, перпендикулярную к E ,
- ось второго порядка, перпендикулярную к E ,
- любую комбинацию названных элементов.

Добавление центра инверсии к E приведет к одному из указанных вариантов.

Рассмотрев все сочетания элементов симметрии, получим семь типов классов (групп) симметрии:



Подставив в символы все кристаллографические значения порядков осей симметрии и откинув повторения, получим 27 классов (групп) симметрии с единичным направлением.

Б. КЛАССЫ БЕЗ ЕДИНИЧНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ—КЛАССЫ С
 НЕСКОЛЬКИМИ ОСЯМИ СИММЕТРИИ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ

Не прибегая к доказательству общего случая теоремы Эйлера (см. стр. 19), воспользуемся известными из математики возможными сочетаниями поворотных осей высших порядков. Эти сочетания могут быть только такими, которые характеризуют правильные многогранники: $3L_44L_36L_2$ для куба и октаэдра, $3L_24L_3$ для тетра-

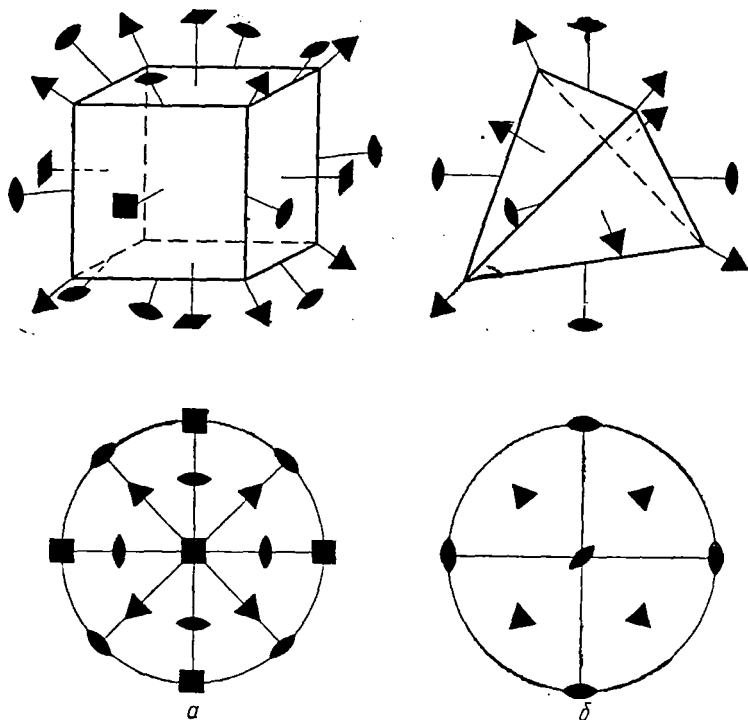


Рис. 11. Кристаллографические сочетания осей высшего порядка

эдра ⁴ и $6L_510L_315L_2$ для правильного додекаэдра (12 граней в виде правильных пятиугольников) и икосаэдра (20 треугольных граней); последний набор осей некристаллографичен, так как включает оси 5-го порядка; по Шенфлису обозначается I.

В обоих кристаллографических сочетаниях осей (рис. 11, а и б) три взаимно перпендикулярные поворотные оси симметрии ($3L_4$

⁴ Фактически координатные оси в тетраэдре представлены тремя зеркальными (инверсионными) осями 4-го порядка, но каждая из них кроме мнимого поворота на 90° предполагает реальный поворот на 180° , т. е. включает ось L_2 , хотя и не может быть ею заменена:

$$\Phi_4^2 = \bar{L}_4^2 = L_2, \text{ но } \Phi_4 = \bar{L}_4 \neq L_2(I).$$

или $3L_2$) удобно принять за координатные. Четверка равнонаклонных к ним осей 3-го порядка «обеспечивает» эквивалентность координатных осей. Шесть осей 2-го порядка в кубе (и октаэдре) проходят по биссектрисам углов между координатными осями.

Взяв за основу простейший набор поворотных осей симметрии $T=3L_24L_3$ (рис. 11, б) и добавляя элементы симметрии, не размножающие исходный комплекс (центр симметрии, координатные плоскости симметрии, диагональные плоскости симметрии, диагональные оси 2-го порядка, а также любую комбинацию этих элементов), получим пять классов: T, T_h, T_d, O, O_h ⁵.

Полученные таким образом 32 (27+5) класса симметрии (32 точечные группы) исчерпывают все возможные случаи сочетания операций (элементов симметрии) в кристаллических многогранниках.

§ 6. Координатные системы в кристаллографии

Необходимость фиксировать то или иное направление, ту или иную плоскость (например взаимное расположение граней) заставляет вводить в кристаллах координатную систему. Однако пользоваться во всех случаях какой-то единой системой, например принятой в аналитической геометрии декартовой, в кристаллографии неудобно, так как прямоугольная система с одинаковыми масштабами по осям не позволит достаточно полно и наглядно отразить основные особенности кристаллов — симметрию и анизотропию. Чтобы увязать координатные системы с симметрией кристалла, координатные оси совмещают с его особыми направлениями⁶ и лишь при отсутствии или недостаточном их числе — с действительными или возможными ребрами кристалла (если есть одно особое направление, то ребра должны лежать в плоскости, перпендикулярной этому направлению).

Таким образом, координатные системы кристаллов будут различаться как своими осевыми углами $\alpha=Y\hat{Z}$, $\beta=X\hat{Z}$, $\gamma=X\hat{Y}$, так и различной степенью эквивалентности координатных направлений. Последнее может быть условно отражено соотношением масштабных единиц a, b, c вдоль осей X, Y, Z соответственно.

Три возможности — $a \neq b \neq c$, $a = b \neq c$ и $a = b = c$ — позволяют распределить кристаллографические координатные системы по трем категориям — низшей, средней и высшей; рассмотрение угловых соотношений в каждой из этих категорий позволит вывести все кристаллографические реперы. Классы с единым координатным репером объединяют в одно семейство — сингонию.

⁵ $T_h = T_i$ и $O_h = O_i = O_d$.

⁶ Особыми направлениями кристалла считают оси симметрии и нормали к плоскостям симметрии, иными словами, поворотные и сложные оси симметрии.

I. НИЗШАЯ КАТЕГОРИЯ ($a \neq b \neq c$)

Из условия неэквивалентности координатных осей следует, что к низшей категории должны относиться лишь классы, не имеющие осей симметрии высшего порядка. Число особых направлений, как следует из теорем взаимодействия элементов симметрии, может быть равно лишь 3, 1 и 0.

1. Особых направлений — три. Так как особыми направлениями в низшей категории оказываются поворотные или инверсионные оси второго порядка, здесь, как очевидно из тех же теорем, неизбежны прямые углы между координатными осями. Сингонию с таким координатным репером — $a \neq b \neq c$ и $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ — называют ромбической⁷.

2. Особое направление — одно. С этим особым направлением — осью 2-го порядка, поворотной или инверсионной, — совмещают одну координатную ось, две другие приходится выбрать более или менее произвольно — параллельно ребрам, которые должны лежать в перпендикулярной особому направлению плоскости.

Таким образом, приходим к координатному реперу с двумя прямыми углами (угол между координатными осями, выбранными параллельно, ребрам, косой).

С особым направлением совмещают либо ось Y (классическая установка), либо ось Z (новая установка):

1) классическая установка: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$;

2) новая установка: $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$.

Классы с такой координатной системой образуют моноклинную сингонию (*греч.* моно — один, клинос — косой).

3. Особые направления отсутствуют. Координатные оси приходится выбирать параллельно действительным или возможным ребрам кристалла, что приводит к координатному реперу самого общего вида:

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ.$$

Сингония, к которой относятся классы с такой координатной системой, называется триклинной.

II. СРЕДНЯЯ КАТЕГОРИЯ ($a = b \neq c$)

Из условия эквивалентности двух координатных осей следует, что к средней категории относятся лишь классы с единственной осью высшего порядка — главной осью класса. С главной осью совмещают вертикальную координатную ось Z , оси X и Y выбирают в плоскости, перпендикулярной к главной направлению по осям 2-го порядка, поворотным или инверсионным, если же их нет — параллельно ребрам кристалла. Угол γ между

⁷ Ось Z принято во всех классах этой сингонии совмещать с поворотной осью.

горизонтальными осями определяется порядком главной оси: $\gamma = 90^\circ$ для оси 4-го порядка и $\gamma = 120^\circ$ для осей 3-го и 6-го порядков. Таким образом, в средней категории выделяются две координатные системы, которым соответствуют две сингонии:

1. Тетрагональная сингония: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$;

2. Гексагональная сингония⁸: $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

Примечания. а) по традиции для координатных горизонтальных осей в тетрагональной сингонии предпочитают L_2 , в гексагональной — \underline{L}_2 (нормали к плоскостям симметрии);

б) гексагональную сингонию можно подразделить на две подсингонии — тригональную с главной осью L_3 и \underline{L}_3 и гексагональную с главной осью L_6 и \underline{L}_6 .

III. ВЫСШАЯ КАТЕГОРИЯ ($a = b = c$)

Эквивалентность координатных осей предполагает существование хотя бы одной оси 3-го порядка, равнонаклонной к координатным осям, а следовательно, и равенство осевых углов α , β и γ . Рассмотрим две возможности:

$$1. \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

В этом случае ось L_3 будет единственной осью высшего порядка, поэтому эквивалентные направления, вдоль которых выбраны координатные оси, не могут быть особыми направлениями, если только они не образуют с L_3 угол, равный 90° . Выбрав координатные оси, как было принято, по особым направлениям, придем к только что рассмотренному в средней категории случаю — к гексагональной сингонии.

$$2. \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

В прямоугольной системе с эквивалентными координатными осями через каждую пару противоположных октантов пройдут оси 3-го порядка ($4L_3$), равнонаклонные к координатным осям, совпадающим либо с $3L_4$, либо с $3\underline{L}_4$, либо с $3L_2$.

Таким образом, в высшей категории оказывается лишь одна координатная система и одна сингония — кубическая: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

Итак, если классы распределять по сингониям в соответствии с координатными системами, естественно выделять шесть сингоний:

⁸ Особенность гексагональной сингонии — три эквивалентных направления в горизонтальной плоскости — позволяет в случае надобности вводить третью горизонтальную координатную ось — U (установка Бравэ).

I. Низшая категория ($a \neq b \neq c$)

1. Триклинная сингония — $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ ($\neq 120^\circ$).
2. Моноклинная сингония — $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$ ($\neq 120^\circ$) или $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$ ($\neq 120^\circ$).
3. Ромбическая сингония — $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

II. Средняя категория ($a = b \neq c$)

4. Тетрагональная сингония — $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.
5. Гексагональная сингония — $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$.

III. Высшая категория ($a = b = c$)

6. Кубическая сингония — $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

§ 7. Международные обозначения классов симметрии (символы Германа—Могена)

Очень простая и наглядная символика Бравэ, с которой мы имели дело до сих пор, не является, однако, общепринятой, так как, несмотря на громоздкость, формулы Бравэ все же не отражают всех операций данного класса (см. стр. 27), а кроме того, их нельзя использовать для описания симметрии кристаллических структур.

Кроме символов Шенфлиса, рассмотренных выше, в настоящее время широко используют так называемые международные обозначения (символы Германа — Могена). Их преимущество — краткость и точная привязка к координатным системам.

На позициях международного символа (их может быть 3, 2 или 1) записывают обозначения неэквивалентных особых направлений. Если особое направление совпадает одновременно и с нормалью к плоскости симметрии и с осью симметрии, то в символ вписывается лишь обозначение плоскости симметрии. Исключение составляет главная ось в классах средней категории и ось, которую нельзя считать порожденной двумя плоскостями. В таких случаях символ имеет форму дроби, числитель которой относится к оси, а знаменатель — к плоскости симметрии. Под буквой m , которая обозначает плоскость симметрии, в символе всегда подразумевают особое направление этой плоскости, т. е. ее нормаль.

В ромбической сингонии три позиции символа связаны соответственно с особыми направлениями вдоль координатных осей X , Y и Z ($L_2 2P = mm2 = m2m = 2mm$)⁹.

Символ класса моноклинной сингонии имеет лишь одну позицию, не отражая, с какой из координатных осей, Y или Z , связано единственное особое направление; чтобы показать это, можно

⁹ Очевидно, что символы $m2m$ и $2mm$ отвечают нестандартным для ромбической сингонии установкам: в первом случае поворотная ось идет вдоль оси Y , во втором — вдоль оси X .

на позиции, не занятые особыми направлениями, поставить единицы — оси 1-го порядка $(L_2PC = \frac{2}{m} = 1 \frac{2}{m} 1 \text{ или } 11 \frac{2}{m})$.

В триклинной сингонии особых направлений нет; в символ вписывают ось 1-го порядка, поворотную или инверсионную ($L_1=1, \bar{L}_1=\bar{\Phi}_2=C=\bar{1}$).

В сингониях средней категории на 1-й позиции стоит особое направление, совмещенное с осью Z , — главное координатное направление, на 2-й — особое направление, совмещенное с осью $X(=Y=U)$, — побочное координатное направление, на 3-й — особое направление, образующее с побочным координатным углом $\alpha/2$. Для осей 4 и $\bar{4}$ ($=4$) $\alpha/2=45^\circ$, и эти направления называют диагональными, для осей 6 и $\bar{6}$ ($=3$) $\alpha/2=30^\circ$ — апофемальными ($L_4L_2=422, L_66P=6mm$). Для осей 3 и $\bar{3}$ ($=\bar{6}$) $\alpha/2=60^\circ$, а так как все направления, образующие между собой углы в 60° , в данном случае эквивалентны, 3-я позиция в символе пустует ($L_33P=3m$).

В кубической сингонии четверка осей L_3 , обозначаемая цифрой 3, занимает 2-ю позицию, на 1-й стоят координатные ($X=Y=Z$) особые направления (4, $\bar{4}$, 2), на 3-й — диагональные, т. е. проходящие по биссектрисе углов между координатными осями ($3L_4 4L_3 6L_2=432$).

Таким образом, в международных символах записывают в основном порождающие элементы симметрии, предпочитая считать таковыми плоскости симметрии. Из сложных осей здесь используют лишь инверсионные оси, причем, если инверсионная ось не «перекрывается» поворотной того же порядка, ее обязательно надо фиксировать (не $3/m$, а $\bar{6}$).

КВАДРАТЫ КЕЙЛИ

Нетрудно увидеть, что даже самая подробная форма обозначения классов симметрии (система Бравэ), вполне достаточная для характеристики симметрии кристалла, не отражает полностью все симметрические операции соответствующего класса. Так, не учитываются правые и левые повороты вокруг осей симметрии, не записываются оси симметрии, операции которых «перекрываются» операциями осей более высоких порядков.

Общее число симметрических операций точечной группы (класса) определяет ее порядок; он соответствует числу граней общего положения, связанных операциями симметрии этой группы. Так, на рис. 12 изображена проекция класса $4/m$ и фигурка, размноженная операциями этого класса. Фигурка повторяется 8 раз, следовательно, число симметрических операций этого класса — его порядок — равно 8. Перечислим эти операции:

1. $a \rightarrow b = 4^1$ (совмещение фигурки a с фигуркой b = поворот на 90° по часовой стрелке).
2. $a \rightarrow e = 4^2 = 2$ (поворот на 180°).
3. $a \rightarrow z = 4^3 = 4^{-1}$ (поворот на 270° по часовой стрелке или на 90° против часовой стрелки).

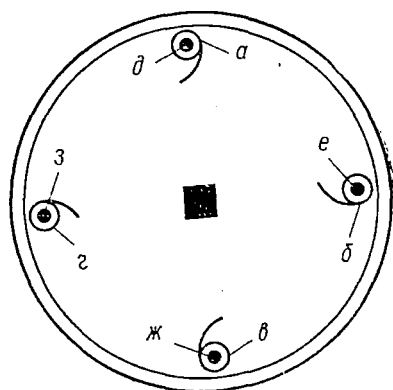


Рис. 12. Стереограмма класса $4/m$ (черная точка в центре кружка означает, что под фигурой находится такая же, но обращенная к читателю своей изнанкой)

Таблица

1	4^1	2	4^{-1}	m	$\overset{\circ}{4}$	$\bar{1}$	$\bar{4}$
4^1	2	4^{-1}	1	$\overset{\circ}{4}$	$\bar{1}$	$\bar{4}$	m
2	4^{-1}	1	4	$\bar{1}$	$\bar{4}$	m	$\overset{\circ}{4}$
4^{-1}	1	4	2	$\bar{4}$	m	$\overset{\circ}{4}$	$\bar{1}$
m	$\overset{\circ}{4}$	$\bar{1}$	$\bar{4}$	1	4	2	4^{-1}
$\overset{\circ}{4}$	$\bar{1}$	$\bar{4}$	m	4	2	4^{-1}	1
$\bar{1}$	$\bar{4}$	m	$\overset{\circ}{4}$	2	4^{-1}	1	4
$\bar{4}$	m	$\overset{\circ}{4}$	$\bar{1}$	4^{-1}	1	4	2

4. $a \rightarrow d = m$ (отражение в горизонтальной плоскости m_2).
5. $a \rightarrow e = \overset{\circ}{4} = \bar{4}^{-1}$ (зеркальный поворот на 90° по часовой стрелке или инверсионный на 90° в противоположном направлении).

6. $a \rightarrow ж = i (= \bar{1})$ (инверсия в точке).

7. $a \rightarrow з = \bar{4}^1 = \bar{4}^{-1}$ (инверсионный поворот по часовой стрелке на 90° или зеркальный на 90° в противоположном направлении).

8. $a \rightarrow a = 1$ (операция тождественности или идентичности).

Чтобы узнать строй группы симметрии, т. е. найти произведения всех пар симметрических операций данной группы, удобно воспользоваться квадратной таблицей умножения — построить так называемый квадрат Кейли (см. таблицу). Операции симметрии записываются в верхней горизонтальной строке и в первом вертикальном столбце квадрата. Произведение операций находится на пересечении вертикального столбца с соответствующей горизонтальной строкой.

СИМВОЛЫ ГРАНЕЙ И РЕБЕР КРИСТАЛЛОВ. ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

§ 1. Пространственная решетка кристалла. Закон постоянства углов и закон симметрии

Основная особенность кристаллического состояния заключается в трехмерной периодичности расположения материальных частиц. Простейшей симметрической операцией, которая совмещает друг с другом эквивалентные точки кристаллического пространства (мыслимого бесконечным), т. е. приводит всю кристаллическую структуру в самосовмещение, служит перенос, поступание — трансля-

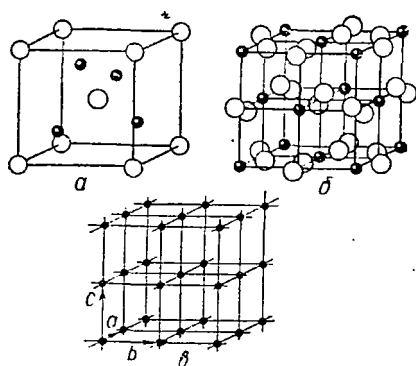


Рис. 13. Структуры куприта Cu_2O (а), пирита FeS_2 (б), их пространственная решетка (в)

ция, шаг симметрии. Геометрическим образом — элементом симметрии, — задающим и осуществляющим такую трансляционную повторяемость в трех некопланарных направлениях, будет параллелепipedальная сетка — пространственная решетка (рис. 13). К понятию решетчатого строения кристалла (по В. И. Вернадскому и Н. В. Белову) достаточно непринужденно приводит анализ одного из основных свойств кристалла — его одно-

родности в современном ее понимании, т. е. с учетом дискретности материи. Однородным нужно считать такое тело, в котором вокруг любой его точки на конечных расстояниях найдутся точки, эквивалентные первой не только в физическом отношении, но и в геометрическом, т. е. находящиеся в таком же окружении, как и первая точка. Пусть наше внимание привлекла некоторая исходная, «нулевая» точка кристаллического пространства (рис. 14, а).

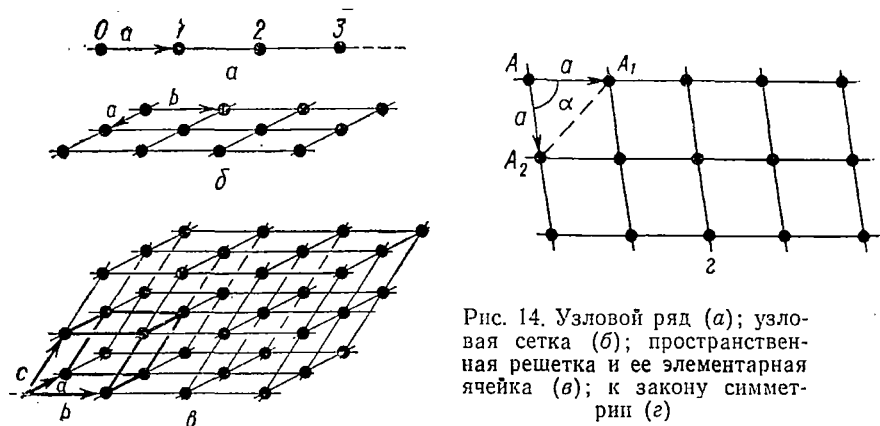


Рис. 14. Узловой ряд (а); узловая сетка (б); пространственная решетка и ее элементарная ячейка (в); к закону симметрии (г)

На кратчайшем расстоянии $a = a_{\text{мин}}$ от этой точки находим точку 1, эквивалентную выбранной, т. е. такую, на расстоянии a от которой в направлении вектора \vec{a} должна находиться аналогичная точка 2. Продолжая рассуждение ($0 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow \dots$), получим прямолинейный ряд (шеренгу) эквивалентных точек («узлов») с одинаковыми расстояниями между ними, причем между членами этого ряда невозможны дополнительные аналогичные точки. В некотором другом направлении (\vec{b} , рис. 14, б), не параллельном вектору \vec{a} , эквивалентные точки также выстроятся в другую шеренгу с межузловым расстоянием $b \geq a$, и эти два непараллельных узловых ряда определят собой бесконечную плоскую сетку — узловую сетку. Легко доказывается, что внутри петли сетки невозможна еще одна аналогичная точка. Приняв во внимание и третье направление — вектор $\vec{c} \geq \vec{b} \geq \vec{a}$, получим трехмерную сетку также с пустыми ячейками — «пространственную решетку» (рис. 14, в). Таким образом, кристаллическим, т. е. математически чистым, однородным веществом следует считать такое, в котором материальные частицы (или другие особые точки, например середины векторов между двумя частицами) расположены по закону пространственной решетки. Все остальные характеристики кристалла, входящие в его классическое определение — твердость, анизотропность, способность самоограняться,—легко выводятся, оказываются следствием его «решетчатого» строения.

Пространственная решетка позволяет достаточно просто объяснить такие давно признанные принципы кристаллографии, как закон постоянства углов (закон Стенона — Ломоносова — Ромэ-Деллиля) и закон симметрии.

Действительно, поскольку размещением матеряальных частиц в кристаллическом пространстве «управляет» пространственная решетка, можно считать, что грань кристалла — это материализованная узловая сетка, а ребро — материализованный узловой ряд. Взаимное расположение граней и ребер кристалла, таким образом, соответствует взаимному расположению узловых сеток и рядов пространственной решетки, а значит, постоянно для данного вещества, не зависит от случайных изменений условий кристаллизации (неравномерного питания, температуры и др.).

Отсутствие в кристаллах осей симметрии 5-го и выше 6-го порядков (закон симметрии) также хорошо объясняется «решетчатый» строением кристалла, «вмешательством» пространственной решетки. Не повторяя общеизвестных доказательств этого положения, приводим здесь предложенное Н. В. Беловым, выгодно отличающееся от других своей общностью и тем, что оно выявляет и подчеркивает некоторые интересные особенности кристаллической пространственной решетки.

Доказательство разбиваем на два этапа.

1. Установим минимальный угол между эквивалентными узловыми рядами и максимальный порядок оси симметрии.

Пусть два пересекающихся в точке A узловых ряда (рис. 14, z) определяются одним и тем же межузловым расстоянием, минимальным для данной пространственной решетки ($a = a_{\text{мин}}$). Тогда в треугольнике AA_1A_2 сторона A_1A_2 должна быть либо равна, либо больше a ($A_1A_2 \geq a$), а следовательно, $\angle a \geq 60^\circ$. Значит, если мы узел A берем на оси L_n , которая перпендикулярна к узловой сетке, построенной на рядах $AA_1\dots$ и $AA_2\dots$, то порядок оси не может превышать шести ($n \leq 6$).

2. Установим допустимые порядки кристаллографических осей симметрии.

Любая узловая сетка всякой пространственной решетки представляет собой параллелограмматическую сетку, а следовательно, как в этом нетрудно убедиться по рис. 14, $b, в, г$, обладает осевой симметрией 2-го порядка. Если в кристалле есть ось нечетного порядка ($L_{n=2k+1}$), то узловая сетка такого кристалла, перпендикулярная к этой оси, будет иметь симметрию четного (второе большего) порядка как результат взаимодействия оси $L_{n=2k+1}$ с параллельной ей осью 2-го порядка, присущей каждой сетке:

$$L_{n=2k+1} \cdot L_2 = L_{2n=4k+2}.$$

Следовательно, если предположить, что в кристалле имеется ось симметрии 5-го порядка ($n < 6!$), то окажется, что плоская сетка, перпендикулярная этой оси, должна иметь симметрию 10-го порядка, что противоречит только что доказанному ($n \leq 6$).

Таким образом, пространственная решетка кристалла допускает оси симметрии лишь следующих порядков: $n=1, 2, 3, 4, 6$.

§ 2. Символы узловых сеток (граней) кристалла

Для математической интерпретации взаимного расположения граней и ребер кристалла можно воспользоваться их схемами — узловыми сетками и узловыми рядами пространственной решетки. Положение каждой узловой сетки (граней) может быть зафиксиро-

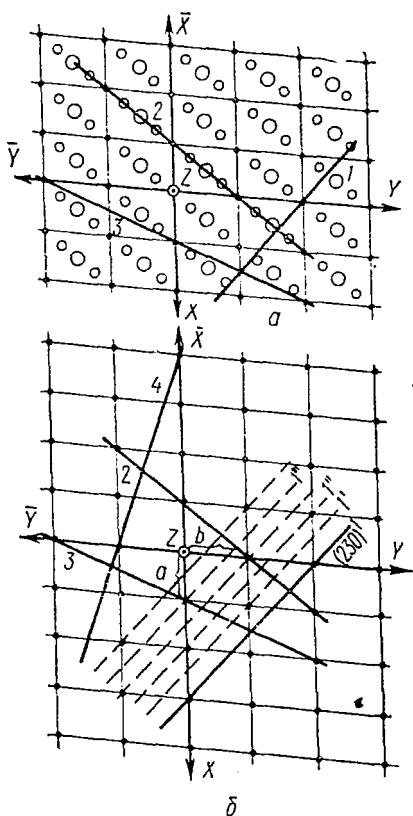


Рис. 15. Определение символов узловых сеток (граней) кристалла:
 $a-1, 2, 3$ —линии пересечения граней кристалла (узловых сеток) с плоскостью XU структуры; b — то же с плоскостью XU пространственной решетки

вано отрезками (параметрами), отсекаемыми данной сеткой на трех рядах решетки, принятых за оси координат X, Y и Z . Ряды решетки, выбираемые за координатные оси, должны, если это возможно, совпадать с особыми направлениями кристалла — осями симметрии или нормальными к плоскостям симметрии. За единицы измерения удобно выбирать отрезки a, b, c — промежутки ряда или периоды повторяемости (идентичности) по координатным

осям¹⁰. Нетрудно показать, что вдоль особых направлений периоды идентичности короткие, хотя и не обязательно кратчайшие.

Так, положение плоской сетки 1, параллельной оси Z (рис. 15), определяется параметрами $3a$ (по оси X) и $2b$ (по оси Y); плоской сетки 2 — параметрами a и b . «Закон решетки» требует, чтобы сетки, параллельные данной, — сетки одного семейства — проходили через каждый узел решетки. Из рис. 15 очевидно, что все эти сетки пересекают координатные оси в одинаковом отношении. Действительно, сетки 1, 1', 1'', 1''' отсекают на осях X , Y и Z следующие отрезки в долях a , b , c :

сетка	X	Y	Z
1	3 единицы	2 единицы	∞
1'	$2\frac{1}{2}$ »	$1\frac{2}{3}$ »	∞
1''	2 »	$1\frac{1}{3}$ »	∞
1'''	1 »	$\frac{2}{3}$ »	∞

Положение всего семейства параллельных сеток, а следовательно, и определяемой им грани кристалла, однозначно выражается отношением их параметров, измеренных соответствующими промежутками рядов:

$$3 : 2 : \infty = \frac{5}{2} : \frac{5}{3} : \infty = 2 : \frac{4}{3} : \infty = \\ = 1 : \frac{2}{3} : \infty = p : q : r,$$

где p , q , r — целые взаимно простые числа (параметры Вейса). В аналитической геометрии ради удобства (ноль вместо бесконечности) предпочитают пользоваться отношением обратных (также целочисленных) величин — h , k , l — индексов Миллера. Три индекса, записанные без знаков отношений в круглых скобках, представляют символ грани (hkl).

Из рис. 15 следует, что символ семейства узловых сеток 1 (грани 1) определится как (230) , так как

$$\frac{1}{3} : \frac{1}{2} : \frac{1}{\infty} = 2 : 3 : 0.$$

Легко видеть, что символы граней 2 — $(\bar{1}10)$, 3 — $(2\bar{1}0)$ и 4 — (140) .

¹⁰ Параллелепипед, построенный на векторах \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , называют элементарной ячейкой пространственной решетки, а величины a , b , c и углы между координатными осями (осевые углы) $\alpha(\widehat{YZ})$, $\beta(\widehat{XZ})$ и $\gamma(\widehat{XY})$ — константами (параметрами) решетки, ее репером (см. рис. 14).

Все сказанное нетрудно перевести на язык аналитической геометрии. Действительно, плоскость (грань, узловая сетка) определяется уравнением вида

$$AX + BY + CZ = D. \quad (1)$$

Заменяя грань кристалла узловой сеткой, проходящей через начало координат параллельно грани, можем воспользоваться уравнением вида

$$AX + BY + CZ = 0. \quad (2)$$

Кроме начала координат такая сетка проходит и через другие узлы пространственной решетки. Выбрав два из них — $(X_1Y_1Z_1)$ и $(X_2Y_2Z_2)$, не лежащих на одной прямой с началом координат, можем записать

$$\left. \begin{aligned} AX_1 + BY_1 + CZ_1 &= 0, \\ AX_2 + BY_2 + CZ_2 &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} X_1 &= x_1a, & Y_1 &= y_1b, & Z_1 &= z_1c, \\ X_2 &= x_2a, & Y_2 &= y_2b, & Z_2 &= z_2c, \end{aligned}$$

причем $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$ — целые числа, а a, b и c — масштабные единицы (периоды повторяемости) по соответствующим координатным осям.

Подставив значения координат двух узлов в систему (3), получим

$$\left. \begin{aligned} Aax_1 + Bby_1 + Ccz_1 &= 0, \\ Aax_2 + Bby_2 + Ccz_2 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Совместное решение уравнений (4), выраженное через определители, позволяет найти отношение их коэффициентов:

$$Aa : Bb : Cc = \begin{vmatrix} y_1z_1 \\ y_2z_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} z_1x_1 \\ z_2x_2 \end{vmatrix} : \begin{vmatrix} x_1y_1 \\ x_2y_2 \end{vmatrix}.$$

Так как определители, составленные из целых чисел, суть целые числа, можно записать

$$Aa = hm; \quad Bb = km; \quad Cc = lm,$$

где h, k, l — целые взаимно простые числа; m — общий множитель.

Таким образом, уравнение плоскости $AX + BY + CZ = 0$ в его кристаллографическом выражении (для узловой сетки) имеет вид

$$hx + ky + lz = 0. \quad (5)$$

Узловые сетки, параллельные сетке, проходящей через начало координат, имеют уравнение вида

$$hx + ky + lz = p,$$

где p — целое число. Наименьшему p — единице — отвечает сетка, которая, как нетрудно увидеть, будет ближайшей к началу координат:

$$hx + ky + lz = 1.$$

Записав это уравнение иначе:

$$\frac{x}{1/h} + \frac{y}{1/k} + \frac{z}{1/l} = 1,$$

получим уравнение плоскости (в данном случае — узловой сетки) в отрезках. Следовательно, $1/h$, $1/k$ и $1/l$ — это отрезки, отсекаемые на осях координат ближайшей к началу узловой сеткой, измеренные периодами повторяемости a , b и c . Нетрудно показать, что вторая, третья и т. д. сетки отсекут на осях отрезки, равные соответственно

$$\frac{2a}{h}, \frac{2b}{k}, \frac{2c}{l}; \frac{3a}{h}, \frac{3b}{k}, \frac{3c}{l} \text{ и т. д.}$$

Таким образом, 1) коэффициенты уравнения $hx + ky + lz = 0$ — не что иное, как миллеровские индексы сетки (границ); 2) семейство узловых сеток, параллельных грани с символом (hkl) , делит ребра a , b , c примитивной элементарной ячейки соответственно на h , k и l частей (см. рис. 15).

§ 3. Символы узловых рядов (ребер) кристалла

В кристалле, где все параллельные направления идентичны друг другу, узловой ряд, проходящий через начало координат,

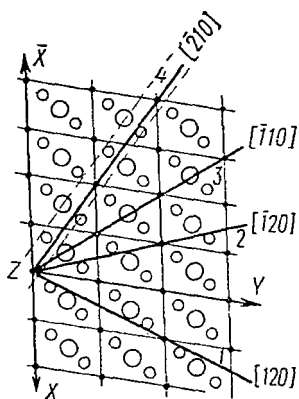


Рис. 16. Определение символов узловых рядов (ребер) кристалла

характеризует все данное семейство рядов. Следовательно, для определения положения узлового ряда (или ребра кристалла) до-

статочно координаты x , y и z одной его точки (узла) измерить периодами повторяемости a , b , c по соответствующим осям $\left(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c}\right)$ и взять отношение полученных величин. Это отношение, приведенное к отношению целых взаимно простых чисел r , s , t , записывают в квадратных скобках и называют символом ребра $[rst]$ ¹¹ (рис. 16).

§ 4. Закон Гаюи. Определение символов граней и ребер кристаллических многогранников

Все изложенное выше составляет сущность известного закона рациональности двойных отношений параметров

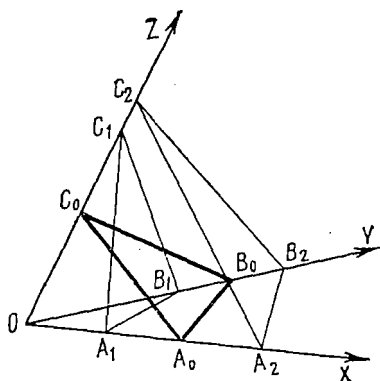


Рис. 17. К закону рациональности двойных отношений параметров (закону Гаюи)

ров — закона рациональности индексов, сформулированного Гаюи в 1783 г. на основании изучения лишь внешней формы кристаллов; двойные отношения параметров двух любых граней кристалла равны отношению целых наибольших взаимно простых чисел.

Так, если грань A_1, B_1, C_1 (рис. 17) отсекает на координатных осях кристалла параметры OA_1, OB_1, OC_1 , а грань A_2, B_2, C_2 — OA_2, OB_2, OC_2 , то

$$\frac{OA_1}{OA_2} : \frac{OB_1}{OB_2} : \frac{OC_1}{OC_2} = m : n : p,$$

где m, n, p — целые и для реальных кристаллов сравнительно небольшие числа. Одну из граней, пересекающую три координатные оси (например, A_0, B_0, C_0), можно принять за исходную (параметрическую) и ее параметры считать единицами измерения по соответ-

¹¹ Часто предпочитают говорить не о символе отдельного ребра, а о символе оси зоны (или просто о символе зоны). Зонай, или поясом, кристалла называют совокупность граней, пересекающихся по параллельным ребрам. Грань одной зоны можно называть таутозональной.

ствующим осям для всех остальных граней и ребер данного кристалла¹².

Для нахождения символа некоторой грани отрезки, отсекаемые ею на координатных осях, измеряют отрезками параметрической грани по соответствующим осям. Взяв отношения обратных величин и избавившись от дробей, получим символ данной грани. Так, символ грани $A_1B_1C_1$ (рис. 17) определится следующим образом:

$$\frac{OA_1}{OA_0} : \frac{OB_1}{OB_0} : \frac{OC_1}{OC_0} = p : q : r,$$

$$\frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r} = h : k : l$$

или сразу

$$\frac{OA_0}{OA_1} : \frac{OB_0}{OB_1} : \frac{OC_0}{OC_1} = h : k : l \rightarrow (hkl).$$

Достаточно очевидно, что символ параметрической грани — (111)¹³, отсюда другое ее название — «единичная».

Для определения символа некоторого ребра надо координаты любой его точки измерить соответствующими параметрами единичной грани и взять отношение полученных величин:

$$\frac{x}{OA_0} : \frac{y}{OB_0} : \frac{z}{OC_0} = r : s : t \rightarrow [rst].$$

Итак, закон Гаюи, устанавливая зависимость во взаимном расположении граней (и ребер) кристалла, позволяет, выбрав координатные оси и параметрическую грань, получать возможные грани и ребра кристалла заданием плоскостей и направлений с рациональными индексами.

§ 5. Единичная грань в кристаллах разных сингоний

Запись (111) в общем случае отнюдь не означает равенства параметров единичной грани: единицы в символе указывают лишь, что параметры именно этой грани выбраны за относительные единицы измерения параметров всех остальных граней (и ребер) данного кристалла.

¹² Если параметрическую грань удалось выбрать так, что ее параметры a, b, c оказались пропорциональными параметрам элементарной ячейки, то отношение $a : b : c$ может служить характеристикой кристалла. Обычно одну из величин этого отношения (b) приравнивают к единице и пять констант — $\left(\frac{a}{b} : 1 : \frac{c}{b}\right) = a_0 : 1 : c_0$ и α, β, γ — называют геометрическими константами, или элементами (параметрами), кристалла.

¹³ О единичной грани в гексагональной сингонии см. стр. 41.

В кубической сингонии координатные оси связаны равнонаклонной к ним осью 3-го порядка, поэтому они равномасштабны и три единицы измерения одинаковы: $a=b=c$, т. е. единичная грань отсекает равные отрезки по всем трем координатным осям. На стереограмме проекция такой грани занимает строго определенную позицию — на выходе оси 3-го порядка.

В средней категории поворотом вокруг главной оси симметрии связаны лишь горизонтальные координатные оси, поэтому $a=b \neq c$ и запись (111) говорит о равенстве лишь двух первых параметров. На стереограмме единичная грань располагается на биссектрисе угла между горизонтальными координатными осями.

В сингониях нижней категории координатные оси не эквивалентны друг другу, поэтому параметры единичной грани по всем трем осям различны ($a \neq b \neq c$) и за единичную грань здесь можно принять любую грань, пересекающую все три оси.

§ 6. «Четвертый» индекс в гексагональной сингонии

В гексагональной системе, как уже упоминалось, в горизонтальной плоскости располагаются три эквивалентных направления, и, хотя для однозначного определения положения грани или ребра кристалла достаточно лишь осей X, Y, Z , иногда бывает полезна и четвертая (горизонтальная) ось U (координатная система Бравэ)¹⁴; так, тройка горизонтальных осей (X, Y, U) упрощает операции размножения граней и ребер (точек) главной осью 3-го или 6-го порядков и позволяет подчеркнуть единство любых элементов огранения кристалла, связанных главной осью. Однако дополнительный — четвертый — индекс в символе неудобен при математических расчетах, и его обычно удаляют по правилам, различным для граней и ребер (точек).

Рис. 18, показывает, что в символе любой грани сумма индексов по трем эквивалентным осям равна нулю, т. е. $h+k=\bar{i}$, и поэтому переход от четырехзначного символа грани к трехзначному и обратно особенно прост. В первом случае индекс i вычеркивают, во втором — вводят как сумму первых двух индексов с обратным знаком:

$$(hkil) \rightarrow (hkl); \quad (hkl) \rightarrow (h k h \bar{k} l).$$

Соответствующие переходы для символов ребер несколько сложнее. Очевидно, что вычеркнуть один индекс из четырехзначного символа ребра, т. е. просто приравнять одну из координат точки на ребре нулю, нельзя, так как это изменит его направление.

¹⁴ Трехосная система Миллера, в которой три эквивалентные координатные оси направлены под углом $\alpha \neq 90^\circ \neq 120^\circ$ друг к другу, здесь не рассматривается. Взаимные переходы между этими системами разобраны в задаче X.

Из рис. 19 видно, что изъять лишний индекс можно, если величину, обращающую его в нуль, добавить ко всем трем первым индексам символа:

$$[rswt] = [r - \omega \quad s - \omega \quad \omega - \omega \quad t] = [r - \omega \quad s - \omega \quad 0 \quad t] = \\ = [r - \omega \quad s - \omega \quad t] = [r's't'].$$

Обратный переход:

$$[r's't'] = [r's'0t'] = [r'+f \quad s'+f \quad f \quad t'],$$

где f — любое число, поэтому одному и тому же трехзначному символу $[r's't']$ будет отвечать бесчисленное множество четырех-

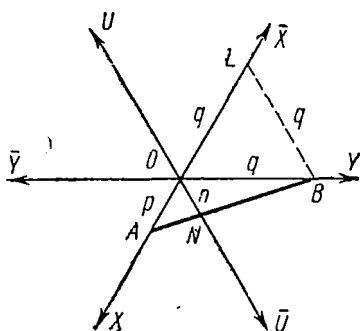


Рис. 18. К теореме $h+k=\bar{i}$.

AB — линия пересечения грани $(hkil)$ с плоскостью осей XYU .

По построению $BL \parallel OU$,
 $\triangle ABL \sim \triangle ANO$, отсюда

$$\frac{p+q}{p} = \frac{q}{n}; \quad \frac{p+q}{pq} = \frac{q}{nq};$$

$$\frac{1}{q} + \frac{1}{p} = \frac{1}{n},$$

или

$$\left| \frac{1}{\vec{p}} \right| + \left| \frac{1}{\vec{q}} \right| = \left| \frac{1}{\vec{n}} \right|;$$

$$\frac{1}{\vec{p}} + \frac{1}{\vec{q}} = - \frac{1}{\vec{n}};$$

тогда $h+k=\bar{i}$

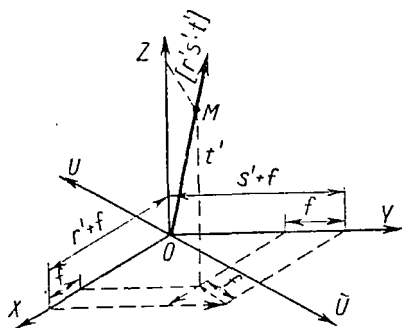
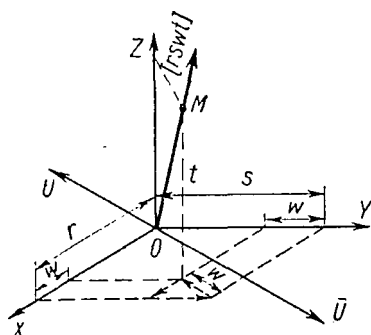


Рис. 19. Взаимные переходы между трехзначным и четырехзначным символами ребра

значных, и, чтобы сделать такой символ определенным, придется вводить какое-либо дополнительное условие. Так, если по аналогии с гранями в символе $[r'+f \quad s'+f \quad f \quad t']$ сумму первых трех

индексов приравнять к нулю¹⁵ (хотя в данном случае это геометрически и не оправдано), тогда $f = -\frac{r'+s'}{3}$ и

$$[r's't'] = \left[\frac{2r'-s'}{3} \quad \frac{2s'-r'}{3} \quad \frac{-(r'+s')}{3} \quad t' \right] = \\ = [2r'-s' \quad 2s'-r' \quad -(r'+s') \quad 3t'] = [rs\omega t].$$

Следует отметить, что после отбрасывания знаменателя индексы ребра перестают быть координатами избранной точки (M на рис. 19), так как она сместится вдоль ребра, однако само ребро не изменит своего направления.

Примеры использования третьей горизонтальной оси в гексагональной сингонии приведены на рис. 20, а и б.

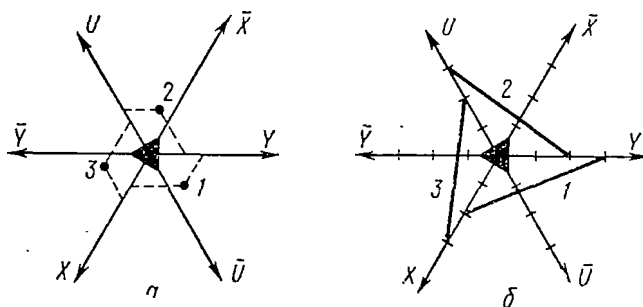


Рис. 20. Поворот вокруг оси Z_3
 а) ребра (точки): 1. $[2301] \rightarrow 2. [0231] \rightarrow 3. [3021] = [23 \cdot 1] \rightarrow$
 $[31 \cdot 1] \rightarrow [1\bar{2} \cdot 1]$; б) грани: 1. $(32\bar{5}1) \rightarrow 2. (\bar{5}321) \rightarrow 3. (2\bar{5}31) =$
 $= (32 \cdot 1) \rightarrow (\bar{5}3 \cdot 1) \rightarrow (2\bar{5} \cdot 1)$

Чтобы не путать четырехосную установку Бравэ с трехосной Миллера, в трехзначные символы Бравэ можно вставлять точку.

При этом $(hk \cdot l) = (hk \ h+k \ l)$, $a[rs \cdot t] = [rs\omega t]$.

Введение дополнительной горизонтальной оси позволяет выбрать единичную грань в гексагональной сингонии двумя способами: она должна отсекал равные отрезки либо на осях $X\bar{Y}$, либо на осях $X\bar{U}$. Символ грани в первом случае $(11\bar{2}1)$, во втором — $(10\bar{1}1)$ ¹⁶.

¹⁵ На практике удобнее приравнять дополнительный индекс к нулю.

¹⁶ Определяя символы граней кристаллов гексагональной сингонии, рекомендуется сначала не обращать внимания на «лишнюю» ось U , не забывая, однако, вставлять индекс по этой оси (или точку) в окончательный ответ: $(hkl) = (hk \ h+\bar{k} \ l)$ или $(hk \cdot l)$.

§ 7. Индексирование кристаллов, не имеющих грани, способной служить единичной

В кубической сингонии единичная грань отсекает одинаковые отрезки по всем трем координатным осям, поэтому величины параметров единичной грани не «входят» в значения символов остальных граней. Таким образом, для определения символа грани кубического кристалла надо лишь в любых единицах измерить отрезки, отсекаемые этой гранью на координатных осях, и взять отношение обратных величин:

$$h : k : l = \frac{OA_0}{OA} : \frac{OB_0}{OB} : \frac{OC_0}{OC} = \frac{1}{OA} : \frac{1}{OB} : \frac{1}{OC}.$$

В средней категории таким образом можно поступать только для граней, параллельных оси Z . Для определения симво-

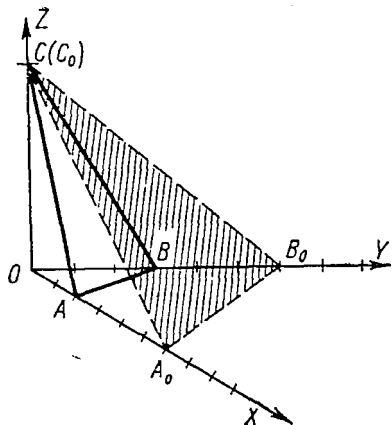


Рис. 21. Средняя категория. Определение символов граней кристаллов, не имеющих единичной грани:

а) определение символа масштабной грани (hkl) : $h : k = OB : OA = 3 : 2$. Символ масштабной грани $ABC - (321)$; б) определение единичных отрезков: $OA_0 (= OB_0) = OA \cdot h (= OB \cdot k) = 2 \times 3 (= 3 \times 2) = 6$, $OC_0 = OC$

лов остальных граней нужно одну из них, пересекающую вертикальную ось и хотя бы одну из горизонтальных, принять за масштабную.

Если масштабная грань пересекает лишь одну из горизонтальных осей, то, поскольку $OA_0 \neq OC_0$, ей присваивают символ (101) . Такая грань сразу даст относительные единицы измерения по горизонтальным ($OB_0 = OA_0$) и вертикальной (OC_0) осям.

Если масштабная грань пересекает обе горизонтальные оси (рис. 21), то ей придают максимально простой символ (hkl) , где

$$h : k = \frac{OA_0}{OA} : \frac{OB_0}{OB} = \frac{OA_0}{OA} : \frac{OA_0}{OB} = OB : OA.$$

Такая грань непосредственно даст единицу измерения лишь по оси Z ($OC = OC_0$), тогда как $OA_0 (= OB_0) = OA \cdot h = OB \cdot k$.

Действительно,

$$h : k : 1 = \frac{OA_0}{OA} : \frac{OA_0}{OB} : \frac{OC_0}{OC_0},$$

следовательно,

$$h : 1 = \frac{OA_0}{OA} : 1 \text{ и } k : 1 = \frac{OA_0}{OB} : 1,$$

откуда

$$OA_0 (= OB_0) = OA \cdot h = OB \cdot k.$$

Нелишне отметить, что в подобных случаях индекс $l=1$ следует вписывать в символ лишь после того, как отношение $h:k$ будет сведено к отношению целых чисел, иначе символ исходной — масштабной — грани окажется неоправданно усложненным, тогда на рис. 21 получим $1:2/3:1 \rightarrow (323)$.

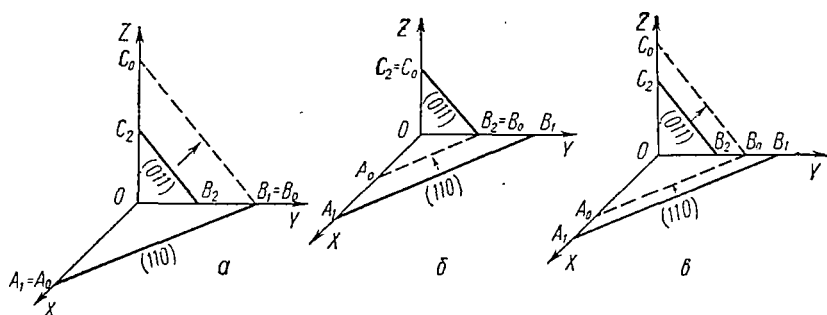


Рис. 22. Низшая категория. Вывод возможной единичной грани по двум двумерным:

$OA_1=8$ см, $OB_1=4$ см, $OB_2=2$ см и $OC_2=2,5$ см; а — $OA_0=OA_1$, $OB_0=OB_1$, $OC_0=OC_2 \cdot m$, где $m=OB_1/OB_2$, следовательно, $OC_0=5$ см, $OA_0:OB_0:OC_0=8:4:5$; б — $OB_0=OB_2$, $OC_0=OC_2$, $OA_0=OA_1 \cdot n$, где $n=OB_2/OB_1$, следовательно, $OA_0=4$ см, $OA_0:OB_0:OC_0=4:2:2,5$; в — $OA_0=OA_1 \cdot n'$, $OC_0=OC_2 \cdot m'$, где $n'=OB_0/OB_1$ и $m'=OB_0/OB_2$; $OA_0:OB_0:OC_0=2:1:1,25$ (на рис. — $6:3:3,75$)

В сингониях низшей категории масштабными могут быть лишь грани, пересекающие по две координатные оси, — грани типа (hko) , (hol) , (okl) ¹⁷; каждая из них дает относительные единицы измерения лишь по двум соответствующим осям, поэтому, чтобы получить относительные единицы измерения по всем трем осям (возможную единичную грань), две любые грани такого типа принимают за двумерные $\{(110)$ и (011) ; (110) и (101) или (101) и $(011)\}$. Мы имеем право так поступать, поскольку в сингониях низшей категории $OA_0 \neq OB_0 \neq OC_0$. Пусть за двумерные приняты грани (110) и (011) , тогда первая пересекает в таком же от-

¹⁷ Грани, параллельные двум координатным осям — (100) , (010) и (001) — не могут служить масштабными.

ношении, как возможная единичная, оси X и Y , а вторая — оси Y и Z : $\frac{OA_1}{OB_1} = \frac{OA_0}{OB_0}$ и $\frac{OB_2}{OC_2} = \frac{OB_0}{OC_0}$. Сведя эти два заданных отношения в одно ($OA_0:OB_0:OC_0$), получим относительные масштабы по всем трем осям¹⁸. Эту операцию удобно проследить на рис. 22. Действительно, параллельный перенос граней, не меняя их символов, позволяет уравнивать отрезки по той оси, которую пересекают обе грани, и получить таким образом относительные единицы измерения по всем трем осям. Естественно, что для определения символов граней, параллельных тем же осям, что и двуединичные, нет необходимости получать возможную единичную грань.

§ 8. Графическое определение символов и элементов кристалла. Закон Вейса

А. ЗАКОН ЗОН (ЗАКОН ВЕЙСА) МЕТОД РАЗВИТИЯ ЗОН

Символ грани и символ ребра, лежащего в ней (или, что то же самое — символ зоны и символ грани этой зоны), связаны следующей зависимостью: $hr + ks + lt = 0$. Ребро $[rst]$ принадлежит грани (hkl) , поэтому координаты любой его точки, измеренные параметрами единичной грани (r, s, t) , должны удовлетворять уравнению, определяющему эту грань: $hx + ky + lz = 0$.

Решая совместно два уравнения

$$\left. \begin{aligned} h_1 r + k_1 s + l_1 t &= 0, \\ h_2 r + k_2 s + l_2 t &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

можно определить символ ребра пересечения двух граней $(h_1 k_1 l_1)$ и $(h_2 k_2 l_2)$. Такие системы решают способом перекрестного умножения:

$$\left. \begin{array}{l} h_1 \left| \begin{array}{ccc} k_1 & l_1 & h_1 \\ \times & \times & \times \end{array} \right| l_1 \\ h_2 \left| \begin{array}{ccc} k_2 & l_2 & h_2 \\ \times & \times & \times \end{array} \right| l_2 \end{array} \right\} \quad (2)$$

$$r : s : t = (k_1 l_2 - k_2 l_1) : (h_2 l_1 - h_1 l_2) : (h_1 k_2 - h_2 k_1).$$

Таким же образом можно вычислить символ грани (hkl) , параллельной двум ребрам $[r_1 s_1 t_1]$ и $[r_2 s_2 t_2]$.

Итак, две грани определяют ребро (зону), два ребра — грань. Отсюда ясно, что возможные грани и ребра кристалла можно получить по четырем граням, не пересекающимся по параллельным

¹⁸ $\frac{OA_0}{OB_0} = \frac{OA_1}{OB_1} \cdot \frac{OB_2}{OB_2}$; $\frac{OB_0}{OC_0} = \frac{OB_2}{OC_2} \cdot \frac{OB_1}{OB_1}$, откуда

$$OA_0 : OB_0 : OC_0 = (OA_1 \cdot OB_2) : (OB_1 \cdot OB_2) : (OC_2 \cdot OB_1).$$

ребрам, или по четырем ребрам, три из которых не пересекаются в одной точке. Это положение известно как закон Вейса (1804), или закон зон (пбясов). Полезно отметить, что два геометрических закона кристаллографии — закон рациональности индексов Гаюи и закон зон Вейса — выражают по существу одно и то же: любой тетраэдр предопределяет возможные грани и ребра кристалла, причем три грани этого тетраэдра диктуют координатные оси, четвертая — параметрическую грань. Возможные грани и ребра кристалла по Гаюи получают, задавая плоскости и направления с рациональными индексами (арифметический способ), по Вейсу — задавая плоскости, параллельные двум пересекающимся ребрам, и направления, параллельные двум пересекающимся граням (геометрический способ).

На практике возможные грани и ребра по Вейсу удобно получать, пользуясь стереограммой. Действительно, дуга большого круга (меридиан сетки Вульфа), проходящая через две точки — гномостереографические проекции граней, представляет собой гномостереографическую проекцию ребра пересечения этих граней (иными словами — проекцию зоны этих граней). Обратное, две пересекающиеся дуги (два ребра, две зоны) определяют точку (грань)¹⁹.

Если необходимо определить символ какой-либо грани данного кристалла, нужно, нанеся четыре заданные и искомую грани на стереограмму, проводить зоны через грани с известными символами до тех пор, пока искомая грань не окажется на пересечении двух зон. Однако нет нужды каждый раз прибегать к промежуточному определению символов зон: можно пользоваться некоторыми полезными следствиями из соотношения $hr + ks + lt = 0$.

1. В символе любой грани, параллельной координатной оси, индекс, соответствующий этой оси, равен 0. Например, в символах граней, параллельных оси X , $h = 0$. Действительно, символ оси X — $[100]$, следовательно, $h \cdot 1 + k \cdot 0 + l \cdot 0 = 0$, т. е. $h = 0$.

Обратно, в символах зон, содержащих какую-либо координатную грань: (100) , (010) или (001) , нулю будут равны соответственно первый, второй или третий индексы. Так, для любой зоны, включающей грань (010) , $0 \cdot r + 1 \cdot s + 0 \cdot t = 0$, следовательно, $s = 0$.

2. Если грань $(h_3k_3l_3)$ принадлежит той же зоне, что и грани $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$, то определитель

$$\begin{vmatrix} h_3 & k_3 & l_3 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} = 0$$

¹⁹ Если точки — стереографические проекции направлений, то дуга, проходящая через них, — стереографическая проекция плоскости, параллельной этим направлениям; тогда точка пересечения двух дуг — стереографическая проекция ребра (зоны).

(условие таутозональности). Действительно, если грани $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ лежат в зоне $[rst]$, то из соотношения 2 (стр. 44) следует: $r = p(k_1l_2 - k_2l_1)$, $s = -p(h_1l_2 - h_2l_1)$ и $t = p(h_1k_2 - h_2k_1)$; если $(h_3k_3l_3)$ — грань той же зоны, то $h_3(k_1l_2 - k_2l_1) - k_3(h_1l_2 - h_2l_1) + l_3(h_1k_2 - h_2k_1) = 0$, что и выражено в условии таутозональности.

По аналогии с предыдущим
$$\begin{vmatrix} r_3 & s_3 & t_3 \\ r_1 & s_1 & t_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 \end{vmatrix} = 0$$
 — условие компланарности трех ребер.

3. Очевидно, что

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ mh_1 + nh_2 & mk_1 + nk_2 & ml_1 + nl_2 \end{vmatrix} = 0$$
 при любых значениях m и n ,

следовательно, грань, индексы которой могут быть представлены как $mh_1 + nh_2$, $mk_1 + nk_2$ и $ml_1 + nl_2$, лежит в одной зоне с гранями $(h_1k_1l_1)$ и $(h_2k_2l_2)$ — правило сложения.

Отсюда ясно, что грань, символ которой получен простым почленным сложением индексов двух других граней (т. е. $m=n=1$), принадлежит их зоне²⁰. Конкретное положение этой грани в зоне укажут две такие грани из другой зоны, сложение символов которых даст тот же результат.

Таким же образом, ребра $[r_1s_1t_1]$, $[r_2s_2t_2]$ и $[r_3s_3t_3]$ лежат в одной плоскости, если $[r_3s_3t_3] = m[r_1s_1t_1] + n[r_2s_2t_2]$.

4. Для всех граней зон, проходящих через грань (001), кроме самой грани (001), постоянно отношение h/k ; для зон, проходящих через грань (010), — h/l ; через грань (100) — k/l . Действительно, при

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h & k & l \end{vmatrix} = 0 \quad h_1 : k_1 = h : k;$$

при

$$\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h & k & l \end{vmatrix} = 0 \quad h_1 : l_1 = h : l$$

и при

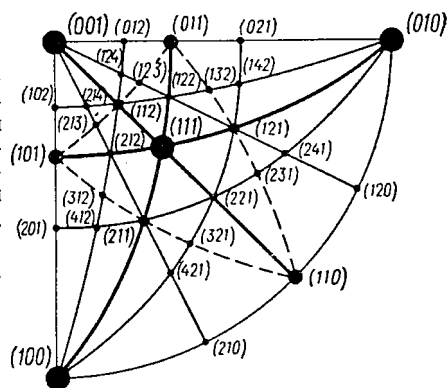
$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h & k & l \end{vmatrix} = 0 \quad k_1 : l_1 = k : l.$$

²⁰ Если две исходные грани принадлежат одной простой форме, то полученная при $m=n=1$ таутозональная грань называется притупляющей; будучи параллельной ребру пересечения этих граней, она равнонаклонна к ним.

Получая грани развитием зон из основного тетраэдра²¹, т. е. такого, который определяет координатные и единичную грани, следует во избежание ошибок каждую новую зону проводить через две грани с минимальной суммой индексов (рис. 23).

Рис. 23. Получение возможных граней кристалла развитием зон (поясов).

Зоны рекомендуется проводить в следующей последовательности: 1) через координатные грани — получим зоны координатных осей; 2) через единичную и координатные грани — получим двуединичные грани (011), (101), (110) (сокращенно \odot (011), где \odot — знак круговой перестановки); 3) через двуединичные грани — грани (112), (121), (211) (или \odot (112); 4) через грани \odot (112) и координатные — грани \odot (012) и \odot (021), \odot (212), \odot (312) и \odot (321) и \odot (412), и \odot (421); 5) через двуединичные грани и \odot (120), \odot (210) и т. д.



Обратная задача — определение положения грани (hkl) на стереограмме по четырем исходным граням — может быть решена, если соотношение, связывающее таутозональные грани (правило сложения), применять в «противоположном» направлении (правило расщепления).

Действительно, (hkl) можно представить как сумму различных пар — ($h_1k_1l_1$) и ($h'_1k'_1l'_1$), ($h_2k_2l_2$) и ($h'_2k'_2l'_2$), ($h_3k_3l_3$) и ($h'_3k'_3l'_3$) и т. д. Расщепив символ грани (hkl) двумя способами, найдем две такие зоны — [$(h_1k_1l_1)$ и ($h'_1k'_1l'_1$)] и [$(h_2k_2l_2)$ и ($h'_2k'_2l'_2$)], на пересечении которых лежит искомая грань. Такую операцию повторяют до тех пор, пока не приходят к граням с символами, составленными лишь из ± 1 и 0 (задача III).

При решении задач методом зон удобно пользоваться готовой стереограммой (см. приложение II), так как зональные соотношения не зависят от координатной системы (сингонии).

В. МЕТОД КОСИНУСОВ ВУЛЬФА

На рис. 24, а $A_0B_0C_0$ — единичная грань, $ON_0 \perp A_0B_0C_0$; λ_0 , μ_0 , ν_0 — углы, образованные нормалью ON_0 с координатными осями X , Y , Z (полярные углы). Из $\triangle ON_0A_0$, $\triangle ON_0B_0$ и $\triangle ON_0C_0$ следует:

$$\begin{aligned} OA_0 : OB_0 : OC_0 &= \frac{ON_0}{\cos \lambda_0} : \frac{ON_0}{\cos \mu_0} : \frac{ON_0}{\cos \nu_0} = \\ &= \frac{1}{\cos \lambda_0} : \frac{1}{\cos \mu_0} : \frac{1}{\cos \nu_0}. \end{aligned}$$

²¹ Если исходный тетраэдр не является основным, иногда приходится прибегать к изменению координатной системы (см. задачу XI).

Очевидно, что для другой грани $A_x B_x C_x$ того же кристалла

$$OA_x : OB_x : OC_x = \frac{1}{\cos \lambda_x} : \frac{1}{\cos \mu_x} : \frac{1}{\cos \nu_x},$$

где λ_x, μ_x, ν_x — ее полярные углы. Тогда для грани $A_x B_x C_x$ символ $(h_x k_x l_x)$ определится следующим образом (см. задачу IV):

$$h_x : k_x : l_x = \frac{OA_0}{OA_x} : \frac{OB_0}{OB_x} : \frac{OC_0}{OC_x} = \frac{\cos \lambda_x}{\cos \lambda_0} : \frac{\cos \mu_x}{\cos \mu_0} : \frac{\cos \nu_x}{\cos \nu_0}.$$

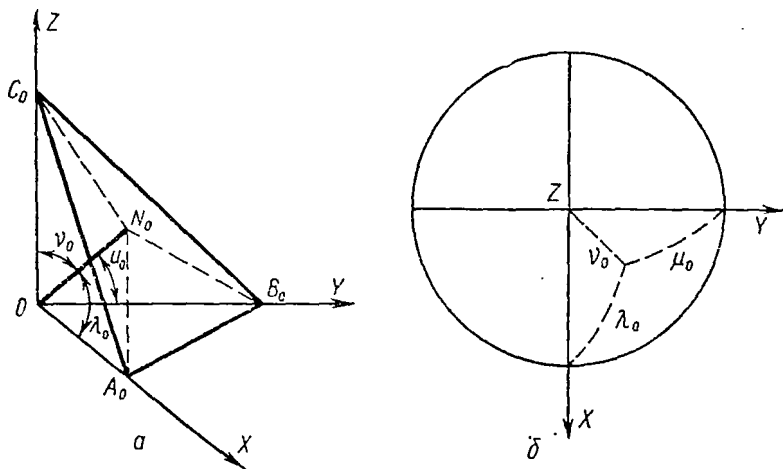


Рис. 24. К методу косинусов Вульфа

Если за исходную взята не единичная, а некоторая другая грань (hkl) , то

$$h_x : k_x : l_x = h \frac{\cos \lambda_x}{\cos \lambda} : k \frac{\cos \mu_x}{\cos \mu} : l \frac{\cos \nu_x}{\cos \nu}^{22},$$

где λ, μ, ν — полярные углы грани (hkl) .

²² Для грани (hkl) :

$$h : k : l = \frac{OA_0}{OA} : \frac{OB_0}{OB} : \frac{OC_0}{OC} = \frac{\cos \lambda}{\cos \lambda_0} : \frac{\cos \mu}{\cos \mu_0} : \frac{\cos \nu}{\cos \nu_0},$$

откуда

$$\cos \lambda_0 = t \frac{\cos \lambda}{h}, \quad \cos \mu_0 = t \frac{\cos \mu}{k}, \quad \cos \nu_0 = t \frac{\cos \nu}{l},$$

где t — коэффициент пропорциональности.

Подставляя значения косинусов полярных углов единичной грани в уравнение для грани $(h_x k_x l_x)$, получим

$$h_x : k_x : l_x = \frac{h}{t} \frac{\cos \lambda_x}{\cos \lambda} : \frac{k}{t} \frac{\cos \mu_x}{\cos \mu} : \frac{l}{t} \frac{\cos \nu_x}{\cos \nu}.$$

Полярные углы определяют, пользуясь сеткой Вульфа (см. приложение I), измеряя на стереограмме (рис. 24, б) дуги между полюсами граней и выходами координатных осей. Способ определения выходов координатных осей в кристалле с непрямоугольной системой координат разобран в задаче IV.

В. ГРАФИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ КРИСТАЛЛА

Метод косинусов Вульфа позволяет графически определить элементы кристалла (см. сноску 12):

$$a/b : 1 : c/b = \frac{OA_0}{OB_0} : 1 : \frac{OC_0}{OB_0} = \frac{\cos \mu_0}{\cos \lambda_0} : 1 : \frac{\cos \mu_0}{\cos \nu_0}.$$

Если за исходную взять грань (hkl), то

$$a/b : 1 : c/b = \frac{h}{k} \frac{\cos \mu}{\cos \lambda} : 1 : \frac{l}{k} \frac{\cos \mu}{\cos \nu};$$

α , β , γ измеряют по стереограмме (см. задачу V).

Обратная задача — получение по элементам кристалла координатных и единичной граней, а также грани (hkl) — разбирается в задаче VI.

§ 9. Симметрия и проектирование двойников

Двойником называется закономерный сросток двух кристаллов, в котором индивиды либо повернуты относительно друг друга на 180° , либо связаны друг с другом отражением в плоскости или в точке. Эти элементы симметрии называют двойниковыми или двойнивающими.

Взаимодействие двойнивающих элементов ($2'$, $\bar{2}'$, $2''$) с элементами группы симметрии кристалла порождает новую группу симметрии (двойниковую), соответствующую данному закону двойникования. В двойниковую группу могут переходить лишь те элементы симметрии индивида (они образуют так называемую сохранившуюся подгруппу), которые по своему типу и расположению кристаллографически совместимы с двойнивающим элементом симметрии, при этом нужно иметь в виду, что порядок (см. стр. 13 и 27) сохранившейся подгруппы должен быть в 2 раза ниже порядка возникающей двойниковой группы.

Пусть, например, в индивиде класса 422 двойнивающая ось $2'$ занимает позицию с $\varphi=90^\circ$ и $\rho=45^\circ$. Тогда сохранившаяся подгруппа — $222=2_x2_y2_z$. Взаимодействие элементов сохранившейся подгруппы с двойниковой осью $2'$ приведет к следующему: $2_x \cdot 2' = 2_z \cdot 2' = 4'_y$, т. е. двойниковая группа — $4'22' = 4'_y 2_{x=z} 2'$. Ее порядок в 2 раза превышает порядок сохранившейся подгруппы.

Если по аналогии предположить, что в классе 4 при таком же положении двойнивающей оси сохранится 2_z , то возникнет двойниковая группа $4'22' = 4'_y 2 2'$ ($4'_y = 2_z \cdot 2'$), порядок которой (8) окажется в 4 раза выше порядка сохранившейся подгруппы (2). Следовательно, в этом случае ось 2_z не переходит в двойниковую группу, т. е. сохранившаяся подгруппа — 1, двойниковая — $2'$ (см. также задачу VII).

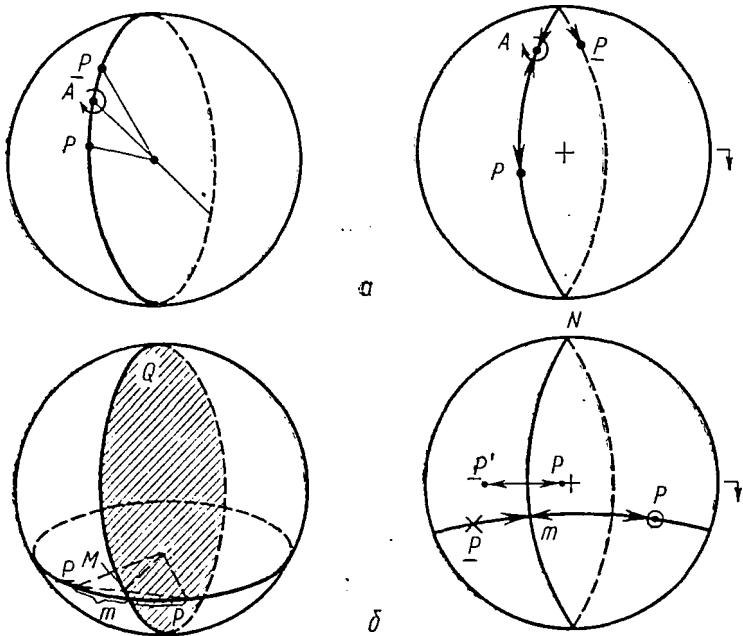


Рис. 25. Получение двойникового аналога \underline{P} некоторой грани P :
 а — двойникование по оси A ; б — двойникование по плоскости Q

При двойниковании индивиды могут проникать один в другой (двойники прорастания) либо только соприкасаться друг с другом (двойники срастания). В последнем случае двойнивающий элемент симметрии не проходит через центр кристалла, поэтому в сохранившуюся подгруппу не перейдет центр инверсии; отсюда очевидно, что порядок подгруппы в данном случае может оказаться в 2 раза ниже порядка подгруппы двойника прорастания. Двойниковая группа двойника прорастания называется поэтому полной.

Исследуя в каждой группе все различные по симметрии позиции двойнивающих элементов, можно вывести все законы

двойникования. При этом целесообразно пользоваться стереографической проекцией.

Некоторые особенно характерные или распространенные законы двойникования получили собственные имена: «шпинелевый» — двойникование кубических кристаллов по (111) или [111], «бразильский» и «дофинейский» — срастание двух энантиоморфных или однотипных кристаллов кварца соответственно, в первом случае двойникующий элемент — (1120), во втором — [0001]; «бавенский» — двойникование триклинных кристаллов по нормали к (021).

При проектировании двойников следует иметь в виду, что нормали к исходной грани и ее двойниковому аналогу должны оказаться в одной плоскости с двойникующей осью, а двойникующая плоскость должна быть перпендикулярна к плоскости, проведенной через нормали к обеим граням — грани заданной и ее двойниковому аналогу (рис. 25, *а* и *б*, а также см. задачу VIII).

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ

Простой формой кристалла называется семейство граней, взаимосвязанных симметрическими операциями.

Легко видеть, что число граней простой формы и ее облик определяются расположением исходной грани относительно элементов симметрии класса. Различают частное и общее положение грани: грань частного положения либо перпендикулярна какому-нибудь особому направлению, либо параллельна единичному особому направлению, либо образует равные углы с эквивалентными особыми направлениями; все остальные положения граней общие. Простые формы, образованные гранями первого типа, называют частными, второго — общими. Число граней общей формы всегда соответствует порядку группы симметрии — числу операций, составляющих данную группу, тогда как число граней частной формы может быть и меньше порядка группы, так как элементы симметрии, перпендикулярные к грани, не размножают ее. Так, грань, перпендикулярная к L_2 , даст форму, число граней которой вдвое меньше порядка группы; грань, перпендикулярная к L_3 , — втрое меньше и т. п. Грань, перпендикулярная к нескольким элементам симметрии, порождает простую форму, число граней которой уменьшено в соответствии с порядком группы, составленной операциями этих элементов симметрии. Так, если грань перпендикулярна к двум плоскостям симметрии и плоскостная симметрия²³ грани описывается группой 4-го порядка $mm2$, то число граней данной частной формы будет в 4 раза меньше по сравнению с числом граней общей простой формы.

Заметим, что группа, описывающая плоскостную симметрию грани, должна быть подгруппой группы симметрии кристалла; порядок этой подгруппы принято называть величиной симметрии грани. Очевидно, что в каждом классе произведение числа граней простой формы на величину симметрии ее грани постоянно

²³ Плоскостной симметрии граней кристалла подчиняется геометрия их структуры — штриховок, бугорков роста, фигур травления и т. п.

и равно порядку группы, а количество граней двух форм любого класса обратно пропорционально величинам симметрии граней этих форм.

В огранке кристалла могут участвовать грани либо одной простой формы, либо нескольких (комбинационные многогранники). Несмотря на бесконечное разнообразие форм комбинационных огранений, число простых форм конечно. Действительно, конечно как число групп симметрии, так и число различных положений граней в каждой группе. Очевидно, что в одном классе может быть несколько частных положений и только одно общее, поэтому общая простая форма способна служить характеристикой данного класса, в частности давать ему свое название. На простых формах отражаются особенности не только отдельных классов, но и целых семейств родственных классов; так, в классах с единичным полярным²⁴ особым направлением все формы открытые, с единичным биполярным направлением — как открытые, так и закрытые²⁵, в классах без единичных направлений — только закрытые.

Вывод простых форм удобно разбить на две части.

А. ПРОСТЫЕ ФОРМЫ В КЛАССАХ С ЕДИНИЧНЫМ НАПРАВЛЕНИЕМ (НИЗШАЯ И СРЕДНЯЯ КАТЕГОРИИ)

Распределим эти классы по двум семействам:

1) есть только одно особое направление — C_n, C_{nh}, S_{2n} ;

2) есть особые направления (2 или $\bar{2}$), перпендикулярные к главному единичному направлению, — $C_{nv}, D_n, D_{nh}, D_{nd}$.

В классах первого семейства грань может занимать три различные позиции, порождая три типа простых форм: $\{001\}$, $\{h k 0\}$ и $\{h k l\}$.

В классах второго семейства боковые особые направления, пересекающиеся под углом $\alpha/2$, могут быть либо эквивалентными (порядок главной оси нечетный), либо неэквивалентными (порядок четный). В первом случае (n нечетное) — грань может занимать семь разных позиций, которым соответствуют семь различных типов простых форм: $\{001\}$, $\{100\}$, $\{110\}$, $\{h k 0\}$, $\{h 0 l\}$, $\{h h l\}$ и $\{h k l\}$ (рис. 26, а). При четном порядке главной оси число различных позиций, а следовательно, и число разных простых

²⁴ Полярным называется направление, «концы» которого кристаллографически неэквивалентны, т. е. не могут быть совмещены друг с другом симметрическими операциями класса (например ось 3 в классе $3m$), «концы» биполярного направления эквивалентны (например ось 4 в классе $\frac{4}{m}$).

²⁵ Грани закрытой простой формы полностью замыкают заключенное между ними пространство, а открытой — не замыкают, например куб — закрытая форма, пирамида — открытая. Чтобы отличить символ отдельной грани от символа простой формы, последний заключают в фигурные скобки: $\{hkl\}$ — простая форма, состоящая из граней типа (hkl) .

Форм сократится до пяти, так как $(100) \equiv (110)$ и $(h0l) \equiv (hhl)$ (рис. 26, б).

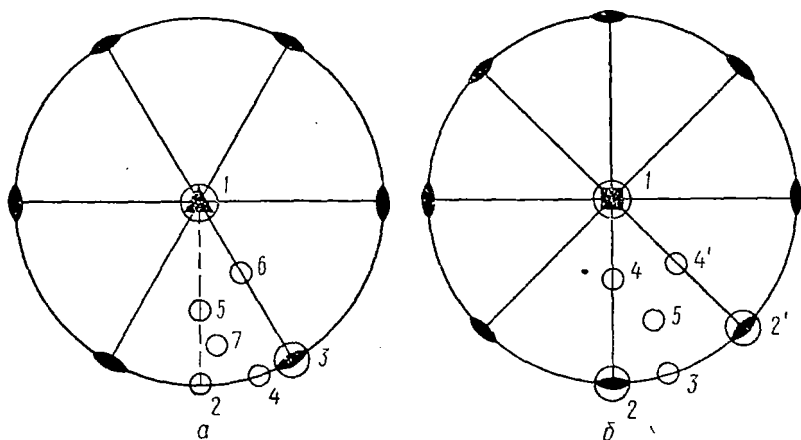


Рис. 26. Различные позиции граней:

- а — в классе $D_3 = L_3L_2$: 1) $(00 \cdot 1) = (0001)$, 2) $(10 \cdot 0) = (10\bar{1}0)$, 3) $(11 \cdot 0) = (11\bar{2}0)$, 4) $(hk \cdot 0) = (hki0)$, 5) $(h0 \cdot l) = (h0\bar{h}l)$, 6) $(hh \cdot l) = (hh2\bar{h}l)$, 7) $(hk \cdot l) = (hkil)$;
 б — в классе $D_4 = L_4L_2$: 1) (001) , 2) (100) и 2') (110) , 3) $(hk0)$, 4) $(h0l)$ и 4') (hhl) , 5) (hkl)

I. Простые формы в классах C_n

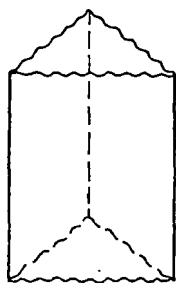
Формы $\{001\}$. Грань, перпендикулярная единственной поворотной оси L_n , не размножается этой осью, и такие одногранные формы независимо от порядка оси называют моноэдрами (педнонами). В моноэдрическом (педальном) классе C_1 каждая грань — независимый моноэдр.

Формы $\{hk0\}$. Грань, параллельная оси L_n , размножаясь этой осью, создает простую форму, грани которой пересекаются по параллельным ребрам, — призму с правильным n -угольником в сечении, перпендикулярном главной оси, — n -гональную призму (рис. 27). Кристаллографические n -гональные призмы могут быть гекса-, тетра-, три- и дигональными. У дигональной призмы сечение незамкнутое — две параллельные прямые; такую «вырожденную» призму принято называть пинакоидом (рис. 27, б).

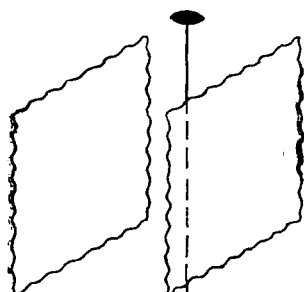
Формы $\{hkl\}$. Грань, расположенная под косым углом к оси L_n , размножаясь ею, образует форму, все грани которой пересекают ось в одной точке, — пирамиду (рис. 28). Так же как и призмы, пирамиды различаются своими сечениями, перпендикулярными главной оси (пирамида тригональная, гексагональная и т. п.). Если $L_n = L_2$, пирамида «вырождается» в форму из двух пересекающихся граней; такую дигональную пирамиду (косую

крышу) обычно называют диэдром осевым (сфеноидом) (рис. 29, а).

Очевидно, что в этом семействе классов формы $\{001\}$ и $\{hk0\}$ — частные, а $\{hkl\}$ — общие, поэтому классы C_n называют



а



б

Рис. 27. Примеры n -гональных призм:
а — тригональная призма; б — дигональная призма — пинаконд

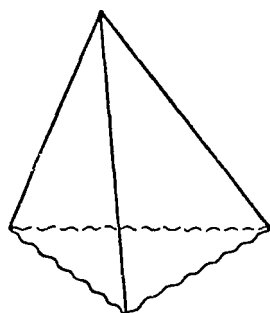


Рис. 28. Пример n -гональной пирамиды — тригональная пирамида

n -гонально-пирамидальными (например C_3 — тригонально-пирамидальный, C_2 — сфеноидальный, или диэдрический осевой класс).

II. Простые формы в классах C_{nv}

Часть позиций приведет к формам, выведенным в предыдущих классах, так, $\{001\}$ — моноэдр, $\{100\}$ и $\{110\}$ — n -гональные призмы, $\{h0l\}$ и $\{hhl\}$ — n -гональные пирамиды, которые в данном случае будут не общими, а частными. Новыми окажутся лишь формы $\{hk0\}$ и $\{hkl\}$.

Формы $\{hk0\}$. Грани, параллельные главной оси, но не перпендикулярные к плоскостям симметрии, образуют «преломленные» призмы — призмы с «удвоенными» сечениями — так называемые ди- n -гональные призмы (рис. 30, а).

Формы $\{hkl\}$. Грани общего положения образуют ди- n -гональные пирамиды (рис. 30, б).

В ди- n -гональных сечениях в отличие от n -гональных углы равны через один (рис. 31, а).

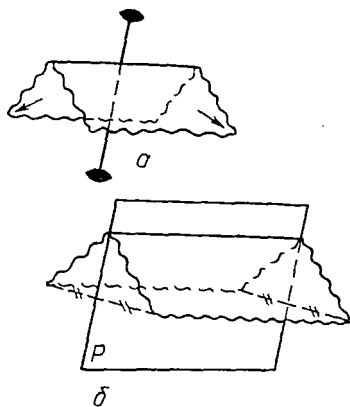


Рис. 29. Диедры:
а — осевой (сфеноид); б —
плоскостной (дóма)

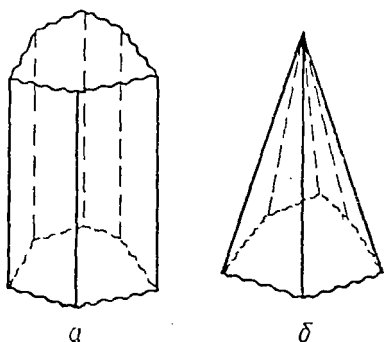


Рис. 30. Пример ди- n -гональ-
ных форм:
а — дитригональная призма;
б — дитригональная пирамида

«Удвоенное» сечение, перпендикулярное к оси L_2 , — дидигональное сечение — имеет форму ромба (рис. 32), и соответствующие простые формы называются ромбическими: ромбическая призма, ромбическая пирамида.

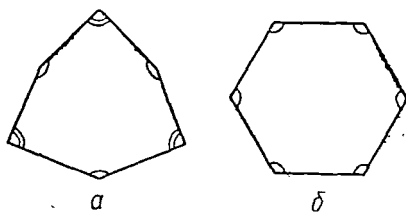


Рис. 31. Шестиугольные сечения:
а — дитригональное сечение (ди-
тригон); б — гексагональное сече-
ние (гексагон)

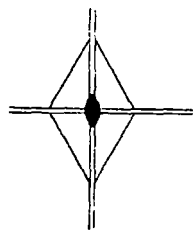


Рис. 32. «Дидиго-
нальное» (=ром-
бическое) сечение

В классе C_s грани размножаются лишь отражением в единственной плоскости симметрии. Здесь форма, кажущаяся новой, получается только из грани общего положения $\{hkl\}$; она состоит из двух пересекающихся граней, образующих прямую

крышу — так называемый диэдр плоскостной (или дóма) (рис. 29, б). Однако собственная симметрия²⁶ такого диэдра ($mm2$) не отличается от собственной симметрии диэдра осевого (сфеноида), поэтому эти две формы чаще считают одной, придавая ей «нейтральное» название — диэдр.

Классы C_{nv} называют ди- n -гонально-пирамидальными.

III. Простые формы в классах C_{nh} и D_{nh} .

Неизменными останутся в этих классах лишь призматические формы — n -гональные и ди- n -гональные призмы. Моноэдры из

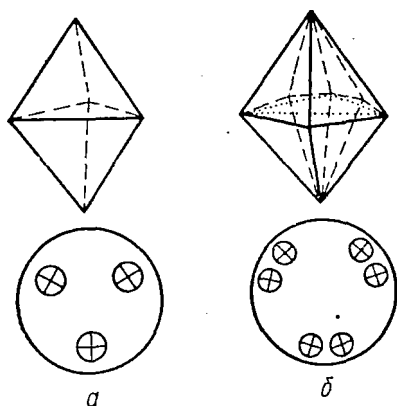


Рис. 33. Примеры бипирамид:
а — тригональная; б — дитригональная

классов C_n и C_{nv} превратятся в пинакоиды; пирамиды, удваиваясь горизонтальной плоскостью, создадут новые, уже закрытые, формы — бипирамиды (n -гональные и ди- n -гональные соответственно) (рис. 33).

Бипирамиды $\{hkl\}$ дадут названия классам: C_{nh} — n -гонально-бипирамидальные, D_{nh} — ди- n -гонально-бипирамидальные (C_{3h} — тригонально-бипирамидальный класс, D_{3h} — дитригонально-бипирамидальный класс)²⁷.

Дигональная бипирамида представляет собой форму, состоящую из четырех попарно параллельных граней, пересекающихся по параллельным ребрам, т. е. призму с ромбическим сечением — ромбическую призму, геометрически подобную выведенной ранее дидигональной призме.

²⁶ Под собственной симметрией понимают симметрию отдельно взятой простой формы, т. е. такой, грани которой не «искажены» гранями соседних форм.

²⁷ В рентгеноанализе в этих формах видна инверсионная ось 6-го порядка, что хорошо подчеркивается международными обозначениями: $C_{3h} = \bar{6}$, $D_{3h} = \bar{6}m2$.

IV. Простые формы в классах D_n .

Без изменения в эти классы переходят формы $\{001\}$, $\{100\}$, $\{110\}$, $\{hkl\}$ и $\{hkl\}$. Грани $\{hkl\}$ дают серию новых простых форм, называемых трапецоэдрами (трапеца — четырехугольник, составленный из двух треугольников — полярного равнобедренного и экваториального разностороннего). В трапецоэдрах верхняя и нижняя пирамиды («головки кристаллов»), связанные

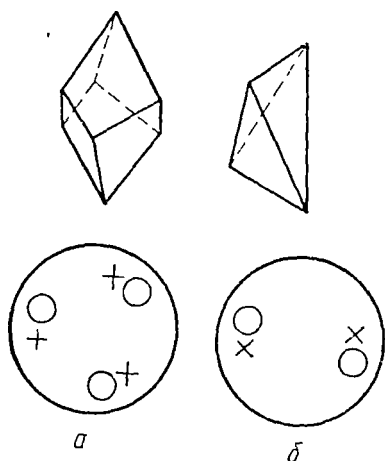


Рис. 34. Примеры трапецоэдров:
a — тригональный трапецоэдр; *б* — дигональный трапецоэдр = ромбический тетраэдр

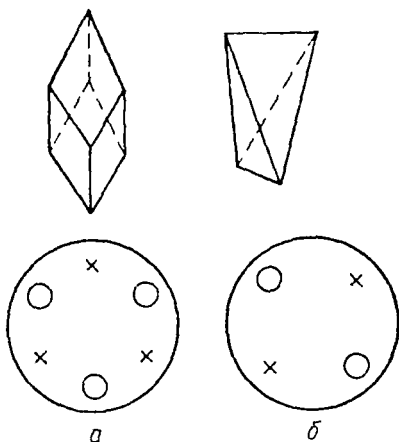


Рис. 35. Общие формы классов S_{2n} :
a — ромбоэдр; *б* — тетрагональный тетраэдр

поворотом вокруг горизонтальной побочной оси 2-го порядка, повернуты относительно друг друга на угол, не фиксированный симметрическими операциями, — признак, облегчающий распознавание трапецоэдрических форм в комбинационных кристаллах (рис. 34)²⁸. Дигональный трапецоэдр принято называть ромбическим тетраэдром.

Классы D_n называют трапецоэдрическими.

В классах D_n при нечетном порядке главной оси новые формы создает и грань $\{h0 \cdot l\}$, т. е. грань, наклонная к главной оси и равнонаклонная к эквивалентным побочным осям, составляющим

²⁸ Трапецоэдры могут быть правыми и левыми (в первом случае верхняя головка многогранника повернута относительно нижней по часовой стрелке, во втором — в противоположном направлении). Такие формы — энантиоморфные — встречаются лишь в классах, не содержащих операций симметрии 2-го рода.

друг с другом угол $\alpha/2$. В отличие от бипирамид и трапецоэдров в формах данного типа верхняя и нижняя головки повернуты относительно друг друга на определенный угол, равный половине элементарного угла поворота главной оси симметрии (т. е. верхняя грань расположена симметрично относительно двух нижних).

Стоит отметить, что во всех таких фигурах верхняя пирамида повернута относительно нижней на 180° .

Кристаллографическую форму такого типа можно получить лишь в классе D_3 — это ромбоэдр $\{h0\bar{h}l\}$, его грани имеют форму ромба (рис. 35, а).

V. Простые формы в классах S_{2n}

Нетрудно убедиться, что интересной в этом случае будет лишь позиция (hkl) . Зеркальный — альтернирующий — поворот располагает верхние грани симметрично относительно нижних, образуя «симметризованный трапецоэдр» — верхняя n -гональная пирамида расположена симметрично относительно такой же нижней пирамиды.

Кристаллографическими классами S_{2n} оказываются лишь S_2 , S_4 , S_6 . В классе S_6 этот «трапецоэдр» $\{hkil\}$ представляет не что иное, как ромбоэдр, выведенный уже в классе D_3 . В классе S_4 n -гональная пирамида вырождается в «двускатную крышу» и шестигранный ромбоэдр превращается в четырехгранную фигуру — тетрагональный тетраэдр; его грани — равнобедренные треугольники (рис. 35, б). В классе S_2 «пирамида» становится моногранной (моноэдр!), а сама форма — два параллельные грани — пинакоидом.

Очевидно, что класс S_6 должен называться ромбоэдрическим, S_4 — тетрагонально-тетраэдрическим, а S_2 — пинакоидальным.

VI. Простые формы в классах D_{nd}

Новые формы — скаленоэдры — образуются лишь из граней общего положения. В скаленоэдрах верхняя и нижняя ди- n -гональные пирамиды повернуты относительно друг друга на угол, равный половине элементарного угла поворота главной оси (пара верхних граней расположена симметрично относительно двух пар нижних граней).

В кристаллах возможны лишь две скаленоэдрические формы (рис. 36): тригональный скаленоэдр (преломленный ромбоэдр) $\{hkil\}$ с главной осью $\bar{3}=6$ (в классе D_{3d}) и тетрагональный скаленоэдр (преломленный тетраэдр) $\{hkil\}$ с главной осью $\bar{4}=4$ (в классе D_{2d}). Классы D_{nd} называют скаленоэдрическими.

В итоге мы получили 32 простые формы низшей и средней категорий.

Б. ПРОСТЫЕ ФОРМЫ В КЛАССАХ БЕЗ ЕДИНИЧНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ (ВЫСШАЯ КАТЕГОРИЯ — КУБИЧЕСКАЯ СИНГОНИЯ)

Простые формы кубической сингонии можно вывести размножением «первой» грани, занимающей различные положения относительно элементов симметрии соответствующих классов. Однако здесь из-за большого числа симметрических операций такой путь очень громоздок; более изящен и прост способ, предложенный Н. В. Беловым (индуктивный способ): простые формы кубиче-

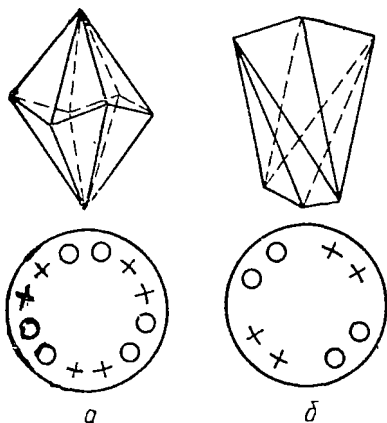


Рис. 36. Общие формы классов D_{2d} :

a — тригональный скаленоздр;
b — тетрагональный скаленоздр

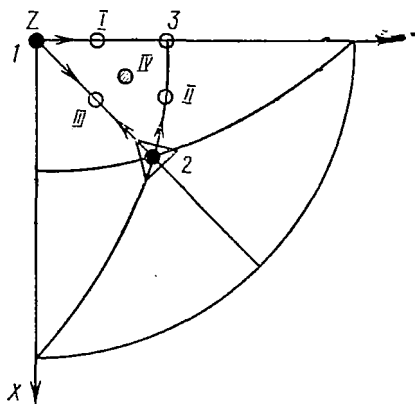


Рис. 37. Различные позиции граней в кубической сингонии.

Основные формы: $I - \{100\}$ и $2 - \{111\}$; производные формы: $I - \{0kl\}$, $II - \{hll\}$, $3 - \{110\}$, $III - \{hhl\}$, $IV - \{hkl\}$, где $h < k < l$

ской сингонии выводятся как производные из основных форм (рис. 37) путем «наращивания» на их гранях «пирамидок» — двух-, трех- и четырехскатных «крыш», допускаемых плоскостной симметрией граней²⁹.

Основные формы кубической сингонии — это простейшие кристаллографические фигуры с несколькими осями симметрии высшего порядка — правильные многогранники, не имеющие осей 5-го порядка: куб (гексаэдр), октаэдр и тетраэдр (рис. 38). Грани основных форм занимают строго фиксированное положение, как бы подчеркивая основные направления кубической сингонии — три координатные оси симметрии и четыре оси 3-го порядка. Перпендикулярно координатным осям располагаются

²⁹ Этому процессу придается «естественнонаучный» смысл: «самоочищение» кристалла от примесей материальных и нематериальных — нарушений и дислокаций.

грани куба $\{001\}$, перпендикулярно биполярным осям 3-го порядка — грани октаэдра $\{111\}$, полярным тройным осям — грани тетраэдров $\{111\}$ и $\{1\bar{1}\bar{1}\}$.

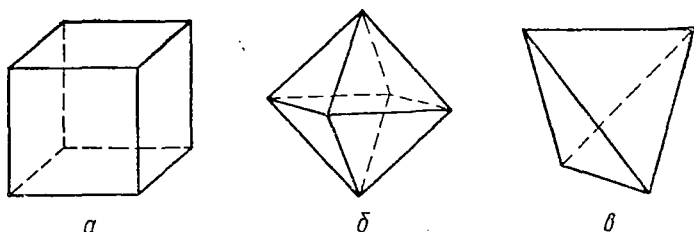


Рис. 38. Основные формы кубической сингонии: а — куб; б — октаэдр; в — тетраэдр

1. Простые формы $\{0kl\}$ — производные куба (гексаэдра)

Если грань перевести из положения (001) в положение $(0kl)$, то ее симметрия понизится либо в 4 раза (в классах $m\bar{3}m$, 432 и $\bar{4}3m$), либо в 2 раза (в классах $m\bar{3}$, 23) и соответственно увеличится число граней формы, т. е. «пирамида», заменившая грани куба, окажется либо четырехгранной, либо вырожденной — двугранной, а сами формы двадцатичетырех- и двенадцатигранными. Двдцатичетырехгранная форма $\{0kl\}$ называется тетрагексаэдром, или тригон-тетрагексаэдром (учетверенный гексаэдр с треугольными гранями). Очень выразительно и классическое его название — пирамидальный куб (рис. 39, а, б).

Двенадцатигранная форма может быть названа соответственно пентагон-дигексаэдром — грани имеют форму неправильных пятиугольников (рис. 39, в, г), но обычно ее называют пентагон-додекаэдром.

Четырех- и двускатные «крыши» (пирамиды), «выросшие» на грани куба, будут менять свою крутизну в зависимости от соотношения индексов k и l : при $k \ll l$, например. $(0kl) = (019)$, пирамиды будут очень пологими, и облик всей формы окажется кубическим; при сближении значений k и l — $(019) \rightarrow (039) \rightarrow (059) \rightarrow (089)$ — пирамиды будут становиться круче и при $(0kl) = (011)$ возникнет новая форма — предельно крутой «тетрагексаэдр» или соответственно предельно крутой «пентагон-додекаэдр». В первом случае две грани соседних пирамидок сольются в одну ромбовидную грань: $(089) \rightarrow (011) \leftarrow (098)$ (рис. 40, а) во втором — пятиугольники превратятся в ромбы (рис. 40, б), но число граней сохранится. В полученном двенадцатиграннике — его называют ромбододекаэдром — четко выражены четыре зоны, причем ось каждой зоны параллельна одной из осей 3-го порядка (отсюда его второе название — зоноэдр); как видно из символа $\{011\}$,

грани ромбододекаэдра равнонаклонны к двум координатным осям и параллельны третьей оси, т. е. занимают строго фиксиро-

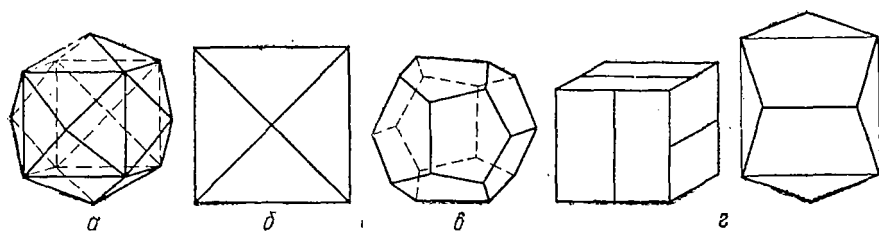


Рис. 39. Простые формы $\{0kl\}$ — производные куба: a — тетрагексаэдр и его генизис (b); c — пентагон-додэкаэдр и его генизис (e)

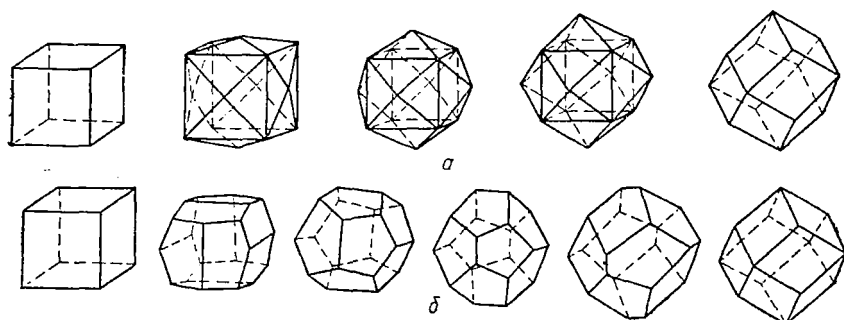


Рис. 40. Генизис ромбододекаэдра: a — от куба через тетрагексаэдр; b — от куба через пентагон-додэкаэдр

ванное положение. Таким образом, ромбододекаэдр оказался четвертой постоянной³⁰ формой кубической сингонии.

II. Простые формы $\{hll\}$ ($h < l$) — производные октаэдра (тетраэдра)

Смещение грани (111) в положение (hll) увеличит число граней в 3 раза. В классах $m\bar{3}m$, 432 и $m\bar{3}$ вместо грани октаэдра возникнет трехгранная пирамидка — трехскатная «крыша» — и форма будет называться либо тригон-триоктаэдром, либо пирамидальным октаэдром (рис. 41, a). Вместо грани тетраэдра

³⁰ У этой постоянной фигуры и постоянный острый угол, равный $\arccos \frac{1}{3} = 70^\circ 29'$.

(классы $\bar{4}3m$ и 23) образуется пирамидка из четырехугольных граней, отсюда обычное название формы — тетрагон-тритетраэдр,

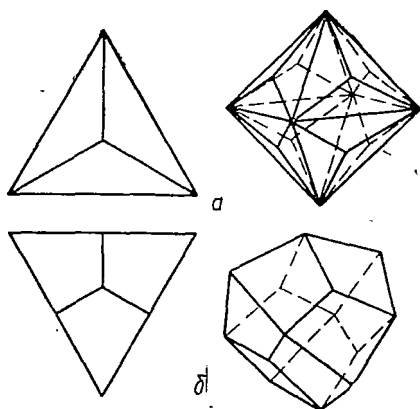


Рис. 41. Простые формы $\{hll\}$, где $h < l$:
a — производная октаэдра — тригон-триоктаэдр;
б — производная тетраэдра — тетрагон-тритетраэдр

но ее называют также двенадцатигранным дельтоэдром, так как грань ее как бы состоит из двух «дельт» (рис. 41, б).

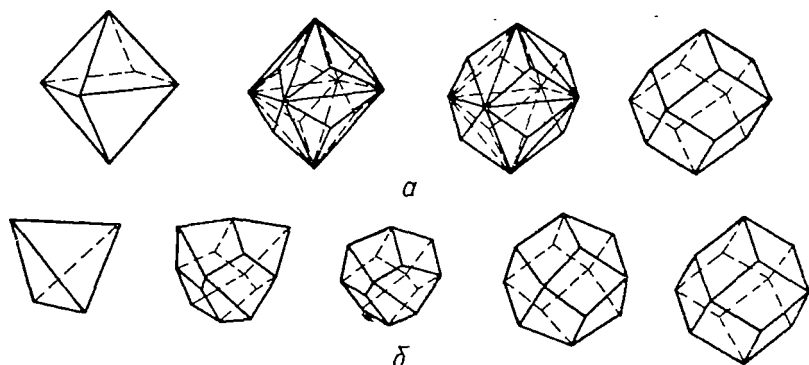


Рис. 42. Генезис ромбододекаэдра от форм $\{hll\}$, где $h < l$:
a — от октаэдра через тригон-триоктаэдр;
б — от тетраэдра через тетрагон-тритетраэдр

Предельное увеличение крутизны «пирамидок» этих производных форм ($h/l \rightarrow 0$, $\{hll\} \rightarrow \{0ll\}$) приведет к знакомому нам ромбододекаэдру (рис. 42).

III. Простые формы $\{hhl\}$ ($h < l$) — производные как октаэдра (тетраэдра), так и куба

Переводя грань $\{111\}$ в положение $\{hhl\}$, где $h < l$, получим вместо грани октаэдра трехгранную пирамидку из четырехуголь-

ных граней (рис. 43, *a*). Соответственно форма называется тетрагон-триоктаэдром, или 24-гранным дельтоэдром (рис. 43, *б*).

В случае тетраэдра придем к тригон-трикетраэдру, называемому также пирамидальным тетраэдром (рис. 43, *в*, *д*).

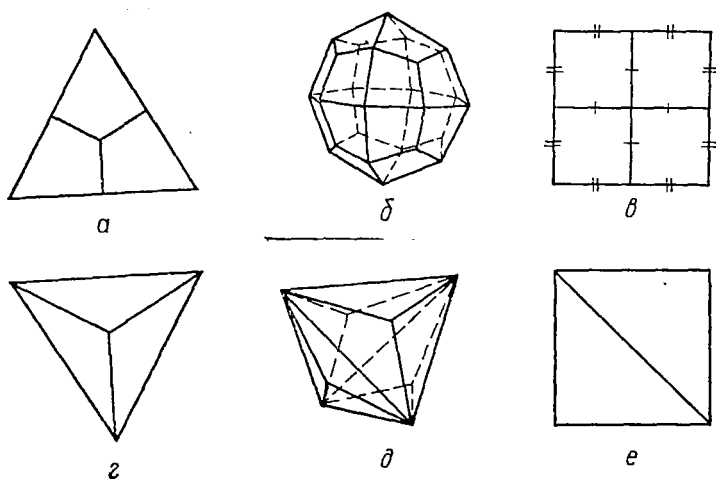


Рис. 43. Простые формы $\{hhl\}$, где $h < l$:
б — тетрагон-триоктаэдр и его генезис от октаэдра (*a*) и куба (*в*); *д* — тригон-трикетраэдр и его генезис от тетраэдра (*в*) и куба (*e*)

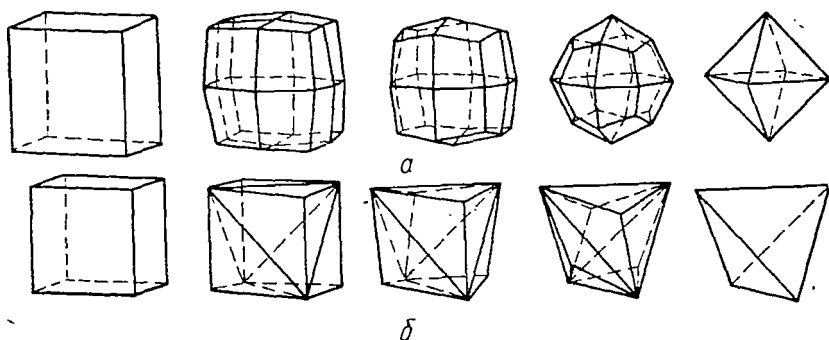


Рис. 44. Простые формы $\{001\} - \{hhl\} - \{111\}$:
a — $\{111\}$ = октаэдр; *б* — $\{111\}$ = тетраэдр

Те же формы можно получить и как производные куба $\{001\}$. В классах $m\bar{3}m$, 432 $m\bar{3}$ вместо грани куба возникнет четырехскатная крыша (рис. 43, *в*). Образовавшийся 24-гранный дельтоэдр в этом случае естественно называть тетрагон-тетрагексаэдром, особенно если в символе $\{hhl\}$ отношение $h/l \rightarrow 0$, например.

$\{hhl\}$ равно $\{118\}$, $\{119\}$, ... Точно так же 24-гранный дельтоэдр с $h/l \rightarrow 1$, например $\{hhl\} = \{889\}$, логичнее называть тетрагон-триоктаэдром.

В классах $\bar{4}3m$ и 23 вместо грани куба образуется двускатная крыша (рис. 43, *e*), и возникшую в этом случае форму можно было бы называть тригон-дигексаэдром, особенно если в ее символе $h/l \rightarrow 0$. Ее наиболее распространенное название — тригон-тритетраэдр — по существу оправдывается лишь в том случае, когда в $\{hhl\}$ $h/l \rightarrow 1$. Постепенный переход от куба к октаэдру (тетраэдру) можно проследить на рис. 44.

IV. Общие простые формы кубической сингонии

Класс $m\bar{3}m$. Смещение грани октаэдра (111) в общее положение понизит ее плоскостную симметрию ($3m \rightarrow 1$), что уменьшит

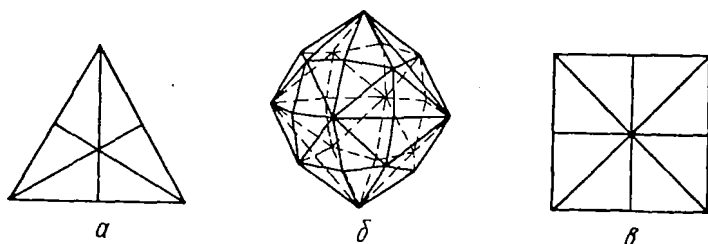


Рис. 45. Общая форма класса $m\bar{3}m$:
a — «пирамидка» на грани октаэдра; *б* — сорокавосьмигранник; *в* — «пирамидка» на грани куба

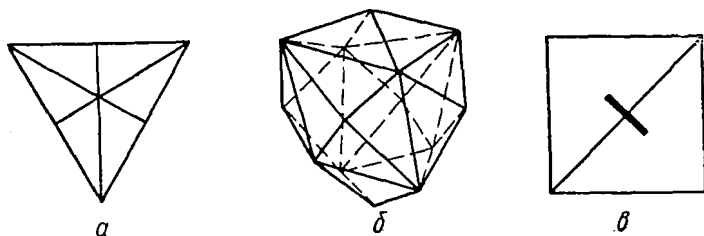


Рис. 46. Общая форма класса $\bar{4}3m$:
а — «пирамидка» на грани тетраэдра; *б* — гексатетраэдр;
в — «пирамидка» на грани куба

в 6 раз величину симметрии грани, поэтому полученная форма окажется 48-гранной (рис. 45, *a, б*). К сорокавосьмиграннику можно прийти и от грани куба ($4mm \rightarrow 1$) (рис. 45, *в*).

Встречающийся в кристаллах сорокавосьмигранник имеет, как правило, октаэдрический габитус, поэтому общепринятое назва-

ние этой формы — гексаоктаэдр, хотя при $\{hkl\}$, где $(h \approx k) \ll l$, предпочтительнее было бы называть эту форму октагексаэдром. Голоэдрический (старший) класс $m\bar{3}m$ называют классом сорока-восьмигранника, или гексаоктаэдрическим.

Класс $4\bar{3}m$. Грань тетраэдра (111) , переведенная в общее положение, ушестерится, отсюда наиболее распространенное

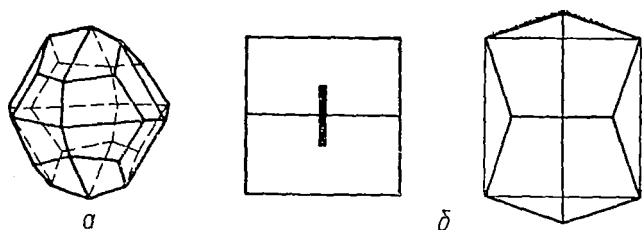


Рис. 47. Общая форма класса $m\bar{3}$:
а — дидодекаэдр и его генезис (б)

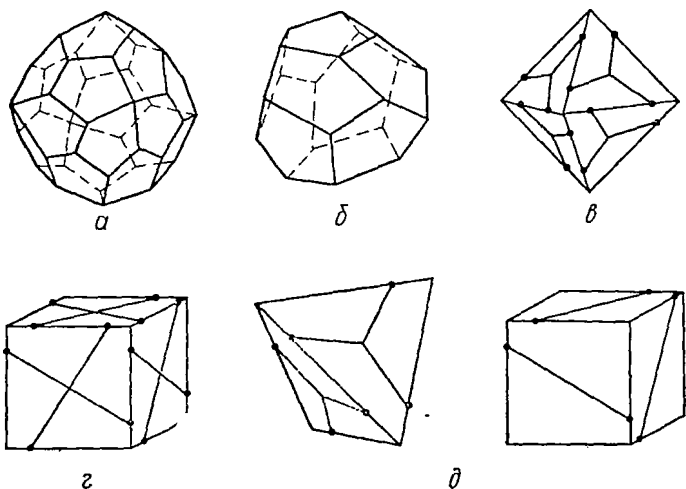


Рис. 48. Общие формы осевых классов:
а — пентагон-триоктаэдр=24-гранный осевик; б — пентагон-тритетраэдр=12-гранный осевик; в — генезис 24-гранного осевика от октаэдра; г — то же от куба; д — генезис 12-гранного осевика от тетраэдра и куба

название общей формы этого класса — гексатетраэдр (рис. 46, а, б), хотя ту же форму можно считать производной куба (рис. 46, в) и называть тригон-тетрагексаэдром (особенно при $(h \approx k) \ll l$).

Класс $\bar{4}3m$ называют гексатетраэдрическим.

Класс $m\bar{3}$. Общую форму этого класса можно рассматривать как «вторичную» производную куба. Грань дигексаэдра $\{0kl\}$ —

пентагон-додекаэдра — удвоится координатной плоскостью и получится 24-гранник, дидигексаэдр, который обычно называют дидодекаэдром, или преломленным пентагон-додекаэдром (рис. 47, *а, б*). Эту же форму можно считать производной октаэдра.

Класс $m\bar{3}$ называют дидодекаэдрическим.

Классы 432 и 23. Общие формы этих классов можно называть осевиками, или гироздрами, 24-гранным и 12-гранным соответственно (рис. 48, *а, б*). В их обычных названиях — пентагон-триоктаэдр и пентагон-тритетраэдр — отражено их «происхождение» от октаэдра или тетраэдра (рис. 48, *в и д*). Как производные куба ($h \approx k \ll l$) их можно было бы называть пентагон-тетрагексаэдром (рис. 48, *г*) и несимметричным пентагон-дигексаэдром (рис. 48, *д*).

Классы 432 и 23 называют пентагон-триоктаэдрическим и пентагон-тритетраэдрическим соответственно.

Таким образом, оказались выведенными все 15 форм кубической сингонии.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КООРДИНАТНЫХ СИСТЕМ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ

Решение многих кристаллографических вопросов нередко связано с переходом от одной установки кристаллического многогранника к другой, однако способы преобразования координатных систем, используемые в рентгеновской кристаллографии, как будет показано, не могут быть безоговорочно использованы при работе с кристаллическими многогранниками.

При переходе от одной координатной системы к другой удобен аппарат матричной алгебры, и в настоящем учебнике даются некоторые практические советы по работе с матрицами.

§ 1. Зависимость между старой (XYZ) и новой ($X'Y'Z'$) координатными системами, а также между старыми $\{hkl\}, [rst]$ и новыми $\{HKL\}, [RST]$ символами граней и ребер

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КООРДИНАТНЫХ ОСЕЙ

Заменим грани кристалла узловыми сетками, а ребра (и координатные оси) — узловыми рядами (см. стр. 30). Если $a:b:c$ —

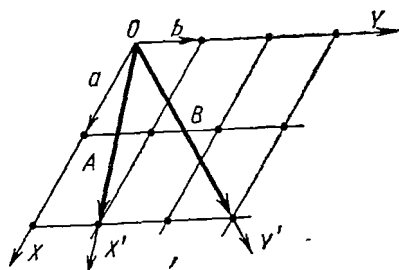


Рис. 49. Преобразование координатных осей

отношение параметров старой единичной грани, а $A:B:C$ — новой, то a, b, c и A, B, C — периоды идентичности (элементарные единицы) вдоль соответствующих координатных осей. Очевидно,

одни элементарные единицы можно вычислить как векторные суммы других. Для конкретного двумерного случая (рис. 49)

$$\vec{A} = 2\vec{a} + \vec{b}, \quad \vec{B} = 2\vec{a} + 3\vec{b}$$

и

$$\vec{a} = \frac{3}{4}\vec{A} - \frac{1}{4}\vec{B}, \quad \vec{b} = -\frac{1}{2}\vec{A} + \frac{1}{2}\vec{B}.$$

В общем виде для трехмерного случая

$$\left. \begin{aligned} \vec{A} &= u_A \vec{a} + v_A \vec{b} + w_A \vec{c} \\ \vec{B} &= u_B \vec{a} + v_B \vec{b} + w_B \vec{c} \\ \vec{C} &= u_C \vec{a} + v_C \vec{b} + w_C \vec{c} \end{aligned} \right\} (1) \quad \text{и} \quad \left. \begin{aligned} \vec{a} &= u_a \vec{A} + v_a \vec{B} + w_a \vec{C} \\ \vec{b} &= u_b \vec{A} + v_b \vec{B} + w_b \vec{C} \\ \vec{c} &= u_c \vec{A} + v_c \vec{B} + w_c \vec{C} \end{aligned} \right\} (2)$$

Поскольку характер каждого частного преобразования определяется лишь коэффициентами при $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ и $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$, системы этих уравнений можно записать сокращенно в виде матриц преобразования осей:

$$(M) = \begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad u_A v_A w_A / u_B v_B w_B / u_C v_C w_C$$

и

$$(M^{-1}) = \begin{pmatrix} u_a & v_a & w_a \\ u_b & v_b & w_b \\ u_c & v_c & w_c \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad u_a v_a w_a / u_b v_b w_b / u_c v_c w_c.$$

Матрица (M) используется для прямого преобразования осей (от старых к новым), обратная матрица (M^{-1}) — для обратного (от новых к старым). Такой тип преобразования носит название **к о в а р и а н т н о г о**.

Чтобы вычислить соотношение осевых единиц в данной системе координат, нужно матрицу соответствующего преобразования умножить³¹ на матрицу, составленную из осевых единиц другой системы:

$$\begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_A \vec{a} + v_A \vec{b} + w_A \vec{c} \\ u_B \vec{a} + v_B \vec{b} + w_B \vec{c} \\ u_C \vec{a} + v_C \vec{b} + w_C \vec{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{A} \\ \vec{B} \\ \vec{C} \end{pmatrix} = \vec{A} : \vec{B} : \vec{C},$$

$$\begin{pmatrix} u_a & v_a & w_a \\ u_b & v_b & w_b \\ u_c & v_c & w_c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{A} \\ \vec{B} \\ \vec{C} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a \vec{A} + v_a \vec{B} + w_a \vec{C} \\ u_b \vec{A} + v_b \vec{B} + w_b \vec{C} \\ u_c \vec{A} + v_c \vec{B} + w_c \vec{C} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = \vec{a} : \vec{b} : \vec{c}.$$

³¹ См. сноску 33.

Абсолютные значения векторов \vec{A}' , \vec{B}' , \vec{C}' ($\vec{A}' = \rho\vec{A}$, $\vec{B}' = \rho\vec{B}$, $\vec{C}' = \rho\vec{C}$) найдем скалярным умножением каждого вектора на самого себя с последующим извлечением корня:

$$\vec{A}' \cdot \vec{A}' = (A')^2 = \rho(u_A \vec{a} + v_A \vec{b} + w_A \vec{c}) \cdot \rho(u_A \vec{a} + v_A \vec{b} + w_A \vec{c})$$

или

$$A' = \sqrt{\rho^2(u_A^2 a^2 + v_A^2 b^2 + w_A^2 c^2 + 2ab u_A v_A \cos \gamma + 2ac u_A w_A \cos \beta + 2bc v_A w_A \cos \alpha)},$$

где α , β , γ — осевые углы в старой системе координат.

Вычислив таким же образом B' и C' , получим

$$A : B : C = A' : B' : C' = \frac{A'}{B'} : 1 : \frac{C'}{B'}.$$

Для вычисления новых осевых углов

$$(\alpha' = \widehat{\vec{B}' \vec{C}'}, \beta' = \widehat{\vec{A}' \vec{C}'}, \gamma' = \widehat{\vec{A}' \vec{B}'})$$

следует воспользоваться следующей зависимостью:

$$\begin{aligned} \cos \gamma' &= \cos(\widehat{\vec{A}' \vec{B}'}) = \frac{\vec{A}' \cdot \vec{B}'}{A' B'} = \frac{1}{A' B'} (u_A \vec{a} + v_A \vec{b} + w_A \vec{c}) (u_B \vec{a} + v_B \vec{b} + \\ &+ w_B \vec{c}) = \frac{1}{A' B'} (u_A u_B a^2 + v_A v_B b^2 + w_A w_B c^2 + u_A v_B \vec{a} \vec{b} + u_A w_B \vec{a} \vec{c} + \\ &+ v_A u_B \vec{b} \vec{a} + v_A w_B \vec{b} \vec{c} + w_A u_B \vec{c} \vec{a} + w_A v_B \vec{c} \vec{b}) = \\ &= \frac{1}{A' B'} [u_A u_B a^2 + v_A v_B b^2 + w_A w_B c^2 + (u_A v_B + v_A u_B) ab \cos \gamma + \\ &+ (u_A w_B + w_A u_B) ac \cos \beta + (v_A w_B + w_A v_B) bc \cos \alpha]. \end{aligned}$$

Таким же образом определяем $\alpha' = \widehat{\vec{B}' \vec{C}'}$ и $\beta' = \widehat{\vec{A}' \vec{C}'}$ (см задачу XIII).

Матрица (M^{-1}) может быть получена и неграфически — решением системы уравнений прямого преобразования (1) относительно \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} .

Приводим последовательную запись этого решения в матричной форме.

1. Записать определитель Δ матрицы прямого преобразования и вычислить его:

$$\begin{aligned} \Delta = |M| &= \begin{vmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{vmatrix} = \left(u_A \cdot \begin{vmatrix} v_B & w_B \\ v_C & w_C \end{vmatrix} \right) - \left(v_A \cdot \begin{vmatrix} u_B & w_B \\ u_C & w_C \end{vmatrix} \right) + \\ &+ \left(w_A \cdot \begin{vmatrix} u_B & v_B \\ u_C & v_C \end{vmatrix} \right). \end{aligned}$$

2. Заменить в определителе Δ каждый минор 1-го порядка (каждый член определителя) его алгебраическим дополнением³², деленным на величину определителя:

$$\begin{array}{ccc} \frac{\begin{vmatrix} v_B & \omega_B \\ v_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & - \frac{\begin{vmatrix} u_B & \omega_B \\ u_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & \frac{\begin{vmatrix} u_B & v_B \\ u_C & v_C \end{vmatrix}}{\Delta} \\ - \frac{\begin{vmatrix} v_A & \omega_A \\ v_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & \frac{\begin{vmatrix} u_A & \omega_A \\ u_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & - \frac{\begin{vmatrix} u_A & v_A \\ u_C & v_C \end{vmatrix}}{\Delta} \\ \frac{\begin{vmatrix} v_A & \omega_A \\ v_B & \omega_B \end{vmatrix}}{\Delta} & - \frac{\begin{vmatrix} u_A & \omega_A \\ u_B & \omega_B \end{vmatrix}}{\Delta} & \frac{\begin{vmatrix} u_A & v_A \\ u_B & v_B \end{vmatrix}}{\Delta} \end{array}$$

3. Транспонировать полученную матрицу, т. е. строки поменять местами со столбцами (повернуть матрицу вокруг ее главной диагонали):

$$\left(\begin{array}{ccc} \frac{\begin{vmatrix} v_B & \omega_B \\ v_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & - \frac{\begin{vmatrix} v_A & \omega_A \\ v_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & \frac{\begin{vmatrix} v_A & \omega_A \\ v_B & \omega_B \end{vmatrix}}{\Delta} \\ - \frac{\begin{vmatrix} u_B & \omega_B \\ u_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & \frac{\begin{vmatrix} u_A & \omega_A \\ u_C & \omega_C \end{vmatrix}}{\Delta} & - \frac{\begin{vmatrix} u_A & \omega_A \\ u_B & \omega_B \end{vmatrix}}{\Delta} \\ \frac{\begin{vmatrix} u_B & v_B \\ u_C & v_C \end{vmatrix}}{\Delta} & - \frac{\begin{vmatrix} u_A & v_A \\ u_C & v_C \end{vmatrix}}{\Delta} & \frac{\begin{vmatrix} u_A & v_A \\ u_B & v_B \end{vmatrix}}{\Delta} \end{array} \right) = (M^{-1}).$$

4. Проверить найденную обратную матрицу:

$$(M) \cdot (M^{-1}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = (1)^{33}.$$

³² Алгебраическим дополнением минора 1-го порядка служит дополнительный минор (определитель матрицы, оставшейся после вычеркивания строки и столбца, пересекающихся на данном миноре), взятый со знаком $(-1)^{i+j}$, где i — номер строки, j — номер столбца.

³³ Правило умножения матриц:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} + a_{13}b_{31} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} + a_{13}b_{32} & a_{11}b_{13} + a_{12}b_{23} + a_{13}b_{33} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} + a_{23}b_{31} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} + a_{23}b_{32} & a_{21}b_{13} + a_{22}b_{23} + a_{23}b_{33} \\ a_{31}b_{11} + a_{32}b_{21} + a_{33}b_{31} & a_{31}b_{12} + a_{32}b_{22} + a_{33}b_{32} & a_{31}b_{13} + a_{32}b_{23} + a_{33}b_{33} \end{pmatrix}.$$

Следует отметить, что в общем случае $(Ma) \cdot (Mb) \neq (Mb) \cdot (Ma)$.

Нетрудно показать, что если (M_a) — матрица преобразования осей от установки I к II, а (M_b) — то же от установки II к III, то $(M_b) \cdot (M_a) = (M_c)$ — матрица преобразования от I к III.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ИНДЕКСОВ ГРАНЕЙ КРИСТАЛЛА — УЗЛОВЫХ СЕТОК

Пусть h, k, l — индексы некоторой узловой сетки в старой установке; H, K, L — индексы в новой установке. Так как семейство параллельных узловых сеток (hkl) разбивает элементарные единицы (ребра примитивной ячейки) a, b, c соответственно на h, k и l частей (стр. 36), то для вычисления новых индексов H, K, L нужно определить лишь, на сколько частей разбивают те же сетки новые элементарные единицы A, B, C .

Из рис. 50 для двумерного случая, где $h=2, k=3$ и $\vec{A}=2\vec{a}+\vec{b}$, $\vec{B}=2\vec{a}+3\vec{b}$, очевидно, что $H=2h+k=7$ и $K=2h+3k=13$. Таким

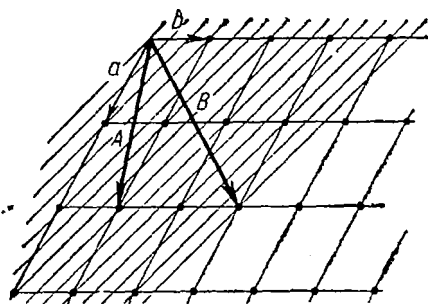


Рис. 50. Преобразование индексов граней кристалла

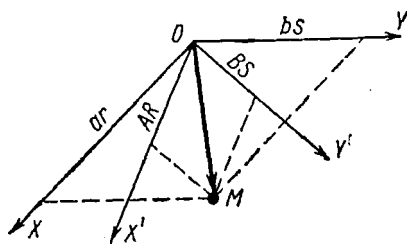


Рис. 51. Преобразование индексов ребер

образом, каждый из векторов (\vec{A}, \vec{B}) разбит на столько же частей, на сколько разбита ломаная, соединяющая его концы.

Для трехмерного случая $\vec{A}=u_A\vec{a}+v_A\vec{b}+w_A\vec{c}$, значит $H=u_Ah+v_Ak+w_Al$. По аналогии

$$K = u_Bh + v_Bk + w_Bl,$$

$$L = u_Ch + v_Ck + w_Cl.$$

Таким образом, матрицы преобразования индексов узловых сеток (граней) кристалла совпадают с матрицами преобразования осей, т. е.

преобразование символов граней тоже идет по ковариантному закону:

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = (M)'_i \cdot \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = (M^{-1}) \cdot \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix}.$$

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ИНДЕКСОВ РЕБЕР КРИСТАЛЛА (УЗЛОВЫХ РЯДОВ)

Пусть $[rst]$ — старый символ некоторого ребра, а $[RST]$ — новый (рис. 51). Заменяем ребро узловым рядом, тогда \vec{ar} , \vec{bs} , \vec{ct} и \vec{AR} , \vec{BS} , \vec{CT} — координаты некоторой точки ребра (узла ряда). Очевидно, что

$$\vec{AR} + \vec{BS} + \vec{CT} = \vec{ar} + \vec{bs} + \vec{ct}.$$

Из системы

$$\vec{a} = u_a \vec{A} + v_a \vec{B} + w_a \vec{C},$$

$$\vec{b} = u_b \vec{A} + v_b \vec{B} + w_b \vec{C},$$

$$\vec{c} = u_c \vec{A} + v_c \vec{B} + w_c \vec{C}$$

следует, что

$$\begin{aligned} \vec{AR} + \vec{BS} + \vec{CT} &= r(u_a \vec{A} + v_a \vec{B} + w_a \vec{C}) + s(u_b \vec{A} + v_b \vec{B} + w_b \vec{C}) + \\ &+ t(u_c \vec{A} + v_c \vec{B} + w_c \vec{C}) = \vec{A}(u_a r + u_b s + u_c t) + \vec{B}(v_a r + v_b s + v_c t) + \\ &+ \vec{C}(w_a r + w_b s + w_c t). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$R = u_a r + u_b s + u_c t,$$

$$S = v_a r + v_b s + v_c t,$$

$$T = w_a r + w_b s + w_c t,$$

т. е. матрица преобразования индексов ребер $\begin{pmatrix} u_a & u_b & u_c \\ v_a & v_b & v_c \\ w_a & w_b & w_c \end{pmatrix}$.

Следовательно, индексы ребер преобразуются с помощью обратной транспонированной матрицы $(M^{-1})'$ — контравариантный закон.

Очевидно, что для обратного преобразования индексов ребер (от новых к старым) нужно пользоваться транспонированной прямой матрицей (M)':

$$\begin{pmatrix} R \\ S \\ T \end{pmatrix} = (M^{-1})' \cdot \begin{pmatrix} r \\ s \\ t \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} r \\ s \\ t \end{pmatrix} = (M)' \cdot \begin{pmatrix} R \\ S \\ T \end{pmatrix}.$$

Разумеется, что то же справедливо и для координат точек.

Преобразуя индексы граней и ребер гексагональных кристаллов в установке Бравэ, целесообразнее всего переходить к трехчленным символам, записывая вместо $(hkil) \rightarrow (hk \cdot l)$ и вместо $[rswt] \rightarrow [r - w \ s - w \cdot t]$. Это даст возможность поступать при преобразованиях обычным путем. К сожалению, в литературе для гексагональных кристаллов чаще приводятся матрицы преобразования осей вида $\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4/\beta_1\beta_2\beta_3\beta_4/\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4/\delta_1\delta_2\delta_3\delta_4$. В подобных случаях рекомендуется перейти к матрице обычного типа (см. также задачи IX, X, XI):

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 & \gamma_4 \\ \delta_1 & \delta_2 & \delta_3 & \delta_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 - \alpha_3 & \alpha_2 - \alpha_3 & \alpha_4 \\ \beta_1 - \beta_3 & \beta_2 - \beta_3 & \beta_4 \\ \delta_1 - \delta_3 & \delta_2 - \delta_3 & \delta_4 \end{pmatrix}.$$

§ 2. Вычисление матриц преобразования осей при различных заданиях координатных систем

1. Координатные оси X, Y, Z в новой установке направлены по ребрам $[r_1s_1t_1], [r_2s_2t_2], [r_3s_3t_3]$; (EFG) — новый символ грани (efg) ; $e, f, g \neq 0$.

Допустим, что матрица преобразования осей

$$(M) = \begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix}.$$

Нетрудно заметить (рис. 52), что числа, записанные в 1-й строке матрицы (M), — координаты первого от начала узла (N_1) на оси X' , измеренные элементарными единицами вдоль координатных осей X, Y, Z старой системы, числа 2-й строки соответствуют подобным координатам первого узла (P_1) на оси Y' , 3-й строки — то же для оси Z' . Взяв отношения этих чисел и исключив общий множитель, получим старые символы новых координатных осей X', Y', Z' :

$$u_A : v_A : w_A = n_1 r_1 : n_1 s_1 : n_1 t_1 = r_1 : s_1 : t_1 \rightarrow [r_1 s_1 t_1],$$

$$u_B : v_B : w_B = n_2 r_2 : n_2 s_2 : n_2 t_2 = r_2 : s_2 : t_2 \rightarrow [r_2 s_2 t_2],$$

$$u_C : v_C : w_C = n_3 r_3 : n_3 s_3 : n_3 t_3 = r_3 : s_3 : t_3 \rightarrow [r_3 s_3 t_3].$$

Тройки чисел $r_1 s_1 t_1$, $r_2 s_2 t_2$, $r_3 s_3 t_3$ — координаты некоторых точек на осях X' , Y' , Z' ; в общем случае, если $n \neq 1$, эти точки не совпадают с узлами, ближайшими к началу координат

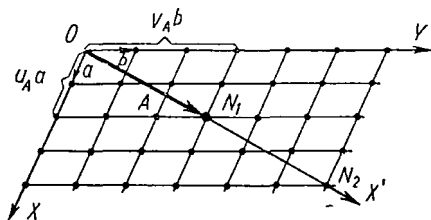


Рис. 52. Члены 1-й строки матрицы пропорциональны индексам ребра, принятого за ось X'

(N_1, P_1, \dots). Следовательно, чтобы по старым символам новых координатных осей составить матрицу преобразования, нужно индексы этих символов записать в соответствующие строки матрицы (1-я строка — индексы символа оси X' , 2-я — оси Y' , 3-я — Z') и ввести для каждой строки поправки — множители:

$$(M) = \begin{pmatrix} n_1 r_1 & n_1 s_1 & n_1 t_1 \\ n_2 r_2 & n_2 s_2 & n_2 t_2 \\ n_3 r_3 & n_3 s_3 & n_3 t_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix}.$$

Поправки могут быть найдены из соотношения старого и нового символов некоторой грани.

Действительно,

$$\begin{aligned} E\rho &= eu_A + fv_A + gw_A = en_1 r_1 + fn_1 s_1 + gn_1 t_1 = \\ &= n_1 (er_1 + fs_1 + gt_1). \end{aligned}$$

Отсюда

$$n_1 = \frac{E\rho}{er_1 + fs_1 + gt_1}.$$

По аналогии

$$n_2 = \frac{F\rho}{er_2 + fs_2 + gt_2} \quad \text{и} \quad n_3 = \frac{G\rho}{er_3 + fs_3 + gt_3},$$

где ρ — некоторый коэффициент пропорциональности, которым следует пренебречь, так как матрица (M) служит в дальнейшем для определения символов (т. е. отношений индексов) граней и ребер кристаллического многогранника.

Если направления координатных осей в новой установке сохраняются, а выбирается лишь другая единичная грань, матрица преобразования осей $(M) = \begin{pmatrix} n_1 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 & 0 \\ 0 & 0 & n_3 \end{pmatrix}$, где из предыдущего

$$n_1 = \frac{E}{e}, \quad n_2 = \frac{F}{f} \quad \text{и} \quad n_3 = \frac{G}{g}.$$

Тогда

$$H : K : L = h \frac{E}{e} : k \frac{F}{f} : l \frac{G}{g}.$$

В этом частном случае весьма несложным должно быть и традиционно кристаллографическое решение. Пусть параметры старой единичной грани — a_e, b_e, c_e , новой — A_e, B_e, C_e . Параметры грани (efg) , или (EFG) , — a, b, c ; грани (hkl) , или (HKL) , — a_x, b_x, c_x .

Из определения понятия «символ грани» следует

$$e : f : g = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c}, \quad E : F : G = \frac{A_e}{a} : \frac{B_e}{b} : \frac{C_e}{c}$$

и

$$h : k : l = \frac{a_e}{a_x} : \frac{b_e}{b_x} : \frac{c_e}{c_x}, \quad H : K : L = \frac{A_e}{a_x} : \frac{B_e}{b_x} : \frac{C_e}{c_x}.$$

Откуда

$$H : K : L = h \frac{E}{e} : k \frac{F}{f} : l \frac{G}{g}.$$

2. Новые координатные оси заданы новыми символами четырех граней, причем три из них в старой системе — координатные грани: $(H_1K_1L_1)$ — новый символ грани (100), $(H_2K_2L_2)$ — грани (010), $(H_3K_3L_3)$ — грани (001), (EFG) — грани (efg) ; $e, f, g \neq 0$.

Допустим, что матрица преобразования осей

$$(M) = \begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix},$$

тогда новый символ грани (100) можно получить умножением матриц с последующим исключением общего множителя:

$$\begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \\ u_C \end{pmatrix},$$

$$u_A : u_B : u_C = n_1 H_1 : n_1 K_1 : n_1 L_1 = H_1 : K_1 : L_1 \rightarrow (H_1 K_1 L_1).$$

Аналогично, для грани (010)

$$v_A : v_B : v_C = n_2 H_2 : n_2 K_2 : n_2 L_2 = H_2 : K_2 : L_2 \rightarrow (H_2 K_2 L_2).$$

и для грани (001)

$$w_A : w_B : w_C = n_3 H_3 : n_3 K_3 : n_3 L_3 = H_3 : K_3 : L_3 \rightarrow (H_3 K_3 L_3).$$

Таким образом, чтобы составить матрицу преобразования индексов, нужно новые символы старых координатных граней записать в соответствующие столбцы матрицы, умножив при этом члены каждого столбца на поправки — множители n_1, n_2, n_3 , которые можно получить, решив систему уравнений, выведенную из соотношения между старым (efg) и новым (EFG) символами некоторой четвертой грани.

Действительно,

$$pE = u_A e + v_A f + w_A g,$$

$$pF = u_B e + v_B f + w_B g,$$

$$pG = u_C e + v_C f + w_C g,$$

где p — коэффициент пропорциональности, которым в дальнейшем пренебрегаем (см. стр. 75).

Поэтому

$$E = n_1 H_1 e + n_2 H_2 f + n_3 H_3 g,$$

$$F = n_1 K_1 e + n_2 K_2 f + n_3 K_3 g,$$

$$G = n_1 L_1 e + n_2 L_2 f + n_3 L_3 g$$

(см. также задачу XII).

3. Новые координатные оси заданы символами четырех граней кристалла, три из которых не лежат в одной зоне: $(H_1 K_1 L_1)$, $(H_2 K_2 L_2)$, $(H_3 K_3 L_3)$ и $(H_4 K_4 L_4)$ — новые символы граней $(h_1 k_1 l_1)$, $(h_2 k_2 l_2)$, $(h_3 k_3 l_3)$, $(h_4 k_4 l_4)$.

Элементы искомой матрицы можно вычислить по формулам³⁴, представляющим собой сокращенную запись решения системы из 12 уравнений (см. также задачу XIV):

$$u_A = \begin{vmatrix} k_2 & l_2 \\ k_3 & l_3 \end{vmatrix} P_1 H_1 + \begin{vmatrix} k_3 & l_3 \\ k_1 & l_1 \end{vmatrix} P_2 H_2 + \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} P_3 H_3,$$

$$u_B = \begin{vmatrix} k_2 & l_2 \\ k_3 & l_3 \end{vmatrix} P_1 K_1 + \begin{vmatrix} k_3 & l_3 \\ k_1 & l_1 \end{vmatrix} P_2 K_2 + \begin{vmatrix} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{vmatrix} P_3 K_3,$$

³⁴ «Acta Crystallographica», 1949, vol. 2, p. 322.

$$\begin{aligned}
u_G &= \begin{vmatrix} k_2 l_2 \\ k_3 l_3 \end{vmatrix} P_1 L_1 + \begin{vmatrix} k_3 l_3 \\ k_1 l_1 \end{vmatrix} P_2 L_2 + \begin{vmatrix} k_1 l_1 \\ k_2 l_2 \end{vmatrix} P_3 L_3, \\
v_A &= \begin{vmatrix} l_2 h_2 \\ l_3 h_3 \end{vmatrix} P_1 H_1 + \begin{vmatrix} l_3 h_3 \\ l_1 h_1 \end{vmatrix} P_2 H_2 + \begin{vmatrix} l_1 h_1 \\ l_2 h_2 \end{vmatrix} P_3 H_3, \\
v_B &= \begin{vmatrix} l_2 h_2 \\ l_3 h_3 \end{vmatrix} P_1 K_1 + \begin{vmatrix} l_3 h_3 \\ l_1 h_1 \end{vmatrix} P_2 K_2 + \begin{vmatrix} l_1 h_1 \\ l_2 h_2 \end{vmatrix} P_3 K_3, \\
v_C &= \begin{vmatrix} l_2 h_2 \\ l_3 h_3 \end{vmatrix} P_1 L_1 + \begin{vmatrix} l_3 h_3 \\ l_1 h_1 \end{vmatrix} P_2 L_2 + \begin{vmatrix} l_1 h_1 \\ l_2 h_2 \end{vmatrix} P_3 L_3, \\
w_A &= \begin{vmatrix} h_2 k_2 \\ h_3 k_3 \end{vmatrix} P_1 H_1 + \begin{vmatrix} h_3 k_3 \\ h_1 k_1 \end{vmatrix} P_2 H_2 + \begin{vmatrix} h_1 k_1 \\ h_2 k_2 \end{vmatrix} P_3 H_3, \\
w_B &= \begin{vmatrix} h_2 k_2 \\ h_3 k_3 \end{vmatrix} P_1 K_1 + \begin{vmatrix} h_3 k_3 \\ h_1 k_1 \end{vmatrix} P_2 K_2 + \begin{vmatrix} h_1 k_1 \\ h_2 k_2 \end{vmatrix} P_3 K_3, \\
w_C &= \begin{vmatrix} h_2 k_2 \\ h_3 k_3 \end{vmatrix} P_1 L_1 + \begin{vmatrix} h_3 k_3 \\ h_1 k_1 \end{vmatrix} P_2 L_2 + \begin{vmatrix} h_1 k_1 \\ h_2 k_2 \end{vmatrix} P_3 L_3,
\end{aligned}$$

где

$$P_1 = \frac{\begin{vmatrix} H_2 K_2 L_2 \\ H_3 K_3 L_3 \\ H_4 K_4 L_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_2 k_2 l_2 \\ h_3 k_3 l_3 \\ h_4 k_4 l_4 \end{vmatrix}}; \quad P_2 = \frac{\begin{vmatrix} H_1 K_1 L_1 \\ H_3 K_3 L_3 \\ H_4 K_4 L_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_1 k_1 l_1 \\ h_3 k_3 l_3 \\ h_4 k_4 l_4 \end{vmatrix}}; \quad P_3 = \frac{\begin{vmatrix} H_1 K_1 L_1 \\ H_2 K_2 L_2 \\ H_4 K_4 L_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_1 k_1 l_1 \\ h_2 k_2 l_2 \\ h_4 k_4 l_4 \end{vmatrix}}.$$

Этими общими формулами можно пользоваться и при решении частных случаев.

Обращаем внимание на то, что при решении макрокристаллографических задач исходными данными всегда служат четыре грани (тетраэдр Вейса или Гаюи); три из них определяют координатные оси, а четвертая — относительные единицы измерения по этим осям. В микрокристаллографии надобность в четвертой грани отпадает, так как единицы измерения «заложены» в самих осях.

Отсюда ясно, что если для преобразования узловых сеток и рядов достаточно задать три соотношения индексов граней (или ребер) в старой и новой системах координат, то в случае кристаллических многогранников нужны четыре таких соотношения.

При переходе от отдельной узловой сетки к грани (а во всех рассуждениях мы сначала заменяли грань — систему узловых сеток — узловой сеткой) теряется тот общий множитель, кото-

рый и отличает грань от узловой сетки. «Лишняя», четвертая грань (контрольная) позволяет вновь ввести эти множители.

Необходимо подчеркнуть, что попытки механически применить правила, выведенные для сеток пространственной решетки, к граням ведут к досадным недоразумениям. Их, в частности, не избежал М. Д. Бургер в «Рентгеновской кристаллографии» (1948).

§ 3. Матричное представление симметрических операций кристаллического многогранника

Симметрическое преобразование (вращение с отражением или без него) можно представить как преобразование координатной системы.

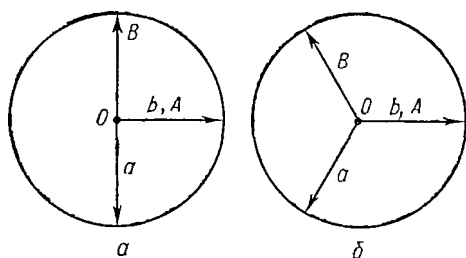


Рис. 53. Повороты координатного репера:
a — на 90° против часовой стрелки;
b — на 120° против часовой стрелки

Для прямого преобразования

$$(M) = \begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix},$$

для обратного

$$(M^{-1}) = \begin{pmatrix} u_a & v_a & w_a \\ u_b & v_b & w_b \\ u_c & v_c & w_c \end{pmatrix}.$$

Так, поворот фигуры вокруг вертикальной оси на 90° по часовой стрелке (4_z^1) может быть представлен поворотом координатного репера в противоположную сторону. Из рис. 53, а

$$\begin{aligned}\vec{A} &= \vec{b}, \\ \vec{B} &= -\vec{a}, \\ \vec{C} &= \vec{c},\end{aligned}$$

откуда

$$(M) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } (M^{-1}) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Для $3'_z$ (рис. 53, б)

$$\left. \begin{aligned}\vec{A} &= \vec{b} \\ \vec{B} &= -\vec{a} - \vec{b} \\ \vec{C} &= \vec{c}\end{aligned} \right\} \text{ и } \left. \begin{aligned}\vec{a} &= -\vec{A} - \vec{B} \\ \vec{b} &= \vec{A} \\ \vec{c} &= \vec{C}\end{aligned} \right\}.$$

следовательно,

$$(M) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } (M^{-1}) = \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

При операциях симметрии кристаллографический координатный репер преобразуется сам в себя, поэтому все матрицы симметрических преобразований, полученные таким способом, всегда будут иметь своими членами только 0 и ± 1 («ноль, один»-матрицы).

Матрицы симметрических операций позволяют вычислять символы преобразованных граней и ребер (координаты точек), причем, как было показано (стр. 72, 73), в первом случае используется прямая матрица (M), во втором — обратная транспонированная $(M^{-1})'$ ³⁵. Очевидно и обратное, по символам исходной и преобразованной грани можно получить (M) , а по подобным символам ребра (координатам точек) — $(M^{-1})'$.

Следует отметить, что при ортогональной координатной системе символы граней и ребер размножаются по одному и тому же

³⁵ Так, при повороте вокруг вертикальной оси на 120° по часовой стрелке (3_2^1) грань (hkl) преобразуется в грань $(k h \bar{1} k l)$, а ребро $[rst]$ (=точка xyz) — в ребро $(s - r \bar{r} t)$ (=точку $y - x xz$) — сравни стр. 41.

закону. Действительно, прямая матрица равна в этом случае обратной транспонированной: $(M) = (M^{-1})'$.

То же имеем и в случае неортогональных систем для операций 2-го порядка $(m, 2, \bar{1})$, прямая матрица которых эквивалентна как обратной транспонированной, так и обратной матрице: $(M) = (M^{-1})' = (M^{-1})$.

Составляя матрицу симметрического преобразования по символам грани (или $(M^{-1})'$ — по символам ребра), мы фактически совершенно отвлекаемся от конкретного геометрического смысла ее членов, однако надо иметь в виду, что при ортогональной координатной системе члены матрицы $(M) = (M^{-1})'$ представляют собой косинусы углов между новым и старым координатными реперами, т. е.

$$\begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a & u_b & u_c \\ v_a & v_b & v_c \\ w_a & w_b & w_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos x'x & \cos x'y & \cos x'z \\ \cos y'x & \cos y'y & \cos y'z \\ \cos z'x & \cos z'y & \cos z'z \end{pmatrix}.$$

Представление кристаллографических операций такими таблицами направляющих косинусов³⁶ во всех сингониях, как это делается, например, в кристаллофизической практике, неудобно, так как искусственное введение ортогонального координатного репера не только усложнит матрицы³⁷, но, что значительно существеннее, не позволит их использовать непосредственно для расчета символов граней и ребер, записанных в обычной кристаллографической системе.

Итак, каждому симметрическому преобразованию кристаллического многогранника можно поставить в соответствие свою «ноль, один»-матрицу, сохраняя во всех случаях кристаллографическую систему координат, причем матрицы с $\Delta = 1$ представляют операции первого рода, а с $\Delta = -1$ — второго.

Матрицы, соответствующие преобразованиям одной точечной группы, также составляют математическую замкнутую группу со всеми ее свойствами, в частности произведение двух матриц даст третью, представляющую симметрическое преобразование этой же группы. При некоммутирующих операциях $(M_1) \cdot (M_2) \neq (M_2) \cdot (M_1)$ (см. также задачу XV).

³⁶ В некристаллографических классах симметрии отсутствует тройка направлений, преобразующаяся в себя при всех операциях группы, и, следовательно, естественная координатная система не даст каких-либо преимуществ, поэтому в таких случаях удобнее вводить прямоугольную систему и пользоваться таблицами косинусов.

³⁷ В этом случае, например, матрица поворота вокруг вертикальной оси на 120° (3_2^1) примет вид $\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

РАЗБОР НЕКОТОРЫХ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ

ЗАДАЧА I

Показать, не прибегая к методу аналогии (см. стр. 12), какими действительными операциями можно заменить преобразования сложных осей 7, 8 и 10-го порядков.

РЕШЕНИЕ

Преобразование сложной оси складывается из двух мнимых и по существу противоречивых операций: одна — 1-го рода (n), другая — 2-го рода (m или $\bar{1}$). Первая операция приводит к идентичности при полном обороте ($n^n = n^{kn} = 1$), вторая — при каждом четном преобразовании ($m^2 = m^{2k} = 1$ и $\bar{1}^2 = \bar{1}^{2k} = 1$), следовательно, показатель степени преобразования (число повторенных преобразований), при котором обе операции одновременно обратятся в идентичность, должен быть четным. Отсюда следует, что порядок циклической группы 2-го рода³⁸ (число ее членов) должен быть четным, а порядок группы равен порядку четной сложной оси и вдвое превышает порядок нечетной³⁹.

Каждое четное преобразование сложной оси «конгруэнтно», поэтому простой поворот является обязательным элементом циклической группы 2-го рода, причем порядок оси, задающей этот

³⁸ Циклическими группами 2-го рода можно называть такие группы, элементами которых служат операции как 1-го, так и 2-го родов.

³⁹ Так, для групп $\overset{\circ}{6}$ и $\bar{6}$ имеем соответственно: $\overset{\circ}{6}^1, \overset{\circ}{6}^2 = 3^1, \overset{\circ}{6}^3 = \bar{1}, \overset{\circ}{6}^4 = 3^{-1}, \overset{\circ}{6}^5 = \overset{\circ}{6}^{-1}, \overset{\circ}{6}^6 = 1$ и $\bar{6}^1, \bar{6}^2 = 3^1, \bar{6}^3 = m, \bar{6}^4 = 3^{-1}, \bar{6}^5 = \bar{6}^{-1}, \bar{6}^6 = 1$, а для групп $\overset{\circ}{3}$ и $\bar{3}$: $\overset{\circ}{3}^1, \overset{\circ}{3}^2 = 3^{-1}, \overset{\circ}{3}^3 = m, \overset{\circ}{3}^4 = 3^1, \overset{\circ}{3}^5 = \overset{\circ}{3}^{-1}, \overset{\circ}{3}^6 = 1$ и $\bar{3}^1, \bar{3}^2 = 3^{-1}, \bar{3}^3 = \bar{1}, \bar{3}^4 = 3^1, \bar{3}^5 = \bar{3}^{-1}, \bar{3}^6 = 1$.

поворот, вдвое ниже порядка циклической группы, т. е. равен порядку нечетной оси и вдвое меньше порядка четной.

Иными словами, у четной сложной оси обе составляющие мнимые, а у нечетной реальность одной из составляющих («поворотной») определяет реальность и другой («отражающей»), т. е. сложные оси нечетных порядков можно заменить комбинациями

простых элементов симметрии: $\overset{\circ}{n}_{\text{неч}} = n \cdot m$ и $\bar{n}_{\text{неч}} = n \cdot \bar{1}$.

Сложные оси четных порядков естественно подразделить на два типа:

а) n — четное, но $n/2$ — нечетное, т. е. $n = 4k + 2$ и б) n — четное и $n/2$ — четное, т. е. $n = 4k + 4$.

В первом случае $n/2$ -е преобразование оказывается энантио-морфным, во втором — конгруэнтным, причем угол $n/2$ -го поворота для зеркальных осей равен π , а для инверсионных — $\pi + n/2 \pi$.

Иными словами, при нечетном $n/2$ зеркальный поворот (π) содержит в качестве простой операции отражение в центре инверсии, а инверсионный ($\pi + n/2 \cdot \pi = 2\pi q$) — отражение в горизонтальной плоскости, т. е. $\overset{\circ}{n} = n/2 \cdot \bar{1}$, а $\bar{n} = n/2 \cdot m_{\perp}$.

При четном $n/2$ отсутствие отражения как в плоскости, так и в центре инверсии предопределяет оригинальность (незаменяемость) этого типа сложных осей, причем общий результат зеркального и инверсионного преобразований для данного порядка совпадает.

Таким образом, на действительные операции можно разложить преобразования сложных осей 7-го и 10-го порядков ($\overset{\circ}{7} = 7 \cdot m_{\perp} = \bar{14}$, $\bar{7} = 7 \cdot \bar{1} = \overset{\circ}{14}$, $\overset{\circ}{10} = 5 \cdot \bar{1} = \bar{5}$ и $\bar{10} = 5 \cdot m_{\perp} = \overset{\circ}{5}$), а $\overset{\circ}{8} = \bar{8}$ — оригинальный элемент симметрии.

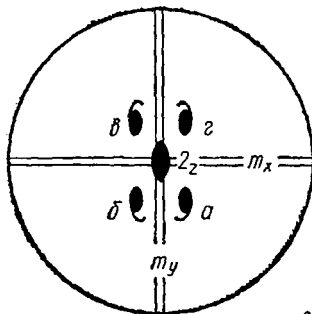
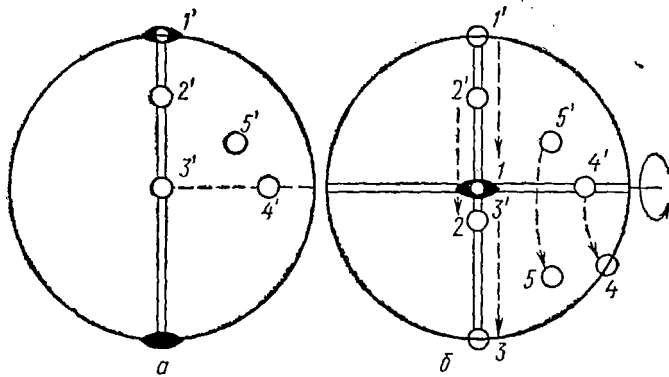
ЗАДАЧА III

Определить, какой класс симметрии изображен на стереограмме (рис. 54, а), и записать его обозначения по Бравэ, Герману — Могену и Шенфлису. Построить квадрат Кейли этого класса. Охарактеризовать простые формы, отвечающие изображенным граням.

Какой класс получим, добавив к операциям этого класса отражение в центре инверсии? Как изменятся в этом случае простые формы? Выписать подклассы полученного класса и записать координаты точек, связанных операциями симметрии с точкой *xyz*.

РЕШЕНИЕ

1. *Определение класса симметрии, его обозначения.* Взаимодействие плоскости симметрии и оси 2-го порядка, лежащей в этой плоскости, порождает плоскость, образующую с исходной



1	2_z	m_x	m_y
2_z	1	m_y	m_x
m_x	m_y	1	2_z
m_y	m_x	2_z	1

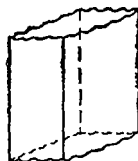
б



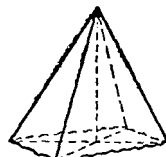
2



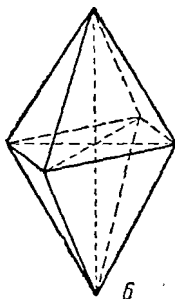
3



4



5



2

б

Рис. 54. К задаче II:
a — условие задачи; *б* — поворот стереограммы вокруг оси Y на 90° . После поворота грани 1', 2', 3', 4' и 5' займут соответственно положение 1, 2, 3, 4 и 5. Ось $2_x \rightarrow 2_z$; v — квадрат Кейли класса $mm2$: $a \rightarrow b = m_y$, $a \rightarrow v = 2_z$, $a \rightarrow g = m_x$, $a \rightarrow a = 1$; g — простые формы класса $mm2$ (2, 3, 4, 5); *б* — общая форма класса mmm

угол 90° . (Действительно, по теореме 2 (см. стр. 18) $P' \cdot P'' = L_2$, если $P' \wedge P'' = 90^\circ$, следовательно, $P' \cdot L_2 = P''$, где $P' \wedge P'' = 90^\circ$).

Полученный класс — класс «подковы» — обозначится по Бравэ $L_2 2P$, по Герману—Могену в данной установке — $2mt$ (вдоль X направлена поворотная ось 2-го порядка — 2, вдоль Y и Z — нормали к плоскостям симметрии — $\bar{2}$). В стандартной для ромбической сингонии установке ось Z всегда совмещают с поворотной осью 2-го порядка, поэтому стереограмму следует повернуть (рис. 54, б) вокруг горизонтальной оси, параллельной наблюдателю (вокруг оси Y) на 90° . Тогда символ $2mt$ запишется как $mt2$. Символ по Шенфлису (C_{2v}), как и символ по Бравэ, установку не отражает.

2. *Построение квадрата Кейли.* Чтобы вычертить квадрат Кейли, необходимо получить все операции этого класса, что нелегко сделать, размножив фигурку общего положения (рис. 54, в).

Группа $mt2$ интересна тем, что произведение двух любых операций, не равных 1, равно третьей операции. Такая же особенность отличает еще две группы 4-го порядка — $2/m$ и 222 ⁴⁰ (сравни группы 4 и $\bar{4}$).

3. *Характеристика простых форм класса $mt2$.* Грань 1, не размножаясь элементами симметрии, образует одногранную форму.

Грани 2 и 3 создают двугранные, следовательно, также открытые формы; в первом случае грани пересекаются (рис. 54, г—3), во втором — параллельны друг другу (рис. 54, г—2).

Грани четырехгранной формы 4 попарно параллельны, поэтому форма открытая, ее собственная симметрия — mtt (рис. 54, г—4). Все грани общей⁴¹ четырехгранной формы 5 пересекаются в одной точке, т. е. форма открытая (рис. 54, г—5).

4. *Получение центросимметричного класса.* Добавив к операциям класса $mt2$ отражение в точке, получим

$$m_x \cdot \bar{1} = 2_x,$$

$$m_y \cdot \bar{1} = 2_y,$$

$$2_z \cdot \bar{1} = m_z.$$

Приходим, таким образом, к полносимметричному классу ромбической сингонии — ромбической голоэдри:

$$mt2 \cdot \bar{1} = m_x m_y 2_z \cdot \bar{1} = \frac{2_x}{m_x} \cdot \frac{2_y}{m_y} \cdot \frac{2_z}{m_z} = mtt.$$

⁴⁰ Эти три группы называют группами Клейна.

⁴¹ Определение общей формы см. на стр. 52.

Обозначения осей в символе опускаем, так как каждая из них — результат взаимодействия двух плоскостей ($2_x = m_y \cdot m_z$, $2_y = m_x \cdot m_z$ и $2_z = m_x \cdot m_y$). По Бравэ — $3L_23PC$, по Шенфлису — D_{2h} .

5. *Формы класса mmm* . Простые формы, грани которых перпендикулярны к «новой» плоскости симметрии (m_z), останутся неизменными, форма 1 станет двугранной (рис. 54, $z-2$), а форма 2 — четырехгранной (рис. 54, $z-4$). Пирамида 5 класса $mm2$ поворотом вокруг 2_x или 2_y либо отражением в плоско-

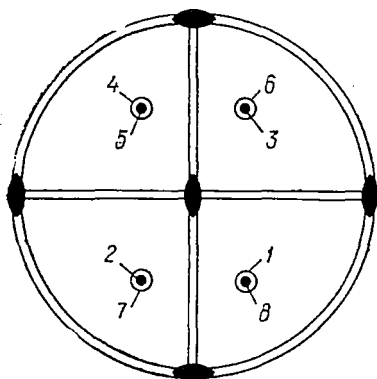


Рис. 55. Размножение точки xyz операциями симметрии класса mmm

сти m_z или в точке удвоится — превратится в восьмигранную бипирамиду (рис. 54, $z-6$) — форму закрытую.

6. *Подклассы класса mmm* : а) $mm2$ и 222 (ромбическая сингония), б) $2/m$, 2 и m (моноклинная сингония) и в) 1 и $\bar{1}$ (триклинная сингония).

7. *Размножение точки xyz операциями класса mmm* (рис. 55). Простые повороты дадут «конгруэнтные» точки (2, 3, 4):

$$xyz \cdot 2_x = \overline{xyz} (2),$$

$$xyz \cdot 2_y = \overline{xy\bar{z}} (3),$$

$$xyz \cdot 2_z = \overline{\bar{x}yz} (4).$$

«Энантиоморфные» точки (5, 6, 7, 8) даст инверсия ($\bar{1}$) или любая другая операция 2-го рода (m_x , m_y , m_z):

$$\left. \begin{array}{l} (1) \, xyz \\ (2) \, \overline{xyz} \\ (3) \, \overline{\bar{x}yz} \\ (4) \, \overline{\bar{x}y\bar{z}} \end{array} \right\} \cdot \bar{1} = \left. \begin{array}{l} \overline{\bar{x}yz} (5), \\ \overline{xyz} (6), \\ \overline{xyz} (7), \\ \overline{\bar{x}yz} (8). \end{array} \right.$$

ЗАДАЧА III

Определить сферические координаты грани (738) в ромбическом кристалле, если $\varphi_{(111)}=62^\circ$, $\rho_{(111)}=49^\circ$.

РЕШЕНИЕ

Кристалл ромбический, поэтому положение координатных граней определено и их вместе с единичной следует принять за исходные.

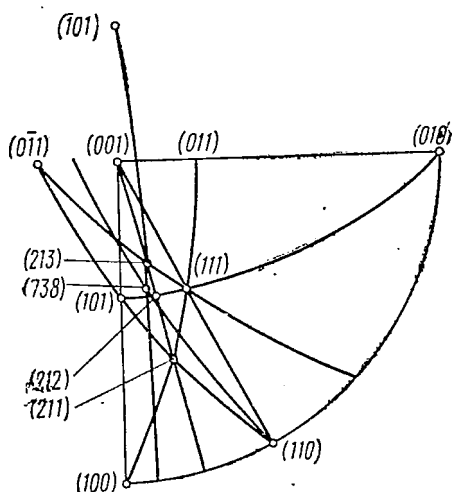


Рис. 56. Определение положения грани (hkl) методом расщепления символов

По правилу сложения (см. стр. 46) можем записать:

$$(738) \left\{ \begin{array}{l} (212) \text{ и } (110) \text{ при } m=4 \text{ и } n=-1; \quad 4(212) + \bar{1}(110) = (738), \\ (213) \text{ и } (\bar{1}01) \text{ при } m=3 \text{ и } n=-1; \quad 3(213) + \bar{1}(\bar{1}01) = (738), \end{array} \right.$$

$$(213) \left\{ \begin{array}{l} (111) \text{ и } (0\bar{1}1) \quad m=2 \text{ и } n=1, \\ (001) \text{ и } (212) \quad m=n=1, \end{array} \right.$$

$$(212) \left\{ \begin{array}{l} (111) \text{ и } (101) \\ (211) \text{ и } (001) \end{array} \right. \quad m=n=1,$$

$$(211) \left\{ \begin{array}{l} (100) \text{ и } (111) \\ (101) \text{ и } (110) \end{array} \right. \quad m=n=1.$$

Нанеся на стереограмму исходные грани, найдем двуединичные грани и затем, развивая зоны, последовательно получим грани (211), (212), (213) и, наконец, (738) (рис. 56). По стереограмме находим координаты этой грани: $\varphi_{(738)}=77^\circ$, $\rho_{(738)}=42,5^\circ$.

ЗАДАЧА IV

Определить символы граней p ($\varphi=126^{\circ}59'$, $\rho=90^{\circ}00'$) и q ($\varphi=31^{\circ}36'$, $\rho=68^{\circ}35'$) кристалла халькантиста по сферическим координатам его основных граней:

	φ	ρ
$a(100)$	$100^{\circ}54'$	$90^{\circ}00'$
$b(010)$	$0^{\circ}00'$	$90^{\circ}00'$
$c(001)$	$76^{\circ}05'$	$17^{\circ}55'$
$e(111)$	$71^{\circ}15'$	$54^{\circ}40'$

РЕШЕНИЕ

Построив стереограмму кристалла, прежде всего определяют выходы координатных осей — в кристалле с непрямоугольной

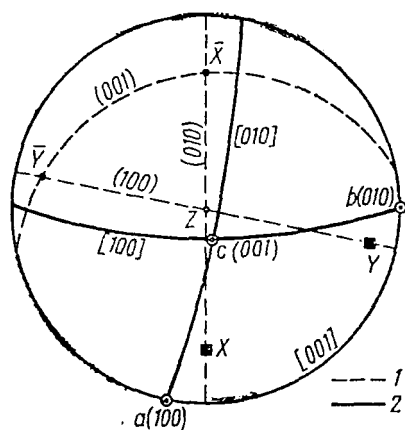


Рис. 57. Определение выходов координатных осей: 1 — стереографические проекции координатных граней; 2 — гномо-стереографические проекции координатных осей

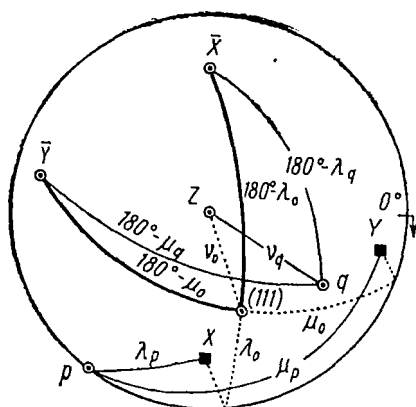


Рис. 58. Определение символов граней методом косинусов Вульфа. Измерение полярных углов λ_0 , μ_0 , ν_0 и λ_x , μ_x , ν_x

системой координат они в общем случае не совпадают с полюсами координатных граней.

Координатные оси представляют собой линии пересечения координатных граней: X — (010) и (001) , Y — (100) и (001) , Z — (010) и (100) . Поэтому стереографическими проекциями этих осей будут точки пересечения стереографических проекций координатных граней, т. е. дуг («экваторов»), полюсами которых служат гномо-стереографические проекции координатных граней (рис. 57). Из этого же рисунка очевиден и другой путь нахождения выходов осей. Дуга, проходящая через гномо-стереографиче-

ские проекции граней (100) и (010), есть гномостереографическая проекция ребра пересечения этих граней, и полюс такой дуги — стереографическая проекция оси Z . Таким же образом Y — полюс дуги [(100) и (001)], а X — [(001) и (010)].

Промерив по стереограмме (рис. 58) полярные углы λ_0, μ_0, ν_0 и λ_x, μ_x, ν_x , решаем уравнение

$$h_x : k_x : l_x = \frac{\cos \lambda_x}{\cos \lambda_0} : \frac{\cos \mu_x}{\cos \mu_0} : \frac{\cos \nu_x}{\cos \nu_0}.$$

Для грани p :

$$h_p : k_p : l_p = \frac{\cos 40^\circ}{\cos 56^\circ} : \frac{\cos 116,5^\circ}{\cos 71,5^\circ} : \frac{\cos 90^\circ}{\cos 54,5^\circ},$$

$$h_p : k_p : l_p = 1,37 : 1,35 : 0 \rightarrow 1 : \bar{1} : 0 \rightarrow (\bar{1}10).$$

Для грани q :

$$h_q : k_q : l_q = \frac{\cos 69^\circ}{\cos 56^\circ} : \frac{\cos 35,5^\circ}{\cos 71,5^\circ} : \frac{\cos 68,5^\circ}{\cos 54,5^\circ},$$

$$h_q : k_q : l_q = 0,641 : \bar{2},50 : 0,631 \rightarrow 1 : \bar{4} : 1 \rightarrow (1\bar{4}1).$$

ЗАДАЧА V

Определить элементы (геометрические константы) кристалла халькантиста по его основным граням (см. задачу IV).

РЕШЕНИЕ

Осевые углы измеряют по стереограмме (рис. 59), причем между одноименными выходами осей (YZ или $\bar{Y}\bar{Z}$ и т. д.) получают углы α, β, γ , между разноименными — $(180^\circ - \alpha), (180^\circ - \beta), (180^\circ - \gamma)$.

Углы α, β, γ можно получить и по гномостереографическим проекциям осей как углы между двумя дугами.

Отношение осевых отрезков определяет уравнение

$$\frac{a}{b} : 1 : \frac{c}{b} = \frac{\cos \mu_0}{\cos \lambda_0} : 1 : \frac{\cos \mu_0}{\cos \nu_0}.$$

Другой графический способ определения $\frac{a}{b}$ и $\frac{c}{b}$, позволяющий решать и обратную задачу (задача VI), — метод треугольников. При пересечении единичной и координатных граней (рис. 60) образуются треугольники AOB, AOC и BOC , из которых

$$\frac{a}{b} = \frac{\sin \gamma_a}{\sin \gamma_b} \text{ и } \frac{c}{b} = \frac{\sin \alpha_c}{\sin \alpha_b}.$$

Углы γ_a и γ_b , α_c и α_b , β_a и β_c измеряют по стереограмме (рис. 61) как углы между дугами — гномостереографическими проекциями координатных осей и линий пересечения единичной и координатных граней.

◀ Рис. 59. Измерение осевых углов

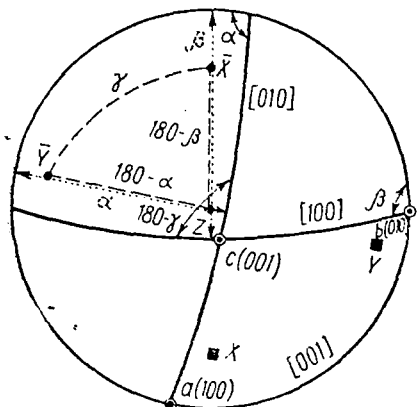
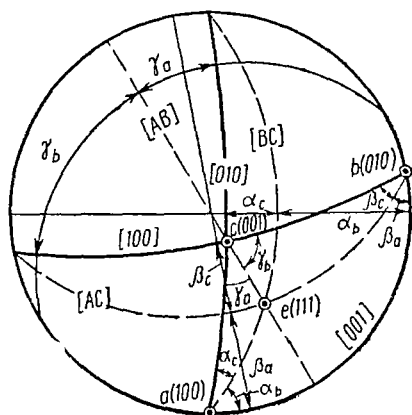
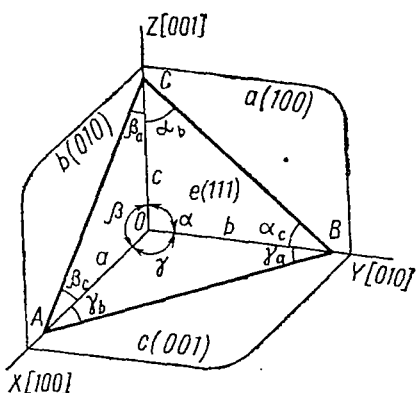


Рис. 60. К методу треугольников

Рис. 61. Определение геометрических констант кристалла методом треугольников:

— — — — — вспомогательные дуги для измерения углов α_b , α_c , β_a , β_c и γ_a , γ_b



В данном случае $\gamma_a = 32 \frac{1^\circ}{4}$, $\gamma_b = 70 \frac{1^\circ}{2}$ и $\alpha_c = 27 \frac{1^\circ}{4}$, $\alpha_b = 54 \frac{3^\circ}{4}$. Откуда $\frac{a}{b} = 0,568$; $\frac{c}{b} = 0,561$.

ЗАДАЧА VI (ОБРАТНАЯ К ЗАДАЧЕ V)

Даны элементы кристалла халькантита:

$$\frac{a}{b} : 1 : \frac{c}{b} = 0,5715 : 1 : 0,5575,$$

$$\alpha = 97^{\circ}44', \quad \beta = 107^{\circ}26', \quad \gamma = 77^{\circ}20'.$$

Построить стереограмму основных граней (100), (010), (001) и (111).

РЕШЕНИЕ

Построение проекций координатных граней

1. *Определение выходов координатных осей.* Ось Z распологаем вертикально, тогда плоскости осей ZX и ZY будут также вертикальными (рис. 62).

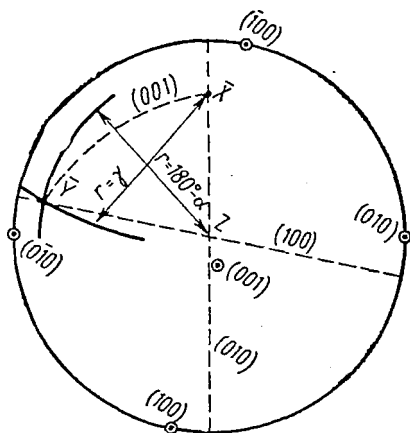


Рис. 62. Определение выходов координатных осей по осевым углам

Ось X направляем на наблюдателя, причем ее положительный выход окажется под плоскостью проекций, так как угол $\beta > 90^{\circ}$. Невидимый выход оси X можно найти, отсчитав от выхода оси Z — центра круга проекций — угол $\beta = 107^{\circ}26'$. Видимый выход отрицательного направления оси X определится углом $180^{\circ} - \beta = 180^{\circ} - 107^{\circ}26' = 72^{\circ}34'$.

Ось Y образует угол $180^{\circ} - \alpha = 180^{\circ} - 97^{\circ}44' = 82^{\circ}16'$ с осью Z и $\gamma = 77^{\circ}20'$ — с осью X, поэтому выход оси Y есть точка пересечения двух дуг: все точки первой находятся на угловом расстоянии $180^{\circ} - \alpha$ от оси Z, точки второй — на расстоянии γ от X.

2. *Определение положения граней (100), (010) и (001).* Гномостереографические проекции координатных граней (100), (010) и (001) находятся как полюсы дуг \overline{YZ} , \overline{XZ} и \overline{XY} , т. е. дуг, проходящих через выходы координатных осей (рис. 62).

Определение положения единичной грани

Чтобы найти положение единичной грани, надо по элементам кристалла построить вспомогательные треугольники BOC и AOC

(задача V), из которых определить α_b и β_a (рис. 63, а). Затем на стереограмме (рис. 63, б) из точек (100) и (010) провести дуги, образующие с окружностью основного круга (проекцией оси Z)

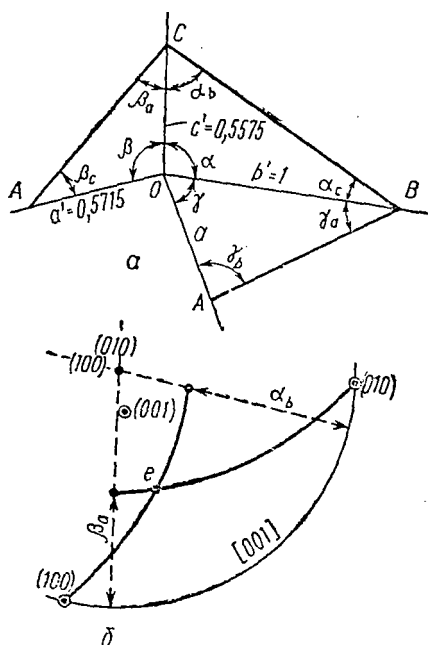


Рис. 63. Получение единичной грани по элементам кристалла

углы α_b и β_a соответственно. Точка пересечения этих дуг (e) и есть проекция единичной грани.

ЗАДАЧА VII

Определить симметрию (двойниковую группу) двойника прорастания кристалла класса $m\bar{3}$ при двойниковании по $2'_{[112]}$. То же для двойника сростания.

РЕШЕНИЕ

Построив стереограмму группы $m\bar{3}$, отмечаем выход двойнивающей оси $2'_{[112]}$. В общем случае для этого надо, пользуясь соотношением $hr + ks + lt = 0$, подобрать две грани с простейшими символами, параллельные этой оси. Дуга, проходящая через гномостереографические проекции этих граней, даст гномостереографическую проекцию искомой оси, поэтому полюс этой дуги — стереографическая проекция заданной оси; положение граней легко получить «методом расщепления» (см. стр. 47). В данной задаче решение упрощается, так как в кубическом кристалле

направление $[rst]$ перпендикулярно к плоскости (rst) , позицию которой также можно получить «расщеплением».

Из стереограммы очевидно, что единственным элементом симметрии, который может перейти в двойниковую группу, оказывается в данном случае ось $\bar{3}_y \perp 2_{[\bar{1}12]}$ ⁴². Тогда предполагаемая сохранившаяся подгруппа — $\bar{3}$ (рис. 64).

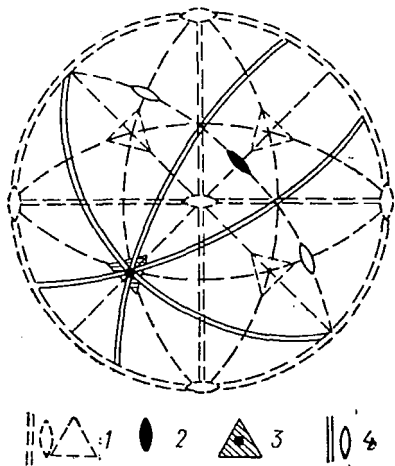


Рис. 64. К задаче VII:

1 — элементы симметрии монокристалла; 2 — двойнико-
 ующая ось; 3 — элементы сим-
 метрии сохранившейся под-
 группы; 4 — порожденные
 двойниковые элементы симмет-
 рии

Взаимодействие элементов этой подгруппы с осью $2'$ приведет к полной двойниковой группе $\bar{3}m' = \bar{3} \frac{2'}{m'}$. Ее порядок (12) вдвое превышает порядок сохранившейся подгруппы, что и подтверждает правильность нашего предположения.

В двойнике срastания в сохранившуюся подгруппу перейдет лишь ось $3 = 3_y$, поэтому симметрия двойника срastания — $32'$.

ЗАДАЧА VIII

Определить в тетрагональном кристалле положение двойникового аналога грани $P(211)$, если $\rho_{(111)} = 48^\circ$, а двойнико-
 ующая ось A совпадает с нормалью к грани $A(\bar{1}\bar{1}2)$. То же при двойни-
 ковании по плоскости $Q(011)$.

РЕШЕНИЕ

Двойнико-
 ующий элемент — ось $[\bar{1}\bar{1}2]$

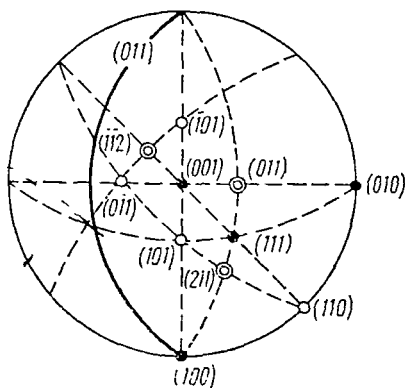
Полюсы граней P и A находим на пересечениях следующих зон (рис. 65):

⁴² Если $3_y (= [\bar{1}\bar{1}1]) \perp [\bar{1}\bar{1}2]$, то в кубическом кристалле $(\bar{1}\bar{1}1)$ должна быть параллельна $[\bar{1}\bar{1}2]$, что подтверждается соотношением $hr + ks + lt = 0$.

$$(211) = [(101) \cdot (110)] \text{ и } [(100) \cdot (111)],$$

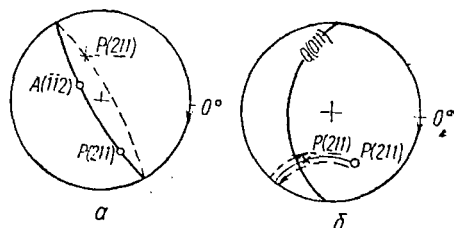
$$\bar{(1}\bar{1}2) = [(110) \cdot (001)] \text{ и } [(0\bar{1}1) \cdot \bar{(1}01)].$$

Поставив полюсы обеих граней на один меридиан сетки Вульфа (рис. 66, а), отсчитываем по этому меридиану от полюса ($\bar{1}\bar{1}2$) в сторону, противоположную грани (211), угол, равный углу



◀ Рис. 65. Определение полюсов граней (211), ($\bar{1}\bar{1}2$) и (011):
 $\varphi_{(211)} = 63,5^\circ$; $\rho_{(211)} = 60,5^\circ$;
 $\rho_{(\bar{1}\bar{1}2)} = 225^\circ$; $\rho_{(\bar{1}\bar{1}2)} = 29^\circ$;
 $\rho_{(011)} = 38^\circ$

▼ Рис. 66. К задаче VIII



между этими полюсами ($AP=AP$). Искомая грань $\underline{P(211)}$ занимает положение \underline{P} ($\varphi=242,5^\circ$, $\rho=117^\circ$).

Следует обратить внимание на то, что на стереограмме невидимым продолжением данного меридиана служит меридиан симметричный.

Двойникующий элемент — плоскость (011)

Параллели сетки Вульфа перпендикулярны ее меридианам, поэтому, построив стереографическую проекцию двойникующей плоскости (рис. 65), откладываем по параллели угловое расстояние, равное угловому расстоянию от полюса грани \underline{P} до меридиана — стереографической проекции двойникующей плоскости ($\sphericalcap Pm = \sphericalcap Pm$) (рис. 66, б). Таким образом, $\varphi(\underline{211}) = 116^\circ$, $\rho(\underline{211}) = 119,5^\circ$.

Следует помнить, что невидимое продолжение параллели совпадает с ее видимым следом.

Определяя положение двойникового аналога грани \underline{P} , можно для наглядности поставить двойникующую ось (соответственно двойникующую плоскость) вертикально, для чего следует повернуть стереограмму вокруг горизонтальной оси. Эта горизонтальная ось совпадет с вертикальным диаметром сетки Вульфа, если стереографическую проекцию двойникующей оси поставить на

экватор этой сетки (соответственно проекцию двойнивающей плоскости — на ее меридиан). При повороте вокруг этой горизонтальной оси все точки стереограммы будут перемещаться по параллелям сетки Вульфа.

ЗАДАЧА IX

Новая, структурная, установка для хиолита (класс $\frac{4}{m} mm$) отличается от морфологической поворотом координатной системы вокруг оси Z . Определить: 1) новые символы граней (012) , (111) , (011) и (010) ; 2) старый символ новой единичной грани; 3) новый символ меридионального ребра бипирамиды, обозначенной в старой установке $\{021\}$.

РЕШЕНИЕ

1. Для тетрагонального кристалла с боковыми особыми направлениями оси X и Y можно выбрать двойку, причем соответствующие реперы будут повернуты относительно друг друга на 45° вокруг оси Z .

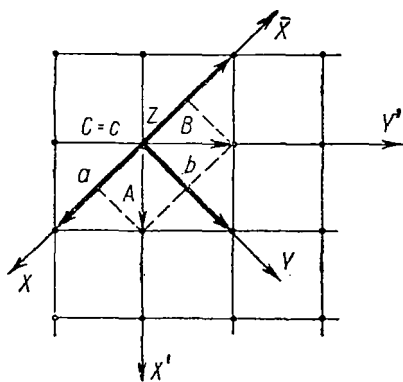


Рис. 67. К задаче IX

Очевидно, что структурное исследование позволит совместить оси X и Y с теми особыми направлениями, элементарные единицы A , B , C (периоды идентичности) вдоль которых кратчайшие.

Из рис. 67:

$$\left. \begin{aligned} \vec{A} &= \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}, \\ \vec{B} &= -\frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}, \\ \vec{C} &= \vec{c}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

Следовательно, матрица преобразования осей (и индексов грани)

$$(m) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 / \bar{1} \frac{1}{2} 0 / 001.$$

Новый символ (HKL) грани (012) найдем, перемножив матрицы

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \cdot 0 + \frac{1}{2} \cdot 1 + 0 \cdot 2 \\ \bar{1} \cdot 0 + 1 \cdot 1 + 0 \cdot 2 \\ 0 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + 1 \cdot 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \rightarrow (114). \end{aligned}$$

Таким же образом находим, что грани (111) , (011) и (010) получат соответственно символы (101) , (112) и (110) .

2. Для определения старого символа (hkl) новой единичной грани следует вывести обратную матрицу, что можно сделать либо непосредственно по чертежу, либо решая систему уравнений (1) относительно \vec{a} и \vec{b} :

$$\left. \begin{aligned} \vec{a} &= \vec{A} - \vec{B} \\ \vec{b} &= \vec{A} + \vec{B} \\ \vec{c} &= \vec{C} \end{aligned} \right\}, \quad \text{следовательно,} \quad (M^{-1}) = \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Для проверки:

$$(M) \cdot (M^{-1}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом:

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow (021).$$

3. Вычислив символ меридионального ребра бипирамиды $\{021\}$, преобразуем этот символ к новой установке, для чего используем транспонированную обратную матрицу $(M^{-1})'$: $[rst] = [(021) \cdot (201)] = [112]$ (см. стр. 44),

$$\begin{pmatrix} R \\ S \\ T \end{pmatrix} = (M^{-1})' \cdot \begin{pmatrix} r \\ s \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \bar{1} \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{2} \\ 2 \end{pmatrix} \rightarrow [0\bar{1}1].$$

Задача X

Определить для кальцита (класс $\bar{3}m$) символы ромбоэдра $\{10\bar{1}1\}$ и скаленоэдра $\{12\bar{3}1\}$ в трехосной системе координат Миллера.

РЕШЕНИЕ

В системе Бравэ (см. стр. 39) ось Z направлена вдоль главной оси, оси X , Y (U) совпадают с боковыми особыми направлениями ($\gamma = 120^\circ$, $\alpha = \beta = 90^\circ$). Единичные отрезки ($A' = B' \neq C'$, рис. 68, *a*) определяет грань ромбоэдра.

В системе Миллера (см. стр. 39) координатные оси X , Y , Z выбирают параллельно ребрам ромбоэдра; единичные отрезки — ребра ромбоэдра — равны друг другу ($a = b = c$), осевые углы равны между собой ($\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$, α — угол ромбоэдра).

Чтобы найти матрицы преобразования осей, прежде всего совмещаем начальные точки двух координатных систем, для чего переносим начало системы Бравэ из центра ромбоэдра в его вершину. (Такой перенос не изменит символов граней, так как $A = 2A'$, $C = 2C'$, т. е. $A : C = A' : C'$.)

Таким образом, координатными осями в системе Бравэ можно считать ребра гексагональной призмы, равной по высоте ромбоэдру; горизонтальные ребра такой призмы равны $A = a'\sqrt{3}$, где a' — проекция ребра a ромбоэдра на горизонтальное сечение призмы.

Из рис. 68, *b* очевидно, что

$$\vec{a} = \frac{2}{3} A + \frac{1}{3} B + \frac{1}{3} C,$$

$$\vec{b} = -\frac{1}{3} A + \frac{1}{3} B + \frac{1}{3} C, \quad \vec{c} = -\frac{1}{3} A - \frac{2}{3} B + \frac{1}{3} C.$$

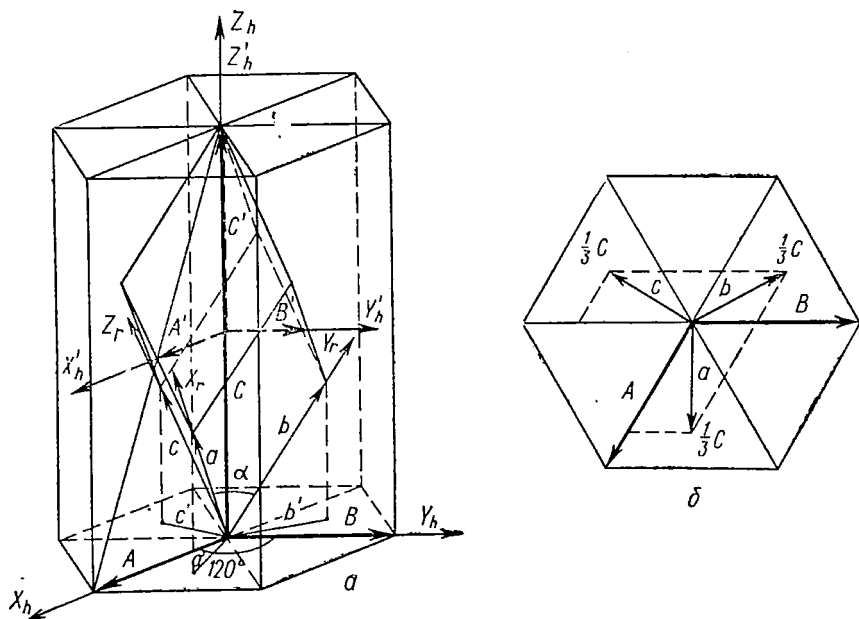


Рис. 68. К задаче X

Отсюда матрица преобразования осей от гексагональной системы к ромбоэдрической:

$$(M) = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Если (pqr) — символ грани в системе Миллера, а $(hkl) = (hk \cdot l)$ — в системе Бравэ, то

$$(pqr) \rightarrow \begin{pmatrix} p \\ q \\ r \end{pmatrix} = (M) \cdot \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix}.$$

Вычеркнув в символах ромбоэдра и скаленоэдра лишний индекс по оси U , получим $(10 \cdot 1)$ и $(12 \cdot 1)$ соответственно.

Тогда

$$(pqr)_{\text{ромбоэдра}} \rightarrow \begin{pmatrix} p \\ q \\ r \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{\bar{1}}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{\bar{1}}{3} & \frac{\bar{2}}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow (100).$$

Точно так же (pqr) скаленоэдра равно $(52\bar{4})$.

Примечание. По рис. 68 нетрудно найти и обратную матрицу (M^{-1}) — от ромбоэдрической системы к гексагональной:

$$(M^{-1}) = \begin{pmatrix} 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \bar{1}\bar{1}0/01\bar{1}/111.$$

Иногда в такую матрицу вводят дополнительную строку, соответствующую индексу $i = -h - k$.

Из $\bar{1}\bar{1}0/01\bar{1}/111$ $h = p - q$, $k = q - r$, следовательно, $i = q - p + r - q = -p + r$, и матрица будет записана как $\bar{1}\bar{1}0/01\bar{1}/\bar{1}01/111$.

Соответственно $(M) = \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} / \frac{\bar{1}}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} / \frac{\bar{1}}{3} \frac{\bar{2}}{3} \frac{1}{3}$ приходится записывать как $\frac{2}{3} \frac{1}{3} 0 / \frac{\bar{1}}{3} \frac{1}{3} 0 / \frac{\bar{1}}{3} \frac{\bar{2}}{3} 0 / \frac{1}{3}$.

Задача XI

Для кристаллов ковеллина приводимая в справочниках матрица преобразования осей к новой, структурной, установке записывается как

$$(M^*) = \frac{1}{3} 0 \frac{\bar{1}}{3} 0 / \frac{\bar{1}}{3} \frac{1}{3} 00/0 \frac{\bar{1}}{3} \frac{1}{2} 0/0002.$$

Получить матрицу преобразования осей к старой системе координат.

РЕШЕНИЕ

Перейдем к обычной трехстрочной матрице, для чего из соотношения между $(hkil)$ и $(HKIL)$ получим соотношение между $(hk \cdot l)$ и $(HK \cdot L)$:

$$(HKIL) \rightarrow \begin{pmatrix} H \\ K \\ I \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$H : K : I : L = (h - i) : (k - h) : (i - k) : 6l.$$

Так как $i = -h - k$, то $H : K : I : L = (2h + k) : (-h + k) : (-h - 2k) : 6l$
и $H : K : L = (2h + k) : (-h + k) : 6l$.

Откуда

$$(M) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad (M^{-1}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \bar{1} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} \end{pmatrix}.$$

Чтобы записать обратную матрицу в форме, принятой в литературе, определим (hkl) по (HKL) :

$$(hkl) \rightarrow \begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \bar{1} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$h : k : l = (2H - 2K) : (2H + 4K) : L.$$

Введя «лишнюю» ось, получим

$$h : k : i : l = (2H - 2K) : (2H + 4K) : (-4H - 2K) : L$$

или

$$h : k : i : l = (2H - 2K) : (2K - 2I) : (-2H - 2I) : L.$$

Откуда

$$(M^{*-1}) = \begin{pmatrix} 2 & \bar{2} & 0 & 0 \\ 0 & 2 & \bar{2} & 0 \\ \bar{2} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Для проверки возьмем в старой системе грань $(12\bar{3}1) = (12 \cdot 1)$.

1. Используем обычную форму матриц — (M) и (M^{-1}) :

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ 6 \end{pmatrix} \rightarrow (416) = (41\bar{5}6)$$

и обратно

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{\bar{1}}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow (121) = (12\bar{3}1).$$

2. Используем усложненную форму матриц — (M^*) и (M^{*-1}) :

$$\begin{pmatrix} H \\ K \\ I \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & \frac{\bar{1}}{3} & 0 \\ \frac{\bar{1}}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\bar{1}}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \bar{3} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ \bar{5} \\ 6 \end{pmatrix} \rightarrow (41\bar{5}6)$$

и обратно

$$\begin{pmatrix} h \\ k \\ i \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{2}\bar{2}00 \\ 02\bar{2}\bar{0} \\ \bar{2}020 \\ 0001 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ \bar{5} \\ 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \bar{3} \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow (12\bar{3}1).$$

ЗАДАЧА XII

По сферическим координатам граней (201) , $(02\bar{1})$, $(\bar{1}31)$ и (041) определить положение на стереограмме основных граней этого кристалла — (100) , (010) , (001) и (111) .

Преобразуем координатную систему таким образом, чтобы исходные грани оказались основными:

$$(h_1 k_1 l_1) = (201) \rightarrow (100) = (H_1 K_1 L_1),$$

$$(h_2 k_2 l_2) = (02\bar{1}) \rightarrow (010) = (H_2 K_2 L_2),$$

$$(h_3 k_3 l_3) = (\bar{1}31) \rightarrow (001) = (H_3 K_3 L_3),$$

$$(efg) = (041) \rightarrow (111) = (EFG).$$

Зависимость между старыми и новыми символами четырех граней позволит составить матрицу преобразования одних осей в другие, что даст возможность решить, какие символы получат в новой системе искомые грани. Положение грани с заданным символом нетрудно определить по стереограмме, если положение четырех основных граней будет известно (см., например, задачу III).

Поскольку известны старые символы новых координатных граней, проще сначала составить матрицу обратного преобразования (M^{-1}). Действительно, члены столбцов такой матрицы пропорциональны старым индексам координатных граней:

$$\begin{pmatrix} h_1 \\ k_1 \\ l_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a & v_a & w_a \\ u_b & v_b & w_b \\ u_c & v_c & w_c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a \\ u_b \\ u_c \end{pmatrix},$$

т. е. $h_1 : k_1 : l_1 = u_a : u_b : u_c$ и т. д. (сравни стр. 76).

Поэтому

$$\begin{pmatrix} n_1 h_1 & n_2 h_2 & n_3 h_3 \\ n_1 k_1 & n_2 k_2 & n_3 k_3 \\ n_1 l_1 & n_2 l_2 & n_3 l_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_a & v_a & w_a \\ u_b & v_b & w_b \\ u_c & v_c & w_c \end{pmatrix} = (M^{-1}).$$

В нашем случае

$$(M^{-1}) = \begin{pmatrix} n_1 \cdot 2 & n_2 \cdot 0 & n_3 \cdot \bar{1} \\ n_1 \cdot 0 & n_2 \cdot 2 & n_3 \cdot 3 \\ n_1 \cdot 1 & n_2 \cdot \bar{1} & n_3 \cdot 1 \end{pmatrix}.$$

Множители n_1, n_2, n_3 можно найти из зависимости между (efg) и (EFG) , так как $e : f : g = (n_1 h_1 E + n_2 h_2 F + n_3 h_3 G) : (n_1 k_1 E + n_2 k_2 F + n_3 k_3 G) : (n_1 l_1 E + n_2 l_2 F + n_3 l_3 G)$.

Опустив коэффициент пропорциональности, получим

$$0 = n_1 \cdot 2 \cdot 1 + n_2 \cdot 0 \cdot 1 + n_3 \cdot \bar{1} \cdot 1,$$

$$4 = n_1 \cdot 0 \cdot 1 + n_2 \cdot 2 \cdot 1 + n_3 \cdot 3 \cdot 1,$$

$$1 = n_1 \cdot 1 \cdot 1 + n_2 \cdot \bar{1} \cdot 1 + n_3 \cdot 1 \cdot 1.$$

Откуда

$$n_1 = \frac{1}{2}, \quad n_2 = \frac{1}{2}, \quad n_3 = 1.$$

Таким образом,

$$(M^{-1}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \bar{1} \\ 0 & 1 & 3 \\ \frac{1}{2} & \frac{\bar{1}}{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Обратная матрица (M^{-1}) позволит вычислить прямую матрицу (M) , которая и даст возможность рассчитать, какие символы получат в новой системе старые основные грани (см. стр. 70):

$$(M) = \begin{pmatrix} \frac{5}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \bar{1} \\ \frac{\bar{1}}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Отсюда новый символ грани (100) :

$$\begin{pmatrix} \frac{5}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \bar{1} \\ \frac{\bar{1}}{6} & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{\bar{1}}{6} \end{pmatrix} \rightarrow (5\bar{3}\bar{1}).$$

Таким же образом для граней (010) , (001) и (111) вычисляем соответственно символы (131) , $(\bar{1}\bar{3}\bar{1})$ и (401) .

Определив позицию этих граней на стереограмме, дадим окончательный ответ.

ЗАДАЧА XIII

Для кристаллов реалгара матрица преобразования координатных осей от старой установки Гольдшмидта к структурной установке Бюргера — $\bar{1}0\bar{1}/0\bar{1}0/001$.

Определить геометрические константы для второй установки, если для первой $a_0 = 0,7203$; $c_0 = 0,4858$; $\beta_0 = 113^\circ 55'$.

1. Вычисление $A : B : C$ (см. стр. 69):

$$\vec{A} : \vec{B} : \vec{C} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0,7203 \\ \bar{1} \\ 0,4858 \end{pmatrix}.$$

Откуда

$$\vec{A}' = \rho \vec{A} = \rho(-0,7203 \rightarrow -0,4858),$$

$$\vec{B}' = \rho \vec{B} = \rho(-\bar{1}),$$

$$\vec{C}' = \rho \vec{C} = \rho(0,4858).$$

Получим

$$\begin{aligned} (\vec{A}' \cdot \vec{A}') &= (\vec{A}')^2 = \rho(-0,7203 \rightarrow -0,4858) \cdot \rho(-0,7203 \rightarrow -0,4858) = \\ &= \rho^2(0,7203^2 + 0,4858^2 + 2 \cdot 0,7203 \cdot 0,4858 \cdot \cos 113^\circ 55') = \rho^2 \cdot 0,4711; \end{aligned}$$

$$A' = \rho \cdot 0,6864; \quad B' = \rho; \quad C' = \rho \cdot 0,4858.$$

Следовательно,

$$A : B : C = A' : B' : C' = \frac{A'}{B'} : 1 : \frac{C'}{B'} = 0,6864 : 1 : 0,4858.$$

2. Вычисление $\beta_B = \widehat{A\bar{C}}$ (см. стр. 70):

$$\begin{aligned} \cos(\widehat{A\bar{C}}) &= \frac{\vec{A} \cdot \vec{C}}{A \cdot C} = \frac{\vec{A}' \cdot \vec{C}'}{A' \cdot C'} = \frac{(-0,7203 \rightarrow -0,4858) \cdot 0,4858}{0,6864 \cdot 0,4858} = \\ &= \frac{(-0,7203 \cdot 0,4858 \cdot \cos 113^\circ 55') - 0,4858^2}{0,6864 \cdot 0,4858} = \\ &= \frac{0,2920 - 0,4858}{0,6864} = \frac{0,1938}{0,6864}. \end{aligned}$$

Откуда $\beta_B = -73^\circ 36'$, или $\beta_B = 180^\circ - 73^\circ 36' = 106^\circ 24'$.

ЗАДАЧА XIV

Определить для кристаллов гипса матрицу преобразования осей от установки Гольдшмидта к установке Терпстра, если граням (010), (011) и ($\bar{1}$ 11) в первой установке отвечают (010), ($\bar{1}$ 22) и (0 $\bar{1}$ 1) во второй, а ребру [$\bar{1}$ 21] — ребро [$\bar{1}$ 11].

РЕШЕНИЕ

Чтобы получить матрицу преобразования координатных осей, надо исходить из четырех однородных элементов огранения кристалла: либо из четырех граней, три из которых не лежат в одном поясе, либо из четырех ребер, два из которых не параллельны друг другу. Для этого, отметив на стереограмме (в произвольном положении) 3 грани L , M , N и ребро K (рис. 69), получим возможные ребра LM , LN , MN и возможные грани P , Q и R .

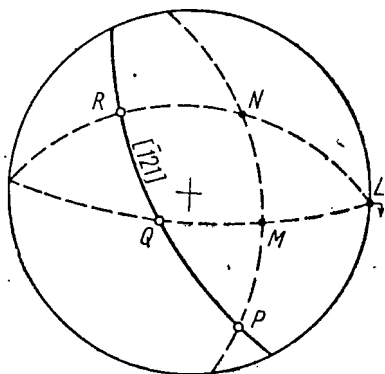


Рис. 69. К задаче XIV

Пусть грань (010) отвечает грань L , $(011) — M$, $(\bar{1}\bar{1}1) — N$ и ребру $[\bar{1}21] —$ ребро K .

I способ. Исходными элементами служат 4 грани, например заданные L (010) , M (011) и возможные R и P (рис. 69).

Определим старые и новые символы граней R и P (см. стр. 44). Грань R параллельна данному ребру K и ребру LN , $P —$ ребрам K и MN , поэтому символ грани R :

$$(hkl) = ([\bar{1}21] \cdot [(010) \cdot (\bar{1}11)]) = ([\bar{1}21] \cdot [101]) = (11\bar{1}),$$

$$(HKL) = ([1\bar{1}1] \cdot [(0\bar{1}0) \cdot (0\bar{1}1)]) = ([1\bar{1}1] \cdot [\bar{1}00]) = (0\bar{1}\bar{1})^{43},$$

⁴³ При перекрестном умножении необходимо для (HKL) соблюдать ту же последовательность, что и для (hkl) . То же для $[RST]$ и $[rsf]$.

Так, если

$$\begin{array}{c} h_1 \left| \begin{array}{ccc} k_1 & l_1 & h_1 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| L_1 \quad \text{и} \quad r_1 \left| \begin{array}{ccc} s_1 & t_1 & r_1 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| T_1 \\ h_2 \left| \begin{array}{ccc} k_2 & l_2 & h_2 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| L_2 \quad \text{и} \quad r_2 \left| \begin{array}{ccc} s_2 & t_2 & r_2 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| T_2 \end{array},$$

то обязательно

$$\begin{array}{c} H_1 \left| \begin{array}{ccc} K_1 & L_1 & H_1 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| L_1 \quad \text{и} \quad R_1 \left| \begin{array}{ccc} S_1 & T_1 & R_1 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| T_1 \\ H_2 \left| \begin{array}{ccc} K_2 & L_2 & H_2 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| L_2 \quad \text{и} \quad R_2 \left| \begin{array}{ccc} S_2 & T_2 & R_2 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| T_2 \end{array},$$

а не

$$\begin{array}{c} H_2 \left| \begin{array}{ccc} K_2 & L_2 & H_2 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| L_2 \quad \text{и} \quad R_2 \left| \begin{array}{ccc} S_2 & T_2 & R_2 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| T_2 \\ H_1 \left| \begin{array}{ccc} K_1 & L_1 & H_1 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| L_1 \quad \text{и} \quad R_1 \left| \begin{array}{ccc} S_1 & T_1 & R_1 \\ & \times & \times \\ & & \times \end{array} \right| T_1 \end{array},$$

иначе вместо (HKL) и $[RST]$ получим $(\bar{H} \bar{K} \bar{L})$ и $[\bar{R} \bar{S} \bar{T}]$.

символ грани P :

$$(hkl) = ([\bar{1}21] \cdot [(011) \cdot (\bar{1}11)]) = ([\bar{1}21] \cdot [0\bar{1}1]) = (311),$$

$$(HKL) = ([1\bar{1}1] \cdot [(\bar{1}22) \cdot (0\bar{1}1)]) = ([1\bar{1}1] \cdot [011]) = (2\bar{1}1).$$

Итак,

$$\begin{array}{ll} (h_1 k_1 l_1) = (010) & (H_1 K_1 L_1) = (0\bar{1}0) \\ (h_2 k_2 l_2) = (011) & (H_2 K_2 L_2) = (\bar{1}\bar{2}2) \\ (h_3 k_3 l_3) = (11\bar{1}) & (H_3 K_3 L_3) = (0\bar{1}\bar{1}) \\ (h_4 k_4 l_4) = (311) & (H_4 K_4 L_4) = (2\bar{1}1) \end{array} \quad \text{и}$$

Далее пользуемся формулами, приведенными на стр. 77, 78:

$$P_1 = \frac{\begin{vmatrix} H_2 & K_2 & L_2 \\ H_3 & K_3 & L_3 \\ H_4 & K_4 & L_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \\ h_4 & k_4 & l_4 \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} \bar{1} & \bar{2} & 2 \\ 0 & \bar{1} & \bar{1} \\ \bar{2} & \bar{1} & 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \bar{1} \\ 3 & 1 & 1 \end{vmatrix}} =$$

$$= \frac{\bar{1}(\bar{1} \cdot 1 - \bar{1} \cdot \bar{1}) - \bar{2}(0 \cdot 1 - \bar{1} \cdot \bar{2}) + 2(0 \cdot \bar{1} - \bar{1} \cdot \bar{2})}{0(1 \cdot 1 - \bar{1} \cdot 1) - 1(1 \cdot 1 - \bar{1} \cdot 3) + 1(1 \cdot 1 - 1 \cdot 3)} = \frac{\bar{6}}{\bar{6}} = 1;$$

$$P_2 = \frac{\begin{vmatrix} H_1 & K_1 & L_1 \\ H_3 & K_3 & L_3 \\ H_4 & K_4 & L_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_3 & k_3 & l_3 \\ h_4 & k_4 & l_4 \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & \bar{1} & \bar{1} \\ \bar{2} & \bar{1} & 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & \bar{1} \\ 3 & 1 & 1 \end{vmatrix}} = \frac{1}{2};$$

$$P_3 = \frac{\begin{vmatrix} H_1 & K_1 & L_1 \\ H_2 & K_2 & L_2 \\ H_4 & K_4 & L_4 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_4 & k_4 & l_4 \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & \bar{2} & 2 \\ \bar{2} & \bar{1} & 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 \end{vmatrix}} = 1;$$

$$\begin{aligned} \left| \begin{array}{cc} k_2 & l_2 \\ k_3 & l_3 \end{array} \right| &= \left| \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 1 & \bar{1} \end{array} \right| = \bar{2}; & \left| \begin{array}{cc} k_3 & l_3 \\ k_1 & l_1 \end{array} \right| &= 1; & \left| \begin{array}{cc} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{array} \right| &= 1; \\ \left| \begin{array}{cc} l_2 & h_2 \\ l_3 & h_3 \end{array} \right| &= 1; & \left| \begin{array}{cc} l_3 & h_3 \\ l_1 & h_1 \end{array} \right| &= 0; & \left| \begin{array}{cc} l_1 & h_1 \\ l_2 & h_2 \end{array} \right| &= 0; \\ \left| \begin{array}{cc} h_2 & k_2 \\ h_3 & k_3 \end{array} \right| &= \bar{1}; & \left| \begin{array}{cc} h_3 & k_3 \\ h_1 & k_1 \end{array} \right| &= 1; & \left| \begin{array}{cc} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{array} \right| &= 0. \end{aligned}$$

Откуда

$$\begin{aligned} u_A &= \left| \begin{array}{cc} k_2 & l_2 \\ k_3 & l_3 \end{array} \right| P_1 H_1 + \left| \begin{array}{cc} k_3 & l_3 \\ k_1 & l_1 \end{array} \right| P_2 H_2 + \left| \begin{array}{cc} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{array} \right| P_3 H_3 = \\ &= \bar{2} \cdot 1 \cdot 0 + 1 \cdot \frac{1}{2} \cdot \bar{1} + 1 \cdot 1 \cdot 0 = \frac{\bar{1}}{2}, \\ u_B &= 0 & v_A &= 0 & w_A &= \frac{\bar{1}}{2} \\ u_C &= 0 & v_B &= \bar{1} & w_B &= 0 \\ & & v_C &= 0 & w_C &= 1. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$(M) = \begin{pmatrix} u_A & v_A & w_A \\ u_B & v_B & w_B \\ u_C & v_C & w_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\bar{1}}{2} & 0 & \frac{\bar{1}}{2} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

II способ. Исходными элементами служат четыре ребра, например заданное K и возможные LN , LM и MN (рис. 69).

Определим старые и новые символы возможных ребер.
Символ ребра LN

$$\begin{aligned} [rst] &= [(010) \cdot (\bar{1}11)] = [101], \\ [RST] &= [(0\bar{1}0) \cdot (0\bar{1}1)] = [\bar{1}00]. \end{aligned}$$

Символ ребра LM

$$\begin{aligned} [rst] &= [(010) \cdot (011)] = [100], \\ [RST] &= [(0\bar{1}0) \cdot (\bar{1}\bar{2}2)] = [\bar{2}0\bar{1}]. \end{aligned}$$

Символ ребра MN

$$\begin{aligned} [rst] &= [(011) \cdot (\bar{1}11)] = [0\bar{1}1], \\ [RST] &= [(\bar{1}\bar{2}2) \cdot (0\bar{1}1)] = [011]. \end{aligned}$$

$$v_a = 0, \quad v_b = \bar{1}, \quad v_c = 0,$$

$$\omega_a = \bar{1}, \quad \omega_b = 0, \quad \omega_c = 1.$$

Таким образом,

$$(M^{-1})' = \begin{pmatrix} u_a & u_b & u_c \\ v_a & v_b & v_c \\ \omega_a & \omega_b & \omega_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{2} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Откуда

$$(M^{-1}) = \begin{pmatrix} \bar{2} & 0 & \bar{1} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad (M) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & \bar{1} \\ \bar{2} & 0 & \bar{2} \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

ЗАДАЧА XV

Дать простейшее матричное представление операций класса $6/m$.

РЕШЕНИЕ

Все операции этого класса нетрудно перечислить, воспользовавшись стереограммой на рис. 70, а:

- 1) $(a \rightarrow b) = 6^1,$
- 2) $(a \rightarrow v) = 6^2 = 3^1,$
- 3) $(a \rightarrow e) = 6^3 = 2,$
- 4) $(a \rightarrow d) = 6^4 = 3^2,$
- 5) $(a \rightarrow e) = 6^5 = 6^{-1},$
- 6) $(a \rightarrow ж) = m,$
- 7) $(a \rightarrow z) = \overset{\circ}{6}^1 = \bar{3}^{-1},$
- 8) $(a \rightarrow u) = \overset{\circ}{3}^1 = \bar{6}^{-1},$
- 9) $(a \rightarrow \kappa) = i(\bar{1}),$
- 10) $(a \rightarrow л) = \overset{\circ}{3}^{-1} = \bar{6}^1,$
- 11) $(a \rightarrow м) = \overset{\circ}{6}^{-1} = \bar{3}^1,$
- 12) $(a \rightarrow a) = 6^6 = 6^0 = 1.$

Матрицы, представляющие каждую из этих операций, можно вывести либо по векторной зависимости между исходным $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ и преобразованным $(\vec{A}, \vec{B}, \vec{C})$ координатными реперами, либо по зависимости между исходными и преобразованными индексами грани или ребра (координатами точки). Проще, однако, вычислив одним из этих способов матрицы лишь двух порождающих операций, например $(M_{\bar{6}}^1)$ и (M_m) , все остальные получить как произведения и степени этих исходных матриц.

Поворот координатного репера вокруг вертикальной оси на 60° против часовой стрелки (рис. 70, б) выразится следующей векторной зависимостью:

$$\left. \begin{array}{l} \vec{A} = \vec{a} + \vec{b} \\ \vec{B} = -\vec{a} \\ \vec{C} = \vec{c} \end{array} \right\}, \text{ откуда } (M_{60}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

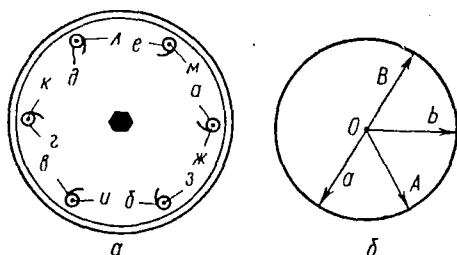


Рис. 70. К задаче XV (черная точка в центре кружка означает, что под фигурой находится такая же, но обращенная к читателю своей изнанкой):

a — стереограмма класса $6/m$; b — поворот координатного репера на 60° против часовой стрелки ($\vec{A} = \vec{a} + \vec{b}$, $\vec{B} = -\vec{a}$, $\vec{C} = \vec{c}$)

При отражении этого же репера в горизонтальной плоскости симметрии

$$\left. \begin{array}{l} \vec{A} = \vec{a} \\ \vec{B} = \vec{b} \\ \vec{C} = -\vec{c} \end{array} \right\}, \text{ следовательно, } (M_m) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

То же получим по символам граней или координатам точек. Действительно, при повороте вокруг вертикальной оси на 60° по часовой стрелке грань (hkl) преобразуется в $(h+k \ \bar{h} \ l)$, а точка xyz — в $yx + yz$ (см. стр. 41, рис. 20, а и б), что дает

$$(M_{60}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ или } (M_{60}^{-1})' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Отражение в горизонтальной плоскости преобразует (hkl) в $(h\bar{k}l)$, а xyz в yxz , что дает

$$(M_m) = (M_m^{-1})' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}.$$

Таким образом,

$$(M_{6'})^2 = (M_{3'}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$(M_{6'})^3 = (M_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Таким же образом

$$(M_{6'})^4 = (M_{3-1}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^4 = \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$(M_{6'})^5 = (M_{6-1}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^5 = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$(M_{3-1}) = (M_m) \cdot (M_{6'}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$(M_{6-1}) = (M_m) \cdot (M_{3'}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$(M_{\bar{1}}) = (M_m) \cdot (M_2) = \begin{pmatrix} \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$(M_{\bar{6}'}) = (M_m) \cdot (M_{3-1}) = \begin{pmatrix} \bar{1} & \bar{1} & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$(M_{\bar{3}}) = (M_m) \cdot (M_{\bar{6}-1}) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

$$(M_1) = (M_m) \cdot (M_m) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Порядок сомножителей в данном случае безразличен, так как все операции коммутируют друг с другом.

УПРАЖНЕНИЯ

§ 1. Симметрия кристаллических многогранников

1⁴⁴. Построить стереографические проекции направлений, заданных своими сферическими координатами:

- а) $A (\varphi=60^\circ, \rho=75^\circ)$, $B (\varphi=125^\circ, \rho=48^\circ)$;
- б) $A (\varphi=305^\circ, \rho=120^\circ)$, $B (\varphi=285^\circ, \rho=165^\circ)$;
- в) $A (\varphi=90^\circ, \rho=90^\circ)$, $B (\varphi=\dots, \rho=0^\circ)$.

2. Определить угол между двумя направлениями, заданными своими сферическими координатами:

- а) $A (\varphi=95^\circ, \rho=35^\circ)$, $B (\varphi=320^\circ, \rho=48^\circ)$;
- б) $A (\varphi=132^\circ, \rho=67^\circ)$, $B (\varphi=25^\circ, \rho=125^\circ)$;
- в) $A (\varphi=180^\circ, \rho=90^\circ)$, $B (\varphi=180^\circ, \rho=35^\circ)$.

3. Построить гномостереографические проекции направлений:

- а) $A (\varphi=0^\circ, \rho=90^\circ)$, $B (\varphi=\dots, \rho=0^\circ)$;
- б) $A (\varphi=45^\circ, \rho=45^\circ)$, $B (\varphi=135^\circ, \rho=45^\circ)$.

4. Построить гномостереографические проекции граней кристаллов и определить углы между гранями:

- а) $A (\varphi=90^\circ, \rho=45^\circ)$, $B (\varphi=180^\circ, \rho=45^\circ)$;
- б) $A (\varphi=75^\circ, \rho=90^\circ)$, $B (\varphi=120^\circ, \rho=90^\circ)$;
- в) $A (\varphi=48^\circ, \rho=24^\circ)$, $B (\varphi=80^\circ, \rho=130^\circ)$.

5. Построить по гониометрическим данным стереограмму кристалла, определить его симметрию, дать набросок общего вида кристалла:

а) №	φ°	ρ°	б) №	φ°	ρ°	в) №	φ°	ρ°
1	52	52	1	32	32	1	102	90
2	172	52	2	85	32	2	192	90
3	292	52	3	212	32	3	282	90
4	...	180	4	265	32	4	12	90
			5	32	148	5	57	45
			6	85	148	6	147	45
			7	212	148	7	237	45
			8	265	148	8	327	45
						9	...	0
						10	...	180

⁴⁴ Решение упражнений 1—7 требует знакомства со стереографической проекцией и с сеткой Вульфа (см. стр. 15).

г) №	φ°	ρ°	д) №	φ°	ρ°
1	25	42	1	60	90
2	65	138	2	134	90
3	265	42	3	240	90
4	245	138	4	314	90
			5	97	25
			6	277	155

6. Определить симметрию следующих кристаллов по их стереограммам:

а) №	φ°	ρ°	б) №	φ°	ρ°	в) №	φ°	ρ°	г) №	φ°	ρ°
1	45	33	1	35	90	1	...	0	1	65	90
2	165	33	2	125	90	2	...	180	2	125	90
3	285	33	3	215	90	3	93	90	3	185	90
4	45	147	4	305	90	4	183	90	4	245	90
5	165	147	5	35	65	5	273	90	5	305	90
6	285	147	6	125	65	6	3	90	6	5	90
			7	215	65	7	48	38	7	35	68
			8	305	65	8	138	38	8	95	68
			9	35	48	9	228	38	9	155	68
			10	125	48	10	318	38	10	215	68
			11	215	48	11	48	142	11	275	68
			12	305	48	12	138	142	12	335	68
			13	...	0	13	228	142	13	35	112
			14	...	180	14	318	142	14	95	112
									15	155	112
									16	215	112
									17	275	112
									18	335	112

7. Отразить разницу в симметрии следующих кристаллов:

а) №	φ°	ρ°		№	φ°	ρ°
1	28	65		1	42	48
2	208	65	и	2	222	48
3	118	115		3	98	132
4	298	115		4	278	132
б) №	φ°	ρ°		№	φ°	ρ°
1	26	49		1	40	57
2	86	131		2	160	57
3	146	49	и	3	280	57
4	206	131		4	85	123
5	266	49		5	205	123
6	326	131		6	325	123
в) №	φ°	ρ°		№	φ°	ρ°
1	30	50		1	25	43
2	120	50		2	205	43
3	210	50		3	115	137
4	300	50	и	4	295	137
5	45	130		5	32	55
6	135	130		6	212	55
7	225	130		7	122	125
8	315	130		8	302	125

8. Действием вертикальной оси 2-го порядка размножить на стереографической проекции следующие грани:

- а) грань, параллельную оси L_2 ,
- б) грань, перпендикулярную к оси L_2 .

Сколько граней имеет каждая простая форма? Закрытая это форма или открытая? ⁴⁵.

9. Действием двух пересекающихся под прямым углом вертикальных плоскостей симметрии и оси 2-го порядка, совпадающей с линией их пересечения, размножить следующие грани:

- а) грань, перпендикулярную к оси L_2 ,
- б) грань, параллельную оси L_2 , но перпендикулярную к плоскости симметрии;
- в) грань общего положения ⁴⁶.

Сколько граней имеет каждая форма? Закрытая она или открытая?

10. Три взаимно перпендикулярные оси симметрии 2-го порядка расположены так, что одна из них вертикальна. Действием этих осей размножить следующие грани и дать характеристику каждой из полученных форм (число граней, закрытая или открытая форма):

- а) вертикальная грань, перпендикулярная к одной из горизонтальных осей L_2 ,
- б) вертикальная грань, не перпендикулярная ни к одной из горизонтальных осей L_2 ,
- в) грань общего положения.

11. Дана вертикальная ось 4-го порядка и перпендикулярная к ней плоскость симметрии. Размножить грани, занимающие различные положения, и дать характеристику каждой из полученных форм (число граней, закрытая или открытая форма).

12. Вертикальная ось 3-го порядка совпадает с линией пересечения трех плоскостей симметрии, образующих друг с другом углы в 60° . Размножить грани, занимающие различные положения, и дать характеристику каждой из полученных форм (число граней, закрытая или открытая форма).

13. Размножая асимметричную фигурку или две произвольно расположенные грани общего положения, сравнить действия следующих сложных осей симметрии: $\bar{2}$, $\dot{2}$, $\bar{1}$, $\dot{1}$. Можно ли заменить эти оси простыми элементами симметрии? Какими?

14. Размножая асимметричную фигурку или две произвольно расположенные грани общего положения, сравнить действия сле-

⁴⁵ Простой формой кристалла называется комплекс граней, связанных симметрическими операциями класса, т. е. «выводящихся» из одной грани путем симметрических операций. Грани закрытой простой формы полностью замыкают заключенное между ними пространство, грани открытой формы не замыкают его; пример закрытой формы — куб, открытой — пирамида (см. стр. 52).

⁴⁶ Грань общего положения не перпендикулярна ни одному элементу симметрии, не параллельна единичному элементу и не равнонаклонна к эквивалентным элементам симметрии (см. стр. 52).

дующих сложных осей симметрии: $\bar{3}$, $\overset{\circ}{3}$, $\bar{6}$, $\overset{\circ}{6}$. Можно ли заменить эти оси простыми элементами симметрии? Какими?

15. Сравнить действия следующих сложных осей симметрии: $\bar{2}$, $\overset{\circ}{2}$, $\bar{4}$, $\overset{\circ}{4}$. Можно ли заменить эти оси простыми элементами симметрии? Какими?

16. Размножая грани различного положения вертикальной осью $\bar{4}$, получить все возможные простые формы и дать их характеристику (число граней, закрытые или открытые формы).

17. Размножая грани различного положения вертикальной осью $\bar{3}$, получить все возможные простые формы и дать их характеристику (число граней, закрытые или открытые формы).

18. Найти зеркальные эквиваленты следующих инверсионных осей: $\bar{3}$, $\bar{5}$, $\bar{7}$, $\bar{9}$. Какими простыми элементами симметрии можно заменить эти оси?

19. Найти инверсионные эквиваленты зеркальных осей: $\overset{\circ}{3}$, $\overset{\circ}{4}$, $\overset{\circ}{5}$, $\overset{\circ}{6}$, $\overset{\circ}{7}$ и $\overset{\circ}{8}$.

20. Действие каких из перечисленных сложной осей — $\overset{\circ}{7}$, $\overset{\circ}{8}$, $\overset{\circ}{9}$, $\overset{\circ}{10}$, $\overset{\circ}{11}$, $\overset{\circ}{12}$ и $\bar{7}$, $\bar{8}$, $\bar{9}$, $\bar{10}$, $\bar{11}$, $\bar{12}$ — нельзя заменить действием простых элементов симметрии?

21. Объяснить, чем отличаются друг от друга нечетные и четные сложные оси.

22. Доказать, что число плоскостей симметрии, пересекающихся вдоль поворотной оси симметрии L_n , равно порядку оси n .

23. Доказать, что общее число осей 2-го порядка, перпендикулярных к оси L_n (побочных осей), равно порядку оси n .

24. Доказать, что последовательные действия поворотной оси 2-го порядка и перпендикулярной к ней плоскости симметрии равносильны отражению в точке, расположенной на пересечении оси с плоскостью симметрии.

25. Доказать, что общее число плоскостей симметрии, пересекающихся вдоль зеркальной оси Φ_n , равно $n/2$ и что общее число порожденных побочных осей L_2 также равно $n/2$.

26. Используя асимметричную фигурку, показать, чему равно последовательное действие поворотной оси 4-го порядка и плоскости, перпендикулярной к этой оси.

27. Показать, размножая асимметричную фигурку, к какому результату приведет поворот вокруг оси $\bar{4}$ и инверсия в точке, расположенной на этой оси.

28. Оси 4 и $\overset{\circ}{4}$ совпадают. Какие еще элементы симметрии неизбежны в этом случае?

29. Оси $\bar{6}$ и $\overset{\circ}{6}$ совпадают. Перечислить результирующие элементы симметрии.

30. Записать результирующие элементы симметрии (во всех случаях оси 3-го и 2-го порядков совпадают):

$$\begin{array}{ll} 3 \cdot \bar{2} = & \bar{3} \cdot \bar{2} = \\ 3 \cdot \overset{\circ}{2} = & \bar{3} \cdot \overset{\circ}{2} = \\ \bar{3} \cdot 2 = & \overset{\circ}{3} \cdot \bar{2} = \\ \overset{\circ}{3} \cdot 2 = & \bar{3} \cdot \overset{\circ}{2} = \end{array}$$

31. Получить результирующие элементы симметрии, считая исходные оси совпадающими:

$$\begin{array}{llll} \overset{\circ}{4} \cdot \overset{\circ}{2} = & \overset{\circ}{5} \cdot \bar{2} = & \overset{\circ}{6} \cdot \bar{2} = & \overset{\circ}{8} \cdot \bar{2} = \\ \bar{4} \cdot \bar{2} = & \bar{5} \cdot \overset{\circ}{2} = & \bar{6} \cdot \overset{\circ}{2} = & \bar{8} \cdot \overset{\circ}{2} = \end{array}$$

32. Чему эквивалентен трехкратный поворот вокруг оси 6 (6^3)?

Чему равно $\bar{6}^3$ и $\overset{\circ}{6}^3$?

33. Записать эквиваленты следующих операций:

а) $\overset{\circ}{6}^3$ и $\overset{\circ}{3}^3$, б) $\overset{\circ}{4}^4$ и $\overset{\circ}{5}^5$, в) $\overset{\circ}{5}^5$ и $\bar{5}^5$.

34. Найти показатель степени:

$$\overset{\circ}{6}^x = 1; \quad \overset{\circ}{3}^x = 1; \quad \bar{6}^x = 1; \quad \bar{3}^x = 1; \quad \overset{\circ}{5}^x = 1 \text{ и } \bar{5}^x = 1.$$

35. Вывести классы симметрии, приняв следующие операции за порождающие (указать, какие из классов некристаллографичны):

а) отражения в двух плоскостях, пересекающихся под углом 90° , 12° , 30° , 36° ;

б) два поворота вокруг двух взаимно перпендикулярных поворотных осей симметрии 4-го и 2-го порядков;

в) два поворота вокруг двух осей 2-го порядка, образующих угол в 30° ;

г) два поворота вокруг взаимно перпендикулярных осей 6-го и 2-го порядков.

36. Какие классы симметрии получим, взяв за порождающие операции отражения в трех плоскостях; две из них пересекаются под углом α , а третья перпендикулярна к ним:

а) $\alpha = 45^\circ$, б) $\alpha = 30^\circ$, в) $\alpha = 60^\circ$,

г) $\alpha = 36^\circ$, д) $\alpha = 15^\circ$.

Отметить некристаллографические классы.

37. Указаны порождающие операции симметрии. Записать обозначения классов симметрии, по Бравэ и Герману—Могену. Нарисовать стереограммы этих классов:

а) отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 30° , и инверсия;

б) отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 60° , и инверсия;

в) отражения в двух плоскостях симметрии, пересекающихся под углом 36° , и инверсия;

г) отражения в двух плоскостях, пересекающихся под углом 20° , и инверсия.

38. Нарисовать стереограммы классов по следующим порождающим операциям, обозначить классы по Герману—Могену и Шенфлису:

а) отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси L_2 , перпендикулярной к одной из плоскостей и лежащей в плоскости другой;

б) поворот вокруг двух осей симметрии 2-го порядка, пересекающихся под углом 30° , и отражение в плоскости симметрии, совпадающей с плоскостью обеих осей;

в) поворот вокруг двух осей 2-го порядка, пересекающихся под углом 60° , и отражение в точке, расположенной на пересечении осей.

39. Обозначить международными символами и символами Шенфлиса следующие классы симметрии; указать, какие из них невозможны в кристаллических многогранниках; построить стереограммы:

а) L_33P , L_44L_2 , L_66L_27PC ;

б) $3L_2$, $3L_23PC$, L_2PC , L_44L_25PC ;

в) L_33L_2 , L_33P , L_33L_23PC , L_33L_24P ;

г) L_77P , L_88P ;

д) L_77L_28P , L_77L_27PC ;

е) $3L_44L_36P$, $3L_44L_36L_29PC$.

40. Какие классы симметрии получатся при взаимодействии следующих элементов симметрии? Для обозначения классов использовать символику Бравэ, Шенфлиса и Германа—Могена. Какие классы невозможны в кристаллах?

а) L_4 и P_\perp ; L_3 и P_\perp ; L_6 , P_\perp и P_{11}^{47} ;

б) L_4 , $L_{2\perp}$ и P_\perp ; L_3 , $L_{2\perp}$ и \bar{P}_\perp ;

в) P и Φ_1 (угол 60°); \bar{L}_2 и Φ_1 (угол 60°); L_6 , $L_{2\perp}$ и Φ_2 ;

г) L_{10} , $L_{2\perp}$ и Φ_2 ; L_8 , P_\perp и P_\parallel ;

д) L_2 , $L_{2\perp}$ и P_\perp .

41. Расшифровать (записать по Бравэ) обозначения следующих классов. Отметить некристаллографические классы:

а) $2/m$, 32 , 23 , $3m$, $m\bar{3}$, $\bar{3}m$;

б) D_{2h} , D_{3d} , D_{2d} , D_{4h} , C_{3h} , C_s , C_{4v} , T_d , T_h ;

в) $\frac{8}{m}mm$, $\bar{1}1m$, $\bar{2}2m2$, $\bar{1}62m$;

г) D_7 , C_{10h} , C_{9h} , D_{13d} , D_{4d} .

⁴⁷ P_\perp — плоскость симметрии, перпендикулярная к главной оси симметрии; P_\parallel — плоскость симметрии, проходящая вдоль оси симметрии; $L_{2\perp}$ — ось 2-го порядка, перпендикулярная к главной оси симметрии («побочная ось»).

42. Пользуясь общей теоремой Эйлера об осях, определить, под каким углом пересекаются две оси 3-го порядка, если их равнодействующей будет ось 2-го порядка.

43. Показать, используя осевую теорему Эйлера, что в кристаллах не может быть двух осей 6-го порядка.

44. Определить по теореме Эйлера результирующую поворотов вокруг осей 3-го и 4-го порядков. Каков угол между исходными осями?

45. Дано: $2 \cdot 3 = 4$. Определить угол, образованный этими осями.

46. Какие из записанных равенств справедливы?

$$\begin{array}{lll} 2 \cdot 3 = 5; & 4 \cdot 4 = 6; & 2 \cdot 3 = 6. \\ 3 \cdot 4 = 5; & 3 \cdot 6 = 6; & \end{array}$$

47. Доказать с помощью теоремы Эйлера, что

а) $m_1 \cdot m_2 = 6$, если $m_1 \wedge m_2 = 30^\circ$;

б) $m_1 \cdot m_2 = 4$, если $m_1 \wedge m_2 = 45^\circ$;

в) $m_1 \cdot m_2 = 3$, если $m_1 \wedge m_2 = 60^\circ$;

г) $m_1 \cdot m_2 = 2$, если $m_1 \wedge m_2 = 90^\circ$.

48. Пользуясь правилами взаимодействия элементов симметрии, дополнить проекции следующих классов и записать их обозначения всеми способами (рис. 71, 1—48).

49. Перечислить классы симметрии (точечные группы) низшей категории, являющиеся подклассами (подгруппами) следующих классов: mmm , $4/m$, $\bar{3}m$, $\frac{4}{m}mm$, 622 .

50. Выписать подклассы гексагональной сингонии для классов $\bar{3}m$ и $\frac{6}{m}mm$.

51. Выписать подклассы тетрагональной сингонии для классов 432 , $\bar{4}3m$ и $\frac{4}{m}mm$.

52. Перечислить подклассы для классов 222 , 422 , 32 , 622 , 432 .

53. Перечислить надклассы для классов: $3m$, mmm , $mm2$, 422 , $m\bar{3}$, $\bar{3}m$.

54. Какие две точечные группы не входят ни в одну из других в качестве подгрупп?

55. Какая группа входит как подгруппа в максимальное число групп?

56. Какие координаты приобретет точка xyz при повороте вокруг оси L_2 , проходящей через начало координат и совпадающей с осью Z ? С осью X ? С осью Y ?

57. Какие координаты приобретет точка xyz при повороте вокруг оси L_4 , совпадающей с координатной осью Z ? С осью X ? С осью Y ?

58. Какие операции связывают две точки со следующими координатами:

а) xyz и \bar{xyz} ,

- б) xuz и $\overline{\overline{xuz}}$,
 в) xuz и $\overline{\overline{xuz}}$,
 г) xuz и \overline{yxz} .

59. Какие координаты получит точка xuz после двух симметрических операций: поворота вокруг оси 2-го порядка, совпадающей с координатной осью X , и отражения в плоскости симметрии, перпендикулярной к оси X ?

60. Какие координаты получит точка xuz после трех симметрических операций: поворота вокруг вертикальной оси L_3 , поворота вокруг оси L_2 , совпадающей с осью X , и отражения в плоскости симметрии, перпендикулярной к L_3 ?

61. Какие координаты получит точка xuz после отражения в плоскости симметрии, совпадающей с плоскостью координатных осей XZ , и поворота вокруг горизонтальной оси L_2 , пересекающей плоскость симметрии под углом 45° ?

62. Какие координаты получит точка xuz в результате двух поворотов вокруг оси 4_z (4_z^2) и инверсии?

63. Какие координаты получит точка xuz после отражения в плоскости симметрии, совпадающей с плоскостью координатных осей YZ , и поворота (по часовой стрелке) вокруг оси L_4 , совпадающей с осью Y ?

64. Записать координаты всех точек, полученных размножением точки xuz операциями классов 222 , $4/m$, $\overline{4}2m$.

65. Найти произведения следующих операций:

$$\begin{array}{ll} 2_z \times 2_x = & 4_z \times 2_x = \\ 2_x \times 2_z = & 2_x \times 4_z = \end{array}$$

66. Построить квадраты Кейли для классов $mm2$, 222 и $2/m$.

67. Построить квадраты Кейли для классов 32 и $3m$.

68. Построить квадраты Кейли для классов $4/m$ и $6/m$, $\overline{4}2m$ и $\overline{6}m2$.

69. Перечислить операции симметрии, определяющие группы симметрии $4/m$, $6m2$, mmm .

70. Какие симметрические операции определяют следующие группы симметрии: $2/m$, $\overline{4}2m$, 422 , $m3$?

71. В классах $4/m$ и $2/m$ размножить грани общего положения. Какова собственная симметрия полученных простых форм?

72. В классах C_3 и C_6 размножить грани общего положения. Какова собственная симметрия полученных форм?

73. В классах $\overline{3}$ и $\overline{4}$ размножить грани общего положения. Какова собственная симметрия полученных форм?

74. В классах C_4 и C_{4v} размножить грани общего положения. Какова собственная симметрия полученных форм?

75. В классе $6/m$ размножить следующие грани:

а) грань, параллельную L_6 ,

б) грань, перпендикулярную к L_6 .

Определить собственную симметрию полученного многогранника.

76. В классах 23 и 32 размножить следующие грани:

а) грань, перпендикулярную к оси 2,

б) грань, перпендикулярную к оси 3.

Какова собственная симметрия полученных многогранников?

77. Размножить следующие грани:

а) в классе $\bar{4}2m$ — грань, перпендикулярную к оси $\bar{4}$, и грань, перпендикулярную к оси 2;

б) в классе $\bar{4}3m$ — грань, перпендикулярную к оси $\bar{4}$, и грань, перпендикулярную к оси 3.

Какова собственная симметрия полученных многогранников?

78. Размножить следующие грани:

а) в классе 422 — грань, перпендикулярную к оси 4, и грань, перпендикулярную к оси 2;

б) в классе 432 — грань, перпендикулярную к оси 4, и грань, перпендикулярную к оси 2.

Определить собственную симметрию полученных многогранников.

79. Размножить следующие грани:

а) в классе $3m$ — грань, перпендикулярную к оси 3, и грань, параллельную оси 3;

б) в классе $m\bar{3}$ — грань, перпендикулярную к оси 3.

Какова собственная симметрия полученных многогранников?

80. Размножить следующие грани:

а) в классе 222 — грани, перпендикулярные к каждой из осей 2;

б) в классе 422 — грань, перпендикулярную к оси 4, и грань, перпендикулярную к оси 2.

Какова собственная симметрия полученных многогранников?

81. В классе $\bar{6}$ размножить грань общего положения и определить собственную симметрию полученного многогранника.

82. В классе $m\bar{3}$ размножить следующие грани:

а) грань, перпендикулярную к координатной оси;

б) грань, перпендикулярную к оси 3.

Определить собственную симметрию полученного многогранника.

83. В классах D_3 и D_4 размножить следующие грани:

а) грань, перпендикулярную к главной оси,

б) грань, перпендикулярную к побочной оси симметрии.

Определить собственную симметрию полученных многогранников.

84. Какой класс будет получен, если к операциям класса 222 добавить инверсию?

85. Решить следующие уравнения:

а) $422 \cdot \bar{1} =$ д) $32 \cdot \bar{1} =$

б) $432 \cdot \bar{1} =$ е) $\bar{4}3m \cdot \bar{1} =$

в) $6/m \cdot 2 \perp =$ ж) $\bar{4}2m \cdot \bar{1} =$

г) $4/m \cdot m_x =$

86. Дать стандартные обозначения следующих классов симметрии:

- а) $22m$, б) $2m$, в) 22 , г) mm ,
д) $\frac{2}{m}mm$, е) $\frac{2}{m}22$.

87. Обозначить стандартными символами Германа—Могена следующие классы средней категории:

- а) $\bar{4}22$, б) $\bar{4}mm$, в) $\bar{3}2$, г) $\frac{3}{m}m$, д) $\frac{4}{m}22$, е) $\frac{4}{m}2m$,
ж) $\bar{6}22$, з) $\bar{6}mm$, и) $\bar{6}/m$, к) $\bar{4}/m$.

88. Обозначить стандартными международными символами следующие классы кубической сингонии:

- а) $\frac{4}{m}\bar{3}$, б) $2\bar{3}$, в) $43m$, г) $\bar{4}32$, д) $4\bar{3}2$, е) $\bar{4}\bar{3}m$.

89. Выписать все centrosимметричные точечные группы симметрии.

90. Выписать группы симметрии, операции которых суть простые повороты.

§ 2. Символы граней

91. Как выбирают единичную грань в кристаллах разных сингоний? Показать на проекции.

92. Какой символ может иметь единичная грань в гексагональной сингонии? Показать на проекции.

93. Перечислить сингонии с прямоугольной системой координат. Чем отличаются друг от друга координатные системы этих сингоний?

94. Объяснить, почему в кубической сингонии для определения символа любой грани единичная грань не нужна?

95. В кристалле средней категории нет грани, пересекающей все 3 координатные оси. Какая из граней может в этом случае играть роль масштабной?

96. Объяснить, почему для определения положения грани (210) в тетрагональной сингонии не нужно знать параметры единичной грани, а в ромбической — нужно?

97. Почему в тетрагональной сингонии грань (101) может заменить единичную, а в ромбической — нет?

98. Почему в моноклинной сингонии грань (110) может принадлежать общей форме, а (101) — не может (классическая установка)?

99. Почему грань (011) в тетрагональной сингонии может заменить единичную, а (110) — не может?

100. Почему в моноклинной сингонии (установка классическая) грань (110) может принадлежать общей простой форме, а в ромбической — не может?

101. В какой сингонии единичная грань может быть выбрана строго однозначно?

102. Как выбрать координатные оси в кристаллическом многограннике класса 4? То же для класса 2. Объяснить, чем определяется различие.

103. В кристалле класса $\frac{4}{m}$ выбраны координатные оси и единичная грань. Обязательно ли эта установка будет соответствовать «истинной» (структурной)? Какие возможны в этом случае расхождения? То же для кристалла класса $4/m$.

104. Единичная грань кристалла отсекает на координатных осях X , Y и Z отрезки, равные соответственно 1, 2 и 3 см. Определить символ грани, отсекающей на тех же осях отрезки 2, 2 и 3 см. К какой сингонии может относиться этот кристалл? Можно ли вторую грань принять за единичную?

105. Параметры единичной грани по осям X , Y и Z равны соответственно 1, 3 и 4 см. Определить символ грани, параметры которой 3, 6 и 6 см. Какую сингонию можно предположить?

106. Грани ромбического кристалла отсекают на координатных осях следующие отрезки:

грань I: 1, 2 и 3 см;

грань II: 2, 1 и 3 см.

Определить символы граней, если

1) единичной гранью служит грань I,

2) единичной гранью служит грань II.

107. Параметры граней моноклинного кристалла следующие:

грань I: 2, 3 и 4 см;

грань II: 1, 3 и 2 см.

Определить символы граней, приняв за единичную сначала первую грань, а затем вторую.

108. В тетрагональном кристалле единичная грань отсекает на оси X 1 см, на оси Z — 3 см. Определить символ грани, отсекающей на осях X , Y и Z отрезки, равные соответственно 4, 2 и 6 см.

109. В кристалле гексагональной сингонии единичная грань отсекает на оси X 2 см, на оси Z — 5 см. Определить символ грани, отсекающей на осях X , Y и Z соответственно отрезки 2; 1; 2,5 см.

110. В кристалле средней категории единичная грань отсекает на оси X отрезок 2 см, на оси Z — 3 см. Предположив этот кристалл а) тетрагональным, б) гексагональным, определить символ грани, отсекающей на осях X , Y , Z соответственно отрезки 3, 2 и 3 см.

111. В кристалле класса $m\bar{3}$ параметры некоторой грани — 2, 3 и 4 см. Каков символ этой грани? Определить символы остальных граней этой простой формы.

112. В кристалле класса 432 одна из граней отсекает на координатных осях 1, 2 и 3 см. Определить символы всех граней этой простой формы, имеющих положительные индексы по осям X и Z .

113. В кристалле класса $m\bar{3}m$ одну из граней определяют параметры, равные 2, 2 и 1 см. Определить символы граней этой простой формы, проектирующихся в первом квадранте.

114. В кристалле класса 23 одна из граней отсекает на координатных осях 5, 5 и 6 см. Определить символы всех граней этой простой формы, имеющих положительные индексы по оси Z.

115. В кристалле тетрагональной сингонии грань A отсекает на осях, X, Y и Z отрезки, равные соответственно 2, 1 и 0,5 см; грань B отсекает на тех же осях 4, 6 и 2 см. Проиндицировать грани кристалла.

116. В кристалле гексагональной сингонии параметры одной грани по осям X, Y и Z равны 4, 2 и 5 см, другой — 3, 2 и 10 см. Определить символы граней кристалла.

117. В кристалле тетрагональной сингонии грань A отсекает на осях X, Y и Z отрезки, равные 2, 1 и 3 см; грань B отсекает на тех же осях 4, 3 и 2 см. Проиндицировать грани, считая масштабной 1) грань A, 2) грань B.

118. Параметры грани A гексагонального кристалла — 1, 2 и 3 см, грани B — 2, 3 и 1,5 см. Проиндицировать эти грани, считая масштабной а) грань A, б) грань B.

119. Параметры двух граней гексагонального кристалла по осям X, Y и Z равны соответственно 2, 4, 3 и 3, —1,5, 6 см. Проиндицировать грани.

120. Одна грань кристалла отсекает на координатных осях X, Y и Z 1, 2 и 3 см, другая грань того же кристалла — 2, 3 и 3 см. Проиндицировать эти грани, считая кристалл а) ромбическим, б) тетрагональным, в) кубическим.

121. Параметры одной грани равны 2, 3 и 4 см, другой грани того же кристалла — 1, 3 и 2 см. Проиндицировать эти грани, считая кристалл а) моноклинным, б) гексагональным, в) кубическим.

122. Одна грань ромбического кристалла параллельна оси X и отсекает на осях Y и Z отрезки 1 и 2 см; другая грань того же кристалла, параллельная оси Y, отсекает на осях X и Z 2 и 3 см; третья грань, параллельная оси Z, отсекает на осях X и Y 4 и 6 см. Проиндицировать эти грани всеми возможными способами.

123. Одна грань моноклинного кристалла параллельна оси X и отсекает на осях Y и Z отрезки 1 и 3 см; другая грань, параллельная оси Z, отсекает на осях X и Y соответственно 2 и 4 см; третья, грань, параллельная оси Y, отсекает на осях X и Z 3 и 2 см. Проиндицировать эти грани (три варианта).

124. Грани кристалла имеют следующие параметры:

	X, см	Y, см	Z, см
I	∞	2	3
II	2	∞	2
III	1	3	∞

Проиндицировать эти грани, считая кристалл а) ромбическим, б) тетрагональным, в) кубическим.

125. Грани кристалла имеют следующие параметры:

	$X, \text{ см}$	$Y, \text{ см}$	$Z, \text{ см}$
I	1	4	∞
II	3	∞	2
III	∞	2	1

Проиндицировать эти грани, считая кристалл а) моноклинным, б) гексагональным, в) кубическим.

126. В тетрагональном кристалле грань, параллельная одной из горизонтальных осей, отсекает на другой отрезок 2 см; другая грань отсекает на осях X и Y соответственно 2 и 3 см. Проиндицировать эти грани двумя способами при условии, что параметры обеих граней по оси Z равны. Объяснить, как можно проиндицировать этот же кристалл, если считать его ромбическим.

127. Параметры двух граней равны соответственно 2, 4 и 3 см и 3, 1 и 2 см. Определить символ первой грани, если символ второй — (123).

128. Параметры грани A — 2, 2 и 1 см, грани B — 3, 4 и 2 см. Каков символ грани B , если A — (321)?

129. В ромбическом кристалле грань (110) отсекает на осях X и Y соответственно отрезки 2 и 3 см. Какие отрезки на оси Y отсекают грани (120) и (210), если параметр по оси X в обоих случаях принять равным 1 см?

130. В моноклинном кристалле грань (101) отсекает на координатных осях X и Z отрезки 1 и 2 см. Какие отрезки на оси Z отсекают грани (203) и (302), если параметр по оси X в обоих случаях принять равным 2 см.

131. В триклинном кристалле грань (011) отсекает на координатных осях отрезки 2 и 9 см. Какие отрезки на оси Y отсекают грани (031) и (013), если параметр по оси Z в обоих случаях принять равным 3 см.

132. Параметры единичной грани 2, 3 и 4 см. Каковы параметры грани (223) по осям X и Y , если она отсекает на оси Z 2 см?

133. Параметры единичной грани 1, 2 и 3 см. Каковы параметры грани (233), если она отсекает на оси X 1 см?

134. Параметры единичной грани 3, 4 и 5 см. Каковы параметры грани (123), если она отсекает на оси Z 6 см?

135. Единичная грань тетрагонального кристалла отсекает на оси X 2 см, на оси Z — 3 см. Если грань с символом (123) отсекает на оси X отрезок 4 см, каковы отрезки, отсекаемые ею на осях Y и Z ?

136. Единичная грань гексагонального кристалла отсекает на оси X 1 см, на оси Z — 2 см. Каковы параметры грани (32 $\bar{5}$ 1) по осям X и Z , если она отсекает на оси Y 3 см? Рассмотреть два случая.

137. В классе mmm проиндицировать все грани формы {111}. Дать характеристику этой формы.

138. В классе 422 проиндцировать все грани простой формы {231}. Дать характеристику полученной простой формы.

139. В классе 32 получить простые формы $\{10\bar{1}1\}$ и $\{11\bar{2}1\}$ и дать их сравнительную характеристику.

140. В классе 422 построить стереограммы форм {111} и {121} и дать их сравнительную характеристику.

141. Дать сравнительную характеристику форм {111} и {110} в классе $mm2$. То же для класса $2/m$ (установка классическая).

142. Дать характеристику форм {111} и {100} в классах $43m$ и $m\bar{3}$.

143. В классе $\bar{4}3m$ изобразить на проекции грань с символом (112). Проиндцировать остальные грани этой простой формы. Дать ее характеристику. То же для грани (101).

144. В классе 23 изобразить на проекции грань с символом (102), проиндцировать остальные грани этой простой формы. Дать ее характеристику. То же для грани (101).

145. Нарисовать формы {111} в классах $mm2$ и $4mm$. Как можно назвать эти формы? В чем их основное различие?

146. Дать сравнительную характеристику форм {111} в классах mmm , $\frac{4}{m}mm$ и $m\bar{3}m$. То же для классов 222, $\bar{4}2m$ и $\bar{4}3m$.

147. В классе $3m$ дать характеристику формы, одна из граней которой имеет следующие координаты: $\varphi=90^\circ$, $\rho=60^\circ$. Записать символы всех граней этой простой формы.

148. В классе 622 охарактеризовать форму, заданную гранью A ($\varphi=0^\circ$, $\rho=47^\circ$). Проиндцировать все грани этой простой формы (проекцией пользоваться лишь для проверки). То же для формы B ($\varphi=15^\circ$, $\rho=90^\circ$).

149. Проиндцировать двенадцатигранную форму класса $6mm$ ($\rho \neq 90^\circ$), используя проекцию лишь для проверки.

150. Не обращаясь к проекции, записать символы всех граней общей простой формы класса $\bar{6}m2$.

151. В классе $\bar{4}2m$ дать характеристику форм, грани которых занимают следующие позиции:

$$A - \varphi = 90^\circ, \quad \rho = 31^\circ;$$

$$B - \varphi = 45^\circ, \quad \rho = 40^\circ;$$

$$C - \varphi = \dots, \quad \rho = 0^\circ.$$

152. Дать характеристику форм, которым в классе $m\bar{3}$ отвечают грани A ($\varphi=45^\circ$, $\rho=90^\circ$) и B ($\varphi=90^\circ$, $\rho \approx 40^\circ$). Проиндцировать их.

153. Символы двух форм {111} и {113}. Каким станет символ первой формы, если за единичную принять грань второй формы.

154. Символы простых форм кристалла следующие: {111}, {112}, {231}. Проиндцировать тот же кристалл, приняв за единичную грань последней формы.

155. Ромбический кристалл проиндицирован следующим образом: 1) $\{111\}$, 2) $\{112\}$, 3) $\{102\}$, 4) $\{120\}$, 5) $\{100\}$ и 6) $\{010\}$. Проиндицировать тот же кристалл, приняв за исходные грани 3) и 4).

156. В кристалле низшей категории имеются следующие формы: 1) $\{111\}$, 2) $\{101\}$, 3) $\{122\}$, 4) $\{102\}$, 5) $\{034\}$ и 6) $\{010\}$. Проиндицировать тот же кристалл, исходя из граней форм 4) и 5).

157. В кристалле выбрана новая единичная грань, при этом грань (123) получает символ (212). Определить новый символ грани (331). Какой символ получит старая единичная грань и какой старый символ новой единичной грани?

158. Для кристаллов некоторого соединения приняты две установки; геометрические константы в первом случае — $a_0=1,4403$; $c_0=0,9729$; $\beta=113^\circ55'$; во втором — $a_0=0,7203$; $c_0=0,4858$; $\beta=113^\circ55'$. Какой символ получит во второй установке грань, принятая в первой за единичную?

159. В ромбическом кристалле $a_0=1,3790$, $c_0=0,4273$. Как изменятся геометрические константы, если единичная грань получит символ (221).

§ 3⁴⁸. Простые формы кристаллов

160. В классе $mm2$ получить простую форму, грани которой могут быть заданы следующими сферическими координатами: $\varphi \approx 35^\circ$, $\rho = 90^\circ$. Как называется эта простая форма? Какова собственная симметрия этой формы?

161. В классе $4/m$ получить простую форму, размножая грань со следующими сферическими координатами: $\varphi \approx 40^\circ$, $\rho \approx 50^\circ$. Как называется эта простая форма? Какова ее собственная симметрия?

162. Назвать общую форму класса 4. Как определить, в каком классе та же форма окажется частной?

163. Грань простой формы занимает в классе 2 общее положение. Как называется эта форма? В каком классе она частная?

164. Назвать общие формы в классах $\bar{4}$ и $\bar{3}$. Дать сравнительную характеристику этих форм. В каких классах каждая из этих форм будет частной?

165. Вывести общие формы в классах типа D_n и дать их характеристику.

166. Дать сравнительную характеристику следующих простых форм: тригональной бипирамиды, тригонального трапецоэдра и ромбоэдра. В каких классах эти формы общие? Какие из них и в каких классах могут быть частными?

⁴⁸ Задачи этого параграфа составлены с учетом того, что раздел «Символы граней и ребер» в учебной программе иногда следует за «Простыми формами».

167. Назвать и дать описание открытых простых форм тетрагональной сингонии.

168. Вывести закрытые простые формы ромбической сингонии и дать их описание.

169. Вывести закрытые простые формы в классах $\bar{3}$ и 32 и дать их описание.

170. Какие простые формы получатся размножением граней общего положения во всех классах ромбической сингонии?

171. Дать сравнительную характеристику общих простых форм для классов C_n , C_{nh} и D_{nh} .

172. Какое минимальное число простых форм может иметь многогранник, относящийся к классу $3\bar{2}$? $\bar{3}$? $1\bar{2}$?

173. В каких классах могут быть только открытые формы?

174. В каких классах могут быть только закрытые формы?

175. Почему формы типа ромбоэдра (симметризованного трапецеэдра) невозможны в кристаллах с главной осью 4-го или 6-го порядков?

176. Описать общую простую форму класса $\bar{5}$. Определить ее собственную симметрию.

177. Почему ромбический тетраэдр не может быть частной формой, а тетрагональный — может?

178. Какие формы называются энантиморфными? Привести примеры энантиморфных простых форм низшей, средней и высшей категорий.

179. Дать сравнительную характеристику всех закрытых восьмигранных форм кристаллов.

180. Дать сравнительную характеристику всех закрытых шестигранных простых форм кристаллов.

181. Дать сравнительную характеристику всех двенадцатигранников кубической сингонии.

182. Дать сравнительную характеристику всех двадцатичетырехгранников кубической сингонии.

183. Пользуясь предложенной на стр. 53 схемой, вывести простые формы в классах с «главной осью» L_1 . Какие названия этих форм отражают их происхождение? Дать общепринятые названия выведенных форм.

184. Чем отличается сфеноид от домы? Почему обе эти формы можно считать разновидностью одной простой формы?

185. Вывести пинакоид тремя разными способами. Какие названия отражают «происхождение» каждой из этих разновидностей?

186. Вывести ромбическую призму двумя различными способами. Какие названия отражают «происхождение» каждой из этих разновидностей?

187. Какое другое название ромбической пирамиды отражает способ вывода этой простой формы?

188. В каком классе ромбической сингонии в огранке кристалла могут одновременно участвовать три пинакоида?

189. Какое другое название можно присвоить ромбическому тетраэдру? Объяснить.

190. Какую простую форму можно считать промежуточной между кубом и ромбододекаэдром в каждом из классов кубической сингонии? Как отразить в названиях близость облика этой формы к ромбододекаэдру или к кубу?

191. Какую форму можно считать промежуточной между октаэдром и ромбододекаэдром? Какие названия отражают близость облика этой формы к ромбододекаэдру или к октаэдру?

192. Какую форму можно считать промежуточной между ромбододекаэдром и тетраэдром? Какие названия отражают близость облика этой формы к ромбододекаэдру или к тетраэдру?

193. Вывести тригон-тритетраэдр двумя способами (на основе тетраэдра и куба). Какие названия этой формы отражают тот или иной способ вывода?

194. Какая простая форма получится, если образовавшаяся на грани куба из класса 432 четырехскатная «крыша» занимает общее положение? Каким другим способом можно получить эту форму? Дать все известные названия этой формы и придумать новое для разновидности, близкой по облику к кубу.

195. Какая простая форма получится, если на гранях куба из класса 432 образуется четырехскатная «крыша», грани которой составляют косые углы со всеми осями, но равнонаклонны к двум осям 3-го порядка?

196. Какая простая форма получится, если на гранях куба из класса 23 образуется двускатная «крыша» общего положения? Каким другим способом можно получить эту форму? Придумать название, отражающее близость облика этой формы к кубу.

197. Какая форма получится, если на гранях куба из класса 23 образуется двускатная «крыша», грани которой составляют косые углы со всеми осями, но равнонаклонны к двум осям 3-го порядка?

198. Какая простая форма получится, если на гранях куба из класса $m\bar{3}$ образуется двускатная «крыша»? А четырехскатная?

199. Какими разными способами можно получить дидодекаэдр? Придумать названия, отражающие его происхождение?

200. Какая простая форма получится, если на гранях куба из класса $\bar{4}3m$ образуется крыша-пирамидка общего положения?

201. Дать сравнительную характеристику тетраэдров из низшей, средней и высшей категорий.

202. Сопоставить следующие простые формы:

а) пентагон-додокаэдр и ромбододекаэдр;

б) пентагон-додокаэдр и дидодекаэдр.

203. В огранке кристаллов каких классов могут участвовать тригональные пирамиды? Показать штриховкой разницу между пирамидами из разных классов.

204. Показать штриховкой разницу между ромбическими призмами из разных (каких?) классов.

205. Пометить штриховкой призмы из классов $4/m$, $\bar{4}$ и $\bar{4}2m$.

206. В каких классах могут возникнуть ромбоэдры? Показать штриховкой разницу между ромбоэдрами из разных классов.

207. Пометить штриховкой тригональные призмы из классов 3 , $\bar{6}$, $3m$.

208. Пометить штриховкой кубы из всех классов кубической сингонии.

209. Показать штриховкой разницу между октаэдрами из трех классов кубической сингонии.

210. Показать штриховкой разницу между двумя тетраэдрами из разных классов кубической сингонии.

211. Показать штриховкой разницу между двумя тетраэдрами из разных классов тетрагональной сингонии.

212. Пометить штриховкой 24-гранные дельтоэдры из классов $m\bar{3}m$ и $m\bar{3}$.

213. Пометить штриховкой 12-гранные дельтоэдры из разных классов.

214. Показать штриховкой разницу между ромбододекаэдрами из всех классов кубической сингонии.

215. В каких классах в огранке кристалла может участвовать лишь один пинакоид? Два пинакоида? Три пинакоида? Неограниченное число пинакоидов?

216. Какие простые формы кубической сингонии могут встречаться на кристалле в единственном числе?

217. Какова симметрия кристалла, представляющего собой комбинацию: а) двух ромбоэдров, б) ромбоэдра и тригонального скаленоэдра?

218. К какому классу относится кристалл, представляющий собой комбинацию: а) ромбической призмы и ромбического тетраэдра, б) ромбической призмы, ромбической пирамиды и диэдра?

219. Какой может быть симметрия кристалла, представляющего собой комбинацию тригональной призмы, тригональной пирамиды и двух моноэдров?

220. К какому классу может быть отнесен кристалл, представляющий собой комбинацию: а) тетрагональной призмы и тетрагонального тетраэдра, б) тетрагональной призмы, тетрагональной пирамиды и моноэдра?

221. К какому классу симметрии можно отнести кристалл, представляющий собой комбинацию: а) куба и ромбододекаэдра, б) ромбододекаэдра и пентагон-додэкаэдра, в) пентагон-додэкаэдра и тетраэдра?

222. Какой может быть симметрия кристалла, представляющего собой комбинацию: а) куба и октаэдра, б) октаэдра и пентагон-додэкаэдра, в) ромбододекаэдра и тетраэдра?

223. Определить симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию тетрагонального тетраэдра и пинакоида.

224. Определить симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию: а) сфеноида, пинакоида и моноэдра; б) домы, пинакоида и моноэдра.

225. Определить симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию двух диэдров и ромбической призмы.

226. К какому классу может быть отнесен кристалл, представляющий собой комбинацию шести пинакоидов? Пяти моноэдров?

227. Определить симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию: а) тетрагональной бипирамиды и трапецоэдра, б) тригональной бипирамиды и дитригональной призмы.

228. К какому классу симметрии можно отнести кристалл, представляющий собой комбинацию: а) куба и 24-гранного дельтоэдра, б) пентагон-додекаэдра и 24-гранного дельтоэдра?

229. К какому классу симметрии можно отнести кристалл, представляющий собой комбинацию: а) 12-гранного дельтоэдра и двух тетраэдров, б) 12-гранного дельтоэдра и пентагон-додекаэдра?

230. Определить симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию: а) пирамидального октаэдра и пентагон-додекаэдра; б) пирамидального октаэдра и пирамидального куба.

231. Кристалл огранен тремя пинакоидами. Каким классам он может принадлежать?

232. В каком классе тетрагональной сингонии кристалл может быть 4-гранным? То же в гексагональной?

233. Шестигранный кристалл относится к классу 222. Каким простым формам принадлежат его грани?

234. Все грани ромбического кристалла принадлежат одной простой форме. В каких классах это возможно? Какие это формы?

235. К какому классу может относиться 6-гранный тетрагональный кристалл?

236. Двенадцатигранный ромбический кристалл состоит из двух простых форм. К какому классу симметрии относится этот кристалл?

237. Почему 12-гранный кубический кристалл не может быть комбинацией нескольких простых форм?

238. Чему равно минимальное число граней кубического кристалла, представляющего собой комбинацию трех форм? Двух форм? К каким классам могут относиться такие кристаллы?

239. К какому классу симметрии может быть отнесен 4-гранный кубический кристалл? 8-гранный? 10-гранный?

240. Каким простым формам принадлежат грани 4-гранного кристалла из класса 2? Доказать, что полученное сочетание является единственным.

241. Каким простым формам принадлежат грани 4-гранного кристалла из класса m ? Доказать, что полученное сочетание является единственным.

242. Объяснить, почему есть кристаллографические классы C_{2v} , C_{3v} , C_{4v} , C_{6v} и классы D_{2d} и D_{3d} , но нет классов D_{4d} и D_{6d} ?

§ 4. Символы простых форм

243. Разместить на проекции (класс mmm) грани следующих простых форм: $\{001\}$, $\{111\}$, $\{112\}$, $\{101\}$, $\{110\}$. Как называются эти формы?

244. Получить простые формы, размножив в классе $\bar{3}$ грани $(10\bar{1}1)$, $(10\bar{1}0)$ и (0001) . Назвать эти формы. Определить собственную симметрию двух первых форм.

245. В классе $\bar{4}2m$ размножить грани с символами (111) , (311) , (001) и (101) . Каким простым формам принадлежат эти грани? Записать название класса по общей простой форме и дать все его буквенные обозначения. Какова собственная симметрия формы $\{101\}$?

246. В классе 222 размножить грани с символами (111) , (112) , (100) и (001) . К каким простым формам относятся эти грани? Записать название класса и все его буквенные обозначения.

247. Дан класс 422 . Размножить грани с символами (100) , (001) , (111) , (212) . Каким простым формам отвечают эти грани? Записать название класса и все его буквенные обозначения.

248. В классе $\bar{3}m$ размножить грани с символами $(10\bar{1}1)$, $(10\bar{1}2)$, $(11\bar{2}2)$, $(12\bar{3}2)$. Каким простым формам принадлежат эти грани? Записать название класса и его обозначения.

249. Нанести на проекцию грани формы $\{112\}$ в классе 432 . Как называется эта форма? Какова ее собственная симметрия?

250. Нанести на проекцию грани формы $\{112\}$ в классе 23 . Как называется эта форма? Какова ее собственная симметрия?

251. В классе $4/m$ получить простую форму, одна из граней которой занимает положение A ($\varphi \approx 60^\circ$ и $\rho \approx 25^\circ$). Назвать эту простую форму и записать символы всех ее граней. Определить собственную симметрию этой формы.

252. Какой простой форме отвечает в классе $\bar{4}2m$ грань, для которой $\varphi = 45^\circ$, $\rho \approx 35^\circ$? Каков ее символ?

253. Размножить в классе D_{3d} грань с $\varphi \approx 90^\circ$, $\rho \approx 35^\circ$. Что это за простая форма? Каков ее символ и собственная симметрия?

254. Как в классе $\bar{6}m2$ назвать простую форму, для одной из граней которой $\varphi \approx 45^\circ$, $\rho \approx 35^\circ$? Записать символы всех граней этой формы, используя проекцию лишь для проверки.

255. Размножить заданные грани (рис. 72, a — $э$) и записать:

- 1) все обозначения класса симметрии;
- 2) символы всех граней 1-го квадранта (приблизительно);
- 3) названия простых форм и их символы.

256. В каких классах тетрагональной сингонии общая простая форма может иметь символ $\{111\}$?

257. В каком классе симметрии ромбоэдр может иметь символ $\{12\bar{3}1\}$? Объяснить.

258. В каком из классов тетрагональной сингонии тетраэдр может иметь символ $\{121\}$? Показать на проекции.

259. Назвать формы, имеющие в классе $\bar{4}2m$ символы $\{h0l\}$ и $\{hkl\}$.

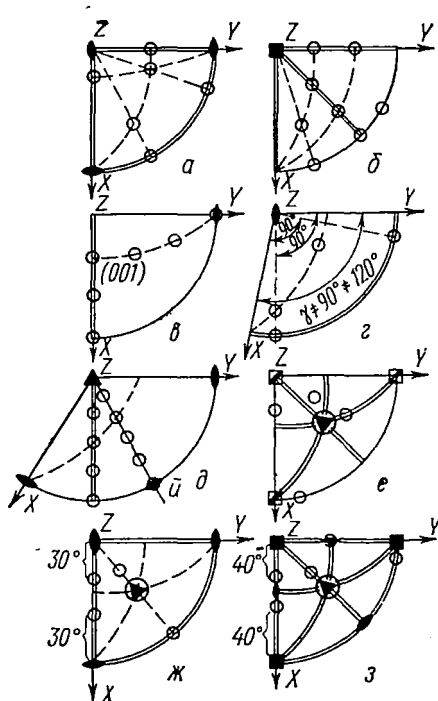


Рис. 72. К упражнению 255

260. Перечислить формы гексагональной сингонии, которые могут иметь символ $\{0001\}$? То же для $\{10\bar{1}0\}$.

261. Объяснить, воспользовавшись проекцией, какой символ могут иметь трапецоэдры.

262. Начертить стереограммы трапецоэдров $\{12\bar{3}1\}$ и $\{21\bar{3}1\}$. Чем они различаются?

263. Каким может быть символ тетрагонального скаленоэдра? Тригонального? Объяснить, воспользовавшись проекцией.

264. Показать, каким может быть символ грани пинакоида в классах низшей категории.

265. Какой символ может быть у моноэдра в гексагональной и тетрагональной сингониях? В моноклинной? Триклинной?

266. В каких классах тетрагональной сингонии четырехгранная форма может иметь символ $\{120\}$?

267. Символ тригональной призмы $\{12\bar{3}0\}$. В каких классах это возможно?

268. Какими могут быть символы граней ромбоэдров из классов $\bar{3}$, 32 , $3m$? Объяснить, пользуясь проекцией.

269. Символ ромбоэдра $\{23\bar{5}1\}$. Какую простую форму образует в этом случае грань, параллельная главной оси? Записать ее символ в общем виде.

270. Определить возможную симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию пинакоидов $\{100\}$, $\{010\}$ и $\{001\}$.

271. К какому классу может быть отнесен кристалл, представляющий собой комбинацию тетрагональной призмы $\{110\}$ и тетрагонального тетраэдра $\{111\}$? Двух тетрагональных тетраэдров $\{111\}$ и $\{112\}$? Двух тетрагональных тетраэдров $\{111\}$ и $\{211\}$?

272. К какому классу может быть отнесен кристалл, представляющий собой комбинацию тетрагональной пирамиды $\{111\}$, тетрагональной призмы $\{310\}$ и моноэдра $\{001\}$? То же для комбинации тетрагональной пирамиды $\{111\}$, тетрагональной призмы $\{100\}$ и моноэдра $\{00\bar{1}\}$.

273. Определить симметрию кристалла, представляющего собой комбинацию трехгранных форм $\{12\bar{3}0\}$, $\{11\bar{2}1\}$ и $\{11\bar{2}\bar{1}\}$. Назвать простые формы.

274. Определить симметрию тетрагонального кристалла, представляющего собой комбинацию четырехгранной формы $\{120\}$ и восьмигранной $\{111\}$. Назвать простые формы.

275. Кристалл представляет собой комбинацию ромбоэдра и призмы $\{11\bar{2}0\}$. Определить симметрию кристалла и назвать призму, если символ ромбоэдра а) $\{101\bar{1}\}$, б) $\{12\bar{3}1\}$.

276. Шестигранный кристалл представляет собой комбинацию форм $\{11\bar{2}1\}$ и $\{12\bar{3}\bar{1}\}$. Определить симметрию и формы.

277. В шестигранном ромбическом кристалле две формы — $\{111\}$ и $\{10\bar{1}\}$. Какова симметрия этого кристалла? Какие это формы?

278. Определить симметрию гексагонального кристалла, шестигранная форма которого имеет символ $\{11\bar{2}1\}$, а трехгранная — $\{11\bar{2}0\}$. Назвать формы.

279. Проиндцировать четырехгранный тетрагональный кристалл.

280. Предположив минимально возможное число граней, проиндцировать в общем виде многогранник класса $\bar{4}$. Предусмотреть различные варианты.

281. Проиндцировать в общем виде многогранник класса 3 , предположив минимально возможное число граней. То же для класса $\bar{3}$.

282. Проиндцировать ромбический кристалл — комбинацию трех пинакоидов. Какой класс симметрии?

283. Указать все возможные случаи индицирования шестигранного кристалла симметрии 222.

284. Проиндицировать шестнадцатигранную простую форму.

285. Проиндицировать пятигранный ромбический кристалл. Перечислить возможные варианты. Записать в общем виде символы двугранных форм этого класса.

286. Записать символы граней пятигранного тетрагонального кристалла.

287. Каким может быть минимальное число граней в ромбическом кристалле? Для всех возможных вариантов определить симметрию и записать символы простых форм.

288. Проиндицировать четырехгранный кристалл гексагональной сингонии.

289. Построить стереограмму комбинационного многогранника гексагональной сингонии, для определения символов граней которого не нужна единичная грань. Назвать простые формы. То же для моноклинной сингонии. В каждом случае предусмотреть несколько вариантов.

290. Начертить стереограммы простейших энантиоморфных кристаллических многогранников класса 222 и 422. В обоих случаях проиндицировать изображенные кристаллы, назвать простые формы. Перечислить классы симметрии, допускающие энантиоморфные многогранники.

291. Показать на проекции позиции постоянных форм класса $\bar{4}3m$. Назвать их и записать символы.

292. Показать на проекции соответствующего класса расположение граней гексатетраэдра и записать символы всех граней 1-го квадранта.

293. Описать возможные двенадцатигранные многогранники кубической сингонии. Проиндицировать их.

294. Какой симметрией обладает кристалл, огранный двенадцатью гранями $\{120\}$ и четырьмя $\{111\}$?

295. Как связать символы граней ромбододекаэдра и пентагондододекаэдра с их положением относительно координатных осей?

296. Перечислить формы кубической сингонии, символы которых $\{hkl\}$.

297. Проиндицировать двенадцатигранный кристалл симметрии 23.

298. Какие постоянные формы можно использовать для вывода гексатетраэдра? Показать, пользуясь символами, «происхождение» формы. Предложить для каждого случая название.

299. Как называется форма, промежуточная между кубом и ромбододекаэдром? Как при помощи символа отразить близость этой формы к кубу? К ромбододекаэдру? То же для формы, промежуточной между кубом и октаэдром.

300. Отразить символами разницу между тригон-трететраэдром, производным куба, и тригон-трететраэдром, производным тетра-

эдра. Какие названия можно присвоить каждой из этих двух разновидностей?

301. Производным каких постоянных форм можно считать сорокавосемьгранник? Показать при помощи символов разницу между этими сорокавосемьгранниками. Подчеркнуть это названиями.

302. Назвать форму, одна из граней которой в классе 23 занимает позицию {123}. Начертить полную стереограмму этой простой формы и записать символы граней первого квадранта.

303. Кубический кристалл представляет собой комбинацию четырехгранной формы {111} и формы {110}. Какова максимальная симметрия этого многогранника?

304. Многогранник кубической сингонии ограничен двумя формами — двенадцатигранной {120} и двадцатичетырехгранной {123}. Какой симметрией может обладать этот многогранник? Назвать формы.

305. Кристалл кубической сингонии представляет собой комбинацию форм {111} и {120}. Какова симметрия этого кристалла, если одна из форм четырехгранная. Назвать обе формы.

306. Символ двенадцатигранной формы кубического кристалла — {hhl}. Назвать формы {111} и {hk0}.

307. Символ одной из форм кубического кристалла — {hk0}. Назвать ее, если известно, что в форме {hhl} двенадцать граней ($h > k > l$).

308. В кристалле кубической сингонии форма {hk0} — двадцатичетырехгранная. Сколько граней в форме {hhl}? Как она называется? ($h > k > l$).

309. В форме {111} кубического кристалла 4 грани. Как называется в этом случае двадцатичетырехгранная форма?

310. Одна из граней двенадцатигранного кубического кристалла отсекает неравные отрезки по всем трем координатным осям. Чему равно в этом случае число простых форм? Записать символы всех граней в общем виде.

311. Проиндицировать кубический кристалл, имеющий 10 граней.

312. Проиндицировать возможные восьмигранники кубической сингонии.

313. Грань одной из двух тетрагональных пирамид принята за единичную, другая при этом имеет символ {232}. Какой будет символ первой пирамиды, если за единичную принять вторую? Какой класс симметрии?

314. В кристалле класса 222 грань одной из форм принята за единичную, при этом символ второй — {221}, третьей — {101}. Проиндицировать этот же кристалл, приняв за единичную грань второй формы. Назвать эти формы.

315. В кристалле симметрии $2/m$ есть следующие формы:

- 1) {111}, 2) {112}, 3) {120}, 4) {203},
5) {110}, 6) {101}, 7) {010} и 8) {001}.

Приняв за двуединичные грани форм 3) и 4), определить символы всех остальных. Назвать формы: а) установка классическая, б) установка новая.

§ 5. Символы ребер. Закон зон

316. Записать символы осей 3-го порядка в классах гексагональной и кубической сингоний.

317. Записать символы осей 2-го порядка в классах 222, 422, 32 и 432.

318. Привести трех- и четырехзначные символы координатных осей в гексагональном кристалле.

319. Записать символы (трех- и четырехзначные) всех ребер, связанных с ребром $[12\bar{3}1]$ поворотом вокруг оси 3. То же для оси 6.

320. В тетрагональном кристалле определить символ и координаты ребра пересечения граней A ($\varphi = \dots$, $\rho = 0^\circ$) и B ($\varphi = 45^\circ$, $\rho \approx 25^\circ$).

321. Определить символ и координаты ребра пересечения двух граней ромбического кристалла: A ($\varphi = 90^\circ$, $\rho \approx 30^\circ$) и B ($\varphi = 0^\circ$, $\rho \approx 40^\circ$).

322. Определить символы ребер формы $\{111\}$ в кристалле класса $m\bar{3}m$. То же для класса $43m$.

323. Проецировать тетрагональный кристалл, заданный следующими гранями:

	φ°	ρ°
A	$26\frac{1}{2}$	90
B	$63\frac{1}{2}$	90
B	...	0
Γ	90	90
D	45	60
E	45	120

Определить также символы и координаты ребер пересечения граней A и B , B и Γ , D и E .

324. Назвать класс симметрии и изображенные простые формы (рис. 73). Проецировать все грани этих форм. Найти символ ребра пересечения двух любых граней формы 2. Чем замечательно это ребро? То же для ребра пересечения граней формы 1.

325. В ромбическом кристалле каждая простая форма представлена одной гранью (A , B , B , Γ , D), причем грани заданы сферическими координатами двух ребер:

$$A \begin{cases} [\varphi = 90^\circ, \rho = 90^\circ] \\ [\varphi = 0^\circ, \rho = 90^\circ] \end{cases} \quad B \begin{cases} [\varphi = 90^\circ, \rho = 90^\circ] \\ [\varphi = \dots, \rho = 0^\circ] \end{cases}$$

333. Найти положение единичной грани ромбического кристалла, если $\rho_{(011)} = 62^\circ$, а $\varphi_{(110)} = 43^\circ$.

334. Найти $\varphi_{(111)}$ и $\rho_{(111)}$ в ромбическом кристалле, если $\rho_{(011)} = 70^\circ$, $\varphi_{(110)} = 25^\circ$.

335. Найти $\varphi_{(111)}$ и $\rho_{(111)}$, если $\rho_{(011)} = 28^\circ$, $\varphi_{(110)} = 49^\circ$, $\gamma = 130^\circ$. Ось Y расположить параллельно наблюдателю.

336. Найти положение единичной грани ромбического кристалла, если $\rho_{(101)} = 30^\circ$, $\rho_{(011)} = 60^\circ$.

337. Найти положение единичной грани ромбического кристалла, если $\rho_{(101)} = 40^\circ$, $\varphi_{(110)} = 50^\circ$.

338. В кристалле класса $m\bar{3}$ за ось проекций выбрана одна из осей 3-го порядка. Показать на стереограмме все грани форм $\{111\}$, $\{100\}$ и $\{110\}$.

339. Найти символ грани тетрагон-триоктаэдра, если ее полюс образует с полюсом грани куба угол 35° .

340. Угол между полюсами граней тетраэдра и тетрагон-три-тетраэдра равен 16° . Определить символ последнего.

341. Определить положение граней $(10\bar{1}1)$ и $(11\bar{2}1)$, если $\rho_{(10\bar{1}3)} = 41,5^\circ$.

342. В ромбическом кристалле $(110) \wedge (\bar{1}\bar{1}0) = 102^\circ$, $(113) \wedge (\bar{1}\bar{1}3) = 90^\circ$. Определить положение единичной грани.

343. В кристалле класса C_{2h} $\varphi_{(011)} = 33^\circ$, $\rho_{(011)} = 47^\circ$. Определить положение грани (110) и β , если $\varphi_{(111)} = 62^\circ$. Назвать формы $\{110\}$ и $\{111\}$.

344. В кристалле моноклинной сингонии угол $\beta = 127^\circ$. Определить положение единичной грани, если полярные расстояния граней (011) и (101) равны соответственно 42 и 49° .

345. В тетрагональном кристалле $(232) \wedge (\bar{2}\bar{3}2) = 82^\circ$. Определить положение единичной грани. Предположив класс $4/m$, назвать простые формы, к которым относятся эти грани. То же для класса $4mm$.

346. Определить положение единичной грани и угол β в моноклинном кристалле, если $(310) \wedge (3\bar{1}0) = 140^\circ$, $(310) \wedge (001) = 76^\circ$, $(001) \wedge (011) = 63^\circ$.

347. Определить положение единичной грани в триклинном кристалле, если

	φ°	ρ°
(011)	89	5
(110)	48	90
(101)	85	41

Принять, как обычно, $\varphi_{(010)} = 0^\circ$, $\rho_{(010)} = 90^\circ$.

348. В кристалле класса $\bar{4}2m$ простые формы заданы следующими гранями: А) $\varphi = 90^\circ$, $\rho = 31^\circ$; Б) $\varphi = 45^\circ$, $\rho = 40^\circ$. Проецировать многогранник и назвать формы. Определить символ и координаты ребра пересечения указанных граней.

349. В ромбическом кристалле $\varphi_{(111)}=51^\circ$, $\rho_{(111)}=44,5^\circ$. Определить символы ребер пересечения этой грани с гранями l ($\varphi=0^\circ$, $\rho=32^\circ$) и m ($\varphi=51^\circ$, $\rho=90^\circ$).

350. В огранке гексагонального кристалла класса $6/m$ участвуют формы m и r . Определить символы ребер пересечения грани m' ($\varphi=0^\circ$, $\rho=90^\circ$) и r' ($\varphi=30^\circ$, $\rho=39,5^\circ$). Назвать эти формы.

351. В огранке кристалла класса $\bar{3}$ участвуют формы m и n . Определить символ ребер пересечения грани n' ($\varphi=60^\circ$, $\rho=25^\circ$) с гранями m' ($\varphi=30^\circ$, $\rho=90^\circ$) и m'' ($\varphi=90^\circ$, $\rho=90^\circ$). Назвать формы m и n .

352. Грани $(h_1k_1l_1)$, $(h_2k_2l_2)$ и $(h_3k_3l_3)$ лежат в одной зоне. Доказать, что грани $(h_1h_2h_3)$, $(k_1k_2k_3)$ и $(l_1l_2l_3)$ тоже таутозональные. То же для $(k_1h_1l_1)$, $(k_2h_2l_2)$ и $(k_3h_3l_3)$.

353. Объединить грани ромбододекаэдра в зоны. Сколько этих зон? Чем они замечательны?

354. Зона проведена через грани (132) и (231) формы {123} класса $m\bar{3}m$. Какие грани той же простой формы попадут в эту зону? Как называется эта форма?

355. Записать символы всех ребер простой формы {123 $\bar{1}$ } из класса $\bar{3}$. То же для класса $\bar{6}$. Указать трех- и четырехзначные символы. Назвать простые формы.

356. Получить символы всех ребер простой формы {4 $\bar{1}\bar{5}$ 1} в классе $6mm$. Назвать форму.

357. Для кристалла класса $\bar{3}m$ использована установка Миллера (см. стр. 39, 97). Определить положение граней (2 $\bar{1}$ 2), (12 $\bar{1}$) и (100), если $\varphi_{(100)}=90^\circ$, $\rho_{(100)}=62^\circ$.

358. Определить сферические координаты граней (100), (2 $\bar{1}$ 3) и (011) в установке Миллера (см. стр. 39, 97), если для оси X $\varphi=90^\circ$, а $\rho=74^\circ$.

359. Определить сферические координаты граней (011), (2 $\bar{3}$ 1) и (22 $\bar{1}$) в установке Миллера (см. стр. 39, 97), если $\alpha=77^\circ$ (ось X направлена на наблюдателя).

360. В тригональном трапецоэдре {123 $\bar{1}$ } определить символы ребер, не связанных друг с другом операциями симметрии.

361. Определить символ «экваториального» ребра скаленоэдра {134 $\bar{1}$ }. Записать, не прибегая к графику, символы всех экваториальных ребер.

362. Найти в кубическом кристалле сферические координаты ребер [111], [121] и [122].

363. Найти сферические координаты ребра [212] тетрагонального кристалла, если $\rho_{(322)}=62^\circ$.

364. В кристалле гексагональной сингонии $\rho_{(01\bar{1})}=44^\circ$. Определить координаты ребра [01 $\bar{1}$ 1].

365. Определить сферические координаты ребра [112] моноклинного кристалла, если $\rho_{(101)}=46^\circ$, $\rho_{(001)}=16,5^\circ$ и $\varphi_{(110)}=56,5^\circ$.

366. В тетрагональном кристалле $\rho_{(1\bar{1}1)} = 40^\circ$. Определить символ и полярное расстояние (ρ) грани, параллельной ребру $[1\bar{1}\bar{1}]$, если ее азимут (φ) равен $63,5^\circ$.

367. В ромбическом кристалле $\rho_{(011)} = 62^\circ$, $\rho_{(101)} = 67^\circ$. Определить символ грани, параллельной ребру $[2\bar{1}\bar{1}]$, если азимут (φ) этой грани равен $22\frac{1^\circ}{4}$.

368. В ромбическом кристалле $\varphi_{(112)} = 51^\circ$, $\rho_{(112)} = 56,5^\circ$. Найти символ грани, лежащей в зоне $[0\bar{1}3]$, если полюса этой грани и грани (113) образуют угол 36° .

369. В кристалле моноклинной сингонии $\rho_{(011)} = 29,5^\circ$, $\varphi_{(011)} = 31,5^\circ$; $\varphi_{(110)} = 56,5^\circ$. Определить символ грани, параллельной ребру $[11\bar{3}]$, если φ этой грани 47° .

370. Определить символ грани, параллельной ребру $[\bar{1}\bar{1}23]$, если ее азимут равен 16° ; $\rho_{(10\bar{1}1)} = 69^\circ$.

371. В тетрагональном кристалле $(113) \wedge (\bar{1}\bar{1}3) = 76^\circ$. Определить угол между ребрами $[123]$ и $[201]$.

372. Определить угол между ребрами $[11\bar{2}6]$ и $[22\bar{4}3]$, если $\rho_{(01\bar{1}1)} = 40^\circ$.

373. Определить символы ребер одной из граней скаленоэдра $\{231\}$. Чему равны углы между этими ребрами, если $\rho_{(332)} = 42^\circ$.

374. В моноклинном кристалле определить угол между направлениями $[1\bar{1}\bar{1}]$ и $[123]$, если $\rho_{(101)} = 46^\circ$, $\rho_{(001)} = 16,5^\circ$, а $(120) \wedge (\bar{1}20) = 74,5^\circ$.

375. Определить угол между ребрами грани (102) пентагон-додекаэдра.

376. Определить в кристалле кубической сингонии положение следующих граней: А) (324) ; Б) (257) , В) (347) .

377. В тетрагональном кристалле $\rho_{(101)} = 69^\circ$. Определить сферические координаты граней (231) , (378) и (831) .

378. Определить положение граней (321) и (432) , если сингония ромбическая, а $\varphi_{(111)} = 60^\circ$, $\rho_{(111)} = 30^\circ$.

379. В кристалле класса $mm2$ $\varphi_{(110)} = 62^\circ$, $\rho_{(011)} = 42^\circ$. Определить сферические координаты граней (432) и (738) . Каким простым формам они принадлежат?

380. В кристалле симметрии C_{6h} $\rho_{(10\bar{1}1)} = 45^\circ$. Определить положение граней а) $(32\bar{5}1)$, б) $(21\bar{3}1)$, в) $(32\bar{5}2)$. Дать названия всех простых форм.

381. В ромбическом кристалле $(011) \wedge (0\bar{1}1) = 67^\circ$, $(110) \wedge (\bar{1}10) = 134^\circ$. Определить $(347) \wedge (738)$.

382. Определить сферические координаты грани $(12\bar{3}1)$ и $(32\bar{5}4)$, если $\rho_{(10\bar{1}1)} = 44^\circ$.

383. Определить положение граней $(13\bar{4}2)$ и $(34\bar{7}3)$, если $(11\bar{2}1) \wedge (11\bar{2}0) = 30^\circ$.

384. Найти положение граней (136) и (611) в кристалле, для которого $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 99^\circ$, $\varphi_{(111)} = 38^\circ$, $\rho_{(111)} = 60^\circ$.

385. Определить положение грани (213) в моноклинном кристалле, если $\varphi_{(111)} = 60^\circ$, $\rho_{(111)} = 25^\circ$, $\rho_{(001)} = 12^\circ$.

386. Определить сферические координаты граней (374) и (237) в кристалле, для которого $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$, $\varphi_{(111)} = 75^\circ$, $\rho_{111} = 40^\circ$, $\varphi_{(010)} = 25^\circ$.

387. Найти сферические координаты грани (321) триклинного кристалла, если

	φ°	ρ°
(011)	83	7
(110)	52	90
(101)	79	47

Грань (010) занимает, как обычно, позицию с $\varphi = 0^\circ$ и $\rho = 90^\circ$.

§ 6. Метод косинусов Вульфа. Графическое определение элементов (геометрических констант) кристалла

388. По координатным граням триклинного кристалла определить выходы координатных осей:

	φ°	ρ°
(001)	73	20
(010)	0	90
(100)	74	90

389. Определить по стереограмме выходы координатных осей. Измерить осевые углы, если

	φ°	ρ°
а)	(010)	0
	(100)	80
	(011)	23
	(101)	77
б)	(001)	4
	(0 $\bar{1}$ 1)	179
	(100)	82 $\frac{3}{4}$
	(110)	47 $\frac{3}{4}$
в)	(010)	0
	(011)	25 $\frac{3}{4}$
	(111)	71
	(110)	69 $\frac{3}{4}$

390. Моноклинный кристалл дан в классической установке. Показать на стереограмме выход оси X , если $\varphi_{(011)} = 21^\circ$, $\rho_{(011)} = 33,5^\circ$.

391. Определить позицию координатных граней, указав в каждом случае сингонию:

а)	(010)	0	90
	(111)	$46\frac{3}{4}$	$51\frac{1}{2}$
	(211)	$64\frac{3}{4}$	$63\frac{3}{4}$
	(120)	28	90
б)	(010)	0	90
	(111)	$40\frac{1}{2}$	70
	(211)	55	$74\frac{1}{2}$
	(120)	16	90

392. В ромбическом кристалле $\varphi_{(111)} = 59\frac{3^\circ}{4}$, $\rho_{(111)} = 62,5^\circ$. Определить символы граней h ($\varphi = 49^\circ$, $\rho = 90^\circ$) и l ($\varphi = 29\frac{3^\circ}{4}$, $\rho = 90^\circ$).

393. В ромбическом кристалле $\varphi_{(211)} = 64,75^\circ$, $\rho_{(211)} = 63,75^\circ$. Определить символы граней q ($\varphi = 90^\circ$, $\rho = 70^\circ$), p ($\varphi = 46\frac{3^\circ}{4}$, $\rho = 51,5^\circ$) и z ($\varphi = 58^\circ$, $\rho = 58\frac{1^\circ}{4}$).

394. Основные грани кристалла занимают следующее положение:

	φ°	ρ°
(001)	$19\frac{3}{4}$	22
(010)	0	90
(100)	$110\frac{1}{4}$	90
(111)	$53\frac{1}{2}$	$54\frac{1}{4}$

Определить символы граней m ($53\frac{1^\circ}{2}$, $54\frac{1^\circ}{4}$), n (4° , $63\frac{1^\circ}{2}$) и p ($65\frac{1^\circ}{2}$, 90°).

395. Определить недостающие символы граней моноклинного кристалла:

	φ°	ρ°
(010)	0	90
(011)	$10\frac{1}{2}$	$57\frac{1}{4}$
(101)	90	49

m	$-43\frac{1}{2}$	$64\frac{1}{2}$
n	$29\frac{1}{2}$	90
p	-90	30
q	43	$46\frac{1}{2}$

396. В моноклинном кристалле (классическая установка) $\varphi_{(011)} = 0,5^\circ$, $\rho_{(011)} = 58\frac{3^\circ}{4}$, $\varphi_{(110)} = 45\frac{3^\circ}{4}$. Определить символы граней m , n и p , если

	φ°	ρ°
m	90	30
n	46	50
p	$-45\frac{1}{2}$	67

397. Для моноклинного кристалла $\beta = 100,5^\circ$, $\varphi_{(111)} = 28,5^\circ$, $\rho_{(111)} = 66^\circ$. Определить символы граней $d\left(-90^\circ, 35\frac{1^\circ}{4}\right)$ и $r(32,5^\circ, 49,5^\circ)$.

398. Определить символы граней m , n и p , если $\varphi_{(01\bar{1})} = 30^\circ$, $\rho_{(01\bar{1})} = 39,5^\circ$:

	φ°	ρ°
m	0	55
n	0	$35\frac{1}{2}$
p	11	$47\frac{1}{2}$

399. Как обозначены грани $t(11^\circ, 33^\circ)$, $m\left(30^\circ, 75\frac{3^\circ}{4}\right)$ и $n\left(-16^\circ, 74\frac{1^\circ}{4}\right)$, если $\varphi_{(01\bar{1})} = 30^\circ$, $\rho_{(01\bar{1})} = 44,5^\circ$?

400. В тетрагональном кристалле $\rho_{(011)} = 58,5^\circ$. Определить символы следующих граней:

	φ°	ρ°
m	$26\frac{1}{2}$	$50\frac{1}{2}$
n	31	50
p	$18\frac{1}{2}$	$40\frac{3}{4}$

401. Определить геометрические константы ромбического кристалла, если $\varphi_{(111)} = 46,5^\circ$, $\rho_{(111)} = 44 \frac{3^\circ}{4}$.

402. В ромбическом кристалле $\varphi_{(110)} = 63,5^\circ$, $\rho_{(101)} = 42,5^\circ$. Определить геометрические константы кристалла.

403. Вычислить геометрические константы ромбического кристалла, если полярные расстояния граней (011) и (101) равны соответственно $14,5^\circ$ и 32° .

404. Определить элементы кристалла по следующим данным:

	φ°	ρ°
(010)	0	90
(100)	90	90
(110)	$67\frac{3}{4}$	90
(011)	$12\frac{1}{4}$	$19\frac{3}{4}$

405. Вычислить геометрические константы кристалла, пользуясь следующими данными:

	φ°	ρ°
(001)	90	$26\frac{3}{4}$
(010)	0	90
(100)	90	90
(110)	$47\frac{3}{4}$	90
($\bar{1}01$)	-90	$59\frac{1}{4}$

406. По основным граням триклинного кристалла определить его геометрические константы:

	φ°	ρ°
(001)	$19\frac{3}{4}$	22
(010)	0	90
(100)	$110\frac{1}{4}$	90
(111)	$53\frac{1}{2}$	$54\frac{1}{4}$

407. Вычислить геометрические константы кристалла, если грани его заданы следующими сферическими координатами:

	φ°	ρ°		φ°	ρ°
(001)	0	$10\frac{3}{4}$	($1\bar{1}0$)	$123\frac{1}{2}$	90
(010)	0	90	(011)	0	$49\frac{1}{2}$
(100)	76	90			

408. Определить геометрические константы тетрагонального кристалла, если $\rho_{(111)} = 50,5^\circ$.

409. В тетрагональном кристалле $\rho_{(011)} = 51,5^\circ$. Вычислить его элементы.

410. Определить элементы кристалла, если $\rho_{(10\bar{1}1)} = 43,5^\circ$.

411. Вычислить геометрические константы кристалла, если $\rho_{(11\bar{2}1)} = 43,5^\circ$.

412. Построить стереограммы основных граней кристалла, если $a/b = 0,819$; $c/b = 0,624$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

413. Нанести на стереограмму грани (100) , (010) , (001) и (111) , если $a : b : c = 0,824 : 1 : 0,647$, $\alpha = 89 \frac{3^\circ}{4}$, $\beta = 95^\circ$, $\gamma = 94,5^\circ$.

414. Определить сферические координаты основных граней, если $a_0 = 0,725$; $c_0 = 0,703$; $\alpha = 112^\circ$, $\beta = 97 \frac{3^\circ}{4}$, $\gamma = 68 \frac{1^\circ}{4}$.

415. Определить полярное расстояние единичной грани тетрагонального кристалла, если $c_0 = 1,97$.

416. Нанести на стереограмму основные грани, если $a : c = 1 : 0,79$; $\gamma = 120^\circ$.

417. Нанести на стереограмму двуединичные грани, если $a_0 = 1,50$; $c_0 = 1,36$; $\beta = 99,5^\circ$.

418. Определить позицию основных граней кристалла, для которого $a : b : c = 1,77 : 1 : 1,54$; $\beta = 102,5^\circ$.

§ 7. Симметрия двойников и их проектирование

419. Найти на стереограмме класса 222 кристаллографически допустимые позиции для $2'$ и m' . Показать в каждом случае, какие элементы симметрии индивида переходят в полную двойниковую группу. То же для класса 2.

420. Указать для каждого случая, при каких положениях двойникующих элементов вместо двойников образуются параллельные сростания кристаллов: а) $2/m$, б) $mm2$, в) $\bar{3}m$, г) $\bar{4}2m$, д) $m\bar{3}$.

421. В каких классах оригинальным (незаменимым) двойникующим элементом может служить центр симметрии?

422. Объяснить, почему не может существовать двойниковых групп $\bar{3}$ и $2\bar{3}$?

423. Кристаллы каких классов могут образовать двойник симметрии $m\bar{3}m$?

424. Даны кристаллы классов 622 и 422. Двойникующая ось $2'$ образует угол 45° с главной осью и перпендикулярна одной из побочных осей 2. Определить в каждом случае сохранившуюся подгруппу и полную двойниковую группу.

425. Какие элементы симметрии кристалла из класса $m\bar{3}m$ переходят в полную двойниковую группу при двойниковании по $[111]$? По (112) ? То же для двойников сростания.

426. Определить сохранившуюся подгруппу индивида в двойнике прорастания по $[\bar{1}12]$, если монокристалл относится к классу $m\bar{3}m$. То же для класса 432.

427. Определить сохранившуюся подгруппу индивида в двойнике прорастания кристалла из класса 23, если двойнивающий элемент задан следующими сферическими координатами: а) $\varphi = 0^\circ$, $\rho = 45^\circ$; б) $\varphi = 45^\circ$, $\rho = 30^\circ$; в) $\varphi = 45^\circ$, $\rho = 35 \frac{1^\circ}{4}$.

428. Какие элементы симметрии кристалла из класса $\bar{3}m$ переходят в полную двойниковую группу, если координаты двойниковой оси следующие:

- а) $\varphi = 30^\circ$, $\rho = 90^\circ$; б) $\varphi = 30^\circ$, $\rho = 60^\circ$.
в) $\varphi = 30^\circ$, $\rho = 30^\circ$.

429. Какие элементы симметрии кристалла из класса $\frac{4}{m}m\bar{3}m$ переходят в полную двойниковую группу, если двойниковая ось совпадает с нормалью к грани (011)? То же для двойников срастания. Записать двойниковые группы.

430. Определить полную двойниковую группу кристалла из класса $m\bar{3}m$, если двойнивающий элемент а) перпендикулярен к грани ($h0l$), б) занимает общее положение.

431. Определить полную двойниковую группу кристалла из класса $11\frac{2}{m}$ при двойниковании: а) по $[100]$, б) по $(hk0)$. То же для двойников срастания.

432. Определить симметрию двойника прорастания кристалла из класса 32, если двойнивающий элемент задан следующими сферическими координатами: а) $\varphi = 30^\circ$, $\rho = 90^\circ$; б) $\varphi = 40^\circ$, $\rho = 35^\circ$.

433. Определить группу симметрии двойника прорастания из класса $4/m$ при двойниковании по $\{hk0\}$. То же по $\{hkl\}$.

434. Определить двойниковую группу для кристалла из класса $m\bar{3}m$ при двойниковании по $\{hk0\}$. То же по (hhl) и $\{hkl\}$.

435. Определить полную двойниковую группу для кристалла из класса $\bar{4}3m$ при двойниковании по $[\bar{1}12]$ и $\{hk0\}$.

436. Дополнив стереограммы классов симметрии, показать (рис. 75) для каждой из перечисленных позиций сохранившуюся подгруппу и полную двойниковую группу (цифры на чертежах обозначают стереографические проекции $2'$ или гномостереографические проекции $\bar{2}'$).

437. Записать возможные двойниковые группы и показать положение двойнивающих элементов, если известна сохранившаяся подгруппа индивида: а) 222, б) $m\bar{3}m$, в) $3m$, г) $2/m$, д) 32, е) 6.

438. Определить возможные положения двойнивающих элементов (показать на стереограмме), если известны двойниковые группы и классы, к которым относятся данные индивиды:

Двойниковая группа	Класс индивида	Двойниковая группа	Класс индивида
А. а) $mm'm'$	$\frac{2}{m}$	Г. а) $\frac{6'}{m'} mm'$	} $m3m$
б) $m'mm$	$mm2$	б) $\frac{4'}{m} mm'$	
в) $m'm'm'$	222	в) $\frac{4}{m} m'm'$	
г) $mm'm'$	$\frac{6}{m} mm$		
Б. а) $\frac{4}{m} m'm'$	$\frac{4}{m}$	Д. а) $mm'm'$	} $m3m$
б) $\frac{4}{m'} m'm'$	422	б) $\bar{3}m'$	
в) $\frac{4'}{m'} mm'$	$\bar{4}2m$	в) $22'2'$	} 432
г) $\frac{4'}{m} mm'$	$m3m$		} 32
д) $\frac{4}{m'} mm$	$4mm$		
В. а) $6'22'$	} 32		
б) $\bar{6}'m'2$			
в) $32'$			
г) $m'm'2$			

439. Определить положение двойникового аналога грани (121) в двойнике кристалла из класса $mm2$ при двойниковании по {011}, если $\varphi_{(111)}=40^\circ$, $\rho_{(111)}=35^\circ$.

440. Определить положение двойникового аналога грани (221) в двойнике кристалла из класса 222 при двойниковании по (012), если $\varphi_{(110)}=30^\circ$, $\rho_{(101)}=40^\circ$.

441. Определить положение двойникового аналога грани (110) в двойнике кристалла из класса $\frac{4}{m}mm$ по нормали к грани (011); $\rho_{(111)}=40^\circ$. Какова симметрия образовавшегося двойника?

442. Определить положение двойникового аналога грани (212) в двойнике кристалла из классов: а) $m3$ по [102], б) 23 по {111}.

443. Определить угол между главными осями индивидов в двойнике кристалла из класса 422 по {011}, если $\rho_{(111)}=35^\circ$.

444. Определить положение двойниковой оси в кристалле класса 432, если грань (100) имеет следующие координаты: $\varphi=300^\circ$, $\rho=120^\circ$. Определить полную двойниковую группу.

445. Определить положение двойниковой плоскости в кристалле класса 23, если грань (110) имеет следующие координаты: $\varphi=135^\circ$, $\rho=30^\circ$.

446. В кристалле класса $m3m$ для грани (111) $\varphi=359,5^\circ$ и $\rho=89^\circ$. Определить координаты двойниковой оси и симметрию двойника.

447. Определить положение двойниковых аналогов граней $(\bar{1}00)$ и (010) в двойнике флюорита (класса $m\bar{3}m$) по $[111]$ (шпинелевый закон). К какому классу симметрии относится двойник?

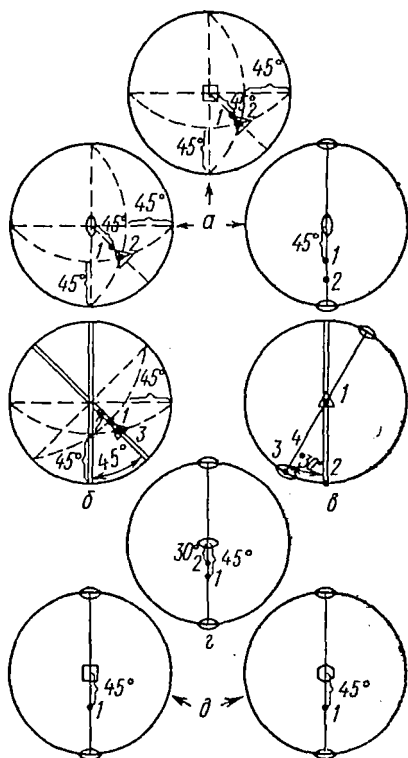


Рис. 75. К упражнению 436

448. Определить положение и символ двойниковой плоскости в моноклинном кристалле, если координаты граней (111) и $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ следующие: $\varphi_{(111)}=48^\circ$, $\rho_{(111)}=59^\circ$, $\varphi_{(\bar{1}\bar{1}\bar{1})}=132^\circ$, $\rho_{(\bar{1}\bar{1}\bar{1})}=300^\circ$ и $\beta=110^\circ$.

449. В кристалле корунда (класс $3m$) $\rho_{(02\bar{2}1)}=72,5^\circ$. Определить положение двойникового аналога грани $(02\bar{2}1)$ и угол между осями 3-го порядка в двойнике по $(10\bar{1}1)$. Напомним, что грани $\{10\bar{1}1\}$ притупляют (см. стр. 46) ребра формы $\{02\bar{2}1\}$.

450. Определить положение двойникового аналога грани (210) (кристаллы пирита, симметрия $m\bar{3}$): а) в двойнике по (011) — «железный крест»; б) в двойнике по $[001]$.

451. Определить координаты двойниковых аналогов граней (112) и (012) в двойнике кристалла меди по шпинелевому закону (см. упражнение 448).

452. В кристалле ромбической серы $\varphi_{(111)}=51^\circ$, $\rho_{(111)}=71,5^\circ$. Определить положение двойниковых аналогов: а) граней (111), (011) и (001) в двойнике по (101); б) граней (111), (101), (001) в двойнике по (011).

453. Для кристалла халькопирита (класс $4\bar{2}m$) $\rho_{(011)}=63^\circ$. Определить положение двойниковых аналогов граней а) (112) и (111) в двойнике по {001}; б) (111) и (124) в двойнике по (012).

454. Кристаллы тетраэдрита относятся к классу $\bar{4}3m$. В двойнике по шпиннелевому закону (см. упражнение 447) определить положение двойниковых аналогов всех граней формы $\{\bar{1}11\}$, а также граней (012) и (122).

455. В кристалле рутила (класс $\frac{4}{m}mm$) $\rho_{(011)}=32\frac{3^\circ}{4}$. Определить координаты двойниковых аналогов граней (101), (111) и (230) при двойниковании по (011) — коленчатый двойник. Какова симметрия образовавшегося двойника?

456. Определить угол между главными осями индивидов кварца (класс 32) при двойниковании по $(11\bar{2}2)$ (японский двойник), если $\varphi_{(10\bar{1})}=51\frac{3^\circ}{4}$.

457. В бразильском двойнике кварца (класс 32) двойническая плоскость $(11\bar{2}0)$. Определить симметрию двойника и угол между гранями $(10\bar{1}2)$ и $(10\bar{1}2)$ (см. упражнение 456). Как можно назвать в двойнике форму $\{51\bar{6}1\}$?

458. Определить угол между гранями $(10\bar{1}1)$ и $(10\bar{1}1)$ в дофи-нейском двойнике кварца (см. упражнение 456 и стр. 51). Какова симметрия образовавшегося двойника и как можно назвать упомянутую простую форму?

459. В кристалле анортита (класс $\bar{1}$) основные грани занимают следующее положение:

(001)	$80^\circ 41'$	$26^\circ 12'$
(100)	$58^\circ 02'$	$90^\circ 00'$
(010)	$0^\circ 00'$	$90^\circ 00'$
$(\bar{1}11)$	$320^\circ 00'$	$37^\circ 00'$

Найти угол между (001) и (001) в двойнике по нормали к грани (021) — бавенский закон двойникования.

460. Для кристаллов кальцита (класс $\bar{3}m$) характерны двойники по а) пинакoidу (0001), б) ромбоэдру спайности — основному ромбоэдру $(10\bar{1}1)$, в) острому ромбоэдру $(02\bar{2}1)$, г) тупому ромбоэдру $(01\bar{1}2)$. Найти взаимное расположение тройных осей в двойниках по каждому из этих законов, если $\rho_{(10\bar{1})}=44,5^\circ$.

461. Грань основного (спайного) ромбоэдра кальцита принята за единичную ($\rho_{(10\bar{1})} = 44,5^\circ$). Определить положение и символы ромбоэдра, притупляющего (см. стр. 46) основной ромбоэдр. Определить положение и символ ромбоэдра, притупляемого основным ромбоэдром. Определить положение граней $(10\bar{1}1)$ и (0001) в двойнике по $(0\bar{1}\bar{1}2)$.

462. Монокристаллы кальцита (см. упражнение 460) при ударе раскалываются на ромбоэдры. Какой многогранник можно выколоть из двойника по (0001) ? Какова собственная симметрия полученного многогранника?

§ 8. Преобразование координатных систем кристаллических многогранников. Матричное представление симметрических операций

463. Для акантита матрица преобразования осей от морфологической установки к структурной $(M) = \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} / 010 / \frac{\bar{3}}{2} 0 \frac{1}{2}$. Определить старый символ грани (123) и новый — ребра $\{011\}$.

464. Для кристаллов малахита матрица преобразования осей к новой установке $(M) = \bar{1} 0 \frac{\bar{1}}{3} / 0\bar{1}0 / 00 \frac{\bar{2}}{3}$. Определить старые символы единичной и координатных граней.

465. Преобразование осей к новой системе координат для купрокопиапита задано $(M) = \frac{1}{2} 0 \frac{\bar{1}}{6} / \frac{\bar{1}}{2} \frac{\bar{1}}{2} 0 / \frac{\bar{1}}{2} 0 \frac{\bar{1}}{6}$. Определить старые символы для (112) и $[10\bar{3}]$ и новые для (221) и $[01\bar{1}]$. К какой сингонии относятся кристаллы этого минерала?

466. Какую сингонию можно предположить для минерала, если матрица перехода к новой морфологической установке $(M) = 101/010/\bar{1}01$?

467. Для кристаллов дурангита матрица преобразования старых осей в новые $(M) = 001/010/101$. Прочсть, воспользовавшись соответствующими матрицами, старые символы новых координатных граней и осей, а также новые символы старых координатных граней и осей.

468. Матрицы преобразования координатных осей для некоторого кристалла $(M_1) = 010/001/100$ и $(M_2) = 100/0 \frac{1}{2} 0/002$. Дать геометрическую интерпретацию каждого из этих преобразований. Какую сингонию можно предположить?

469. Для ромбического веберита известны три установки:

I	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
II	<i>b</i>	<i>a</i>	<i>c</i>
III	<i>c</i>	<i>a</i>	<i>b</i>

Записать $(M_{I \rightarrow II})$, $(M_{II \rightarrow III})$, $(M_{I \rightarrow III})$.

470. Доказать, что если (M_a) — матрица преобразования осей от установки I к II, а (M_b) — то же от установки II к III, то $(M) = (M_b) \times (M_a)$ — матрица преобразования от I к III.

471. Для кристаллов реалгара известны 3 установки, переход от I к II описывается $(M) = 100/0 \frac{1}{2} 0/001$, от II к III $(M) = \bar{1}0\bar{1}/0\bar{2}0/001$. Какой символ в установке III получают грани, обозначенные в установке I как (001), ($\bar{1}11$) и (021)?

472. Для лорандита известны установки Пикока, Гофманна и Креннера, связанные следующими матрицами преобразования: $(M_{П \rightarrow Г}) = \bar{1}0\bar{2}/0\bar{1}0/001$, $(M_{К \rightarrow П}) = \bar{2}0\bar{2}/0\bar{2}0/101$. Какие символы получают в установке Гофманна грани, обозначенные у Креннера (111), (101) и (110)? Как обозначены Креннером ребра, принятые Гофманном за оси координат?

473. При переходе к новой установке ромбический кристалл поворачивают на 90° вокруг оси *X* по часовой стрелке, а затем на 90° вокруг оси *Z* на себя. Определить новые символы для (212) и $[110]$, а также старые для (210) и $\{101\}$, если в новой установке единичной станет грань (112).

474. Определить новый символ старой единичной грани и старый символ новой, если при преобразовании, связанном лишь с выбором новой единичной грани, ($\bar{1}12$) получит символ ($\bar{1}14$). Вычислить матрицу преобразования осей.

475. В кристаллах висмутита при переходе к новой установке сохраняются направления координатных осей, но ребро $[121]$ получает символ $[123]$. Какой символ станет у грани (111) и как изменятся геометрические константы кристалла?

476. Определить матрицу преобразования осей для кристалла класса 422, если при переходе к структурной установке единичная грань получит символ (102).

477. Для маухерита (класс 422) преобразование осей к структурной установке задано $(M) = \frac{1}{4} \frac{1}{4} 0 / \frac{\bar{1}}{4} \frac{1}{4} 0 / 001$. Дать геометрическую интерпретацию этого преобразования.

478. Для ретгерсита (класс 422) преобразование осей к структурной установке описывается $(M) = 110/\bar{1}10/001$. Дать геометрическую интерпретацию этого преобразования.

479. В кристалле класса *btt* при переходе к структурной установке грань ($11\bar{2}1$) получает символ (01 $\bar{1}2$). Вычислить матрицы прямого и обратного преобразования.

480. Для пенфильдита (класс $\frac{6}{m} \text{mm}$) матрица преобразования к осям структурной установки $(M) = \frac{1}{3} \frac{\bar{1}}{3} 0 / \frac{1}{3} \frac{2}{3} 0 / 001$. Дать геометрическую интерпретацию этого преобразования.

481. Новая, структурная, установка для некоторого тетрагонального минерала отличается от морфологической лишь поворотом координатной системы вокруг оси Z на $26,5^\circ$. Определить старые символы новых координатных осей и новой единичной грани. Каким образом классы симметрии можно предположить?

482. Структурная установка некоторого гексагонального минерала отличается от морфологической лишь поворотом координатной системы вокруг оси Z на 30° . Получить матрицы прямого и обратного преобразования.

483. Определить матрицу преобразования координатных осей от установки Бравэ к установке Миллера (см. стр. 41), если грани $(1\bar{1}02)$ по Бравэ отвечает (101) по Миллеру.

484. Матрица перехода от установки Бравэ к установке Миллера $(M) = 211/\bar{1}11/\bar{1}21$. Расположить на стереограмме координатные оси и основные грани для обеих систем.

485. Для гексагональных кристаллов изредка употребляют установку Шрауфа, матрица перехода к которой от установки Бравэ $(M) = 210/010/001$. Расположить на стереограмме координатные оси и основные грани для обеих систем.

486. Определить недостающие символы граней полигадита, если

(hkl)	(HKL)
$(\bar{1}\bar{1}0)$	$(1\bar{2}\bar{1})$
$(\bar{1}\bar{2}0)$	$(1\bar{4}\bar{1})$
(010)	(010)
$(\bar{1}01)$	(101)
$(\bar{1}\bar{1}1)$	(121)
$(\bar{3}\bar{1}3)$	(323)
$(\bar{1}\bar{3}1)$?
?	$(10\bar{1})$
(111)	?
?	(111)

487. Определить для аксинита матрицу преобразования осей, если $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$, $[001]$, $[110]$ и $(\bar{1}\bar{3}1)$ получают соответственно символы $[001]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ и $(00\bar{1})$. Как обозначены в старой установке ребра, принятые в новой за оси координат?

488. При переходе к новой морфологической установке силванита оси X , Y и Z получили соответственно символы $\{101\}$, $\{010\}$ и $\{101\}$, а грань $(112) - (311)$. Определить матрицу преобразования к осям новой установки.

489. Две координатные системы кристаллов кизерита связаны следующим образом:

[rst]	[RST]
[321]	$\bar{[3\bar{2}2]}$
[101]	[101]
[1 $\bar{1}$ 2]	[223]
[0 $\bar{1}$ 1]	[021]
[102]	$\bar{[203]}$
[122]	[243]

Определить старый символ новой единичной грани и новый символ старой единичной грани.

490. Определить для кристаллов гипса матрицу преобразования осей от установки Гольдшмидта к установке Терпстра, если ребрам $\bar{[011]}$, [101] и [100] в первой установке отвечают [011], [100] и [201] во второй, а грани $\bar{[113]}$ — грань $\bar{[1\bar{1}3]}$.

491. Какие символы получат в кубическом кристалле грани (100), (111), (120), (123), если за координатные оси принять ребра тетраэдра?

492. Определить матрицу перехода к системе, в которой за координатные оси X , Y и Z приняты соответственно оси Z_v , Z и Z_z (см. рис. 74).

493. При преобразовании координатных осей марказита к новой установке единичная грань остается прежней, а грани (100), (010) и (001) получают соответственно символы (001), (100) и (010). Определить старые геометрические константы, если для новой установки $a : b : c = 0,8194 : 1 : 0,6245$.

494. Определить матрицу преобразования для кристаллов реалгара от установки, при которой $a : b : c = 1,4403 : 1 : 0,9729$ и $\beta = 113^\circ 55'$ к установке с $a : b : c = 0,7203 : 1 : 0,4858$ и $\beta = 113^\circ 55'$.

495. Для корунда (класс $\bar{3}m$) $c : a = 2,734$. Определить константы для корунда в тригональной установке, если матрица преобразования к осям этой установки $(M) = 211/\bar{1}11/\bar{1}21$.

496. Преобразование осей для лорандита от установки Гольдшмидта к установке Пикока описывается $(M) = \bar{202}/0\bar{20}/001$, для преобразования от Креннера к Пикоку $(M) = \bar{202}/0\bar{20}/101$. Определить геометрические константы лорандита в установке Креннера, если по Гольдшмидту $a : b : c = 1,087 : 1 : 1,078$; $\beta = 104^\circ 16'$.

497. Для гипса переход от минералогической установки к одной из структурных описывается $(M) = \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2} / 010 / \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$. Определить геометрические константы для второй установки, если в первом случае $a : b : c = 0,6779 : 1 : 0,4145$, $\beta = 99,5^\circ$.

498. В ромбическом кристалле $a_0 = 1,3790$, $c_0 = 0,4273$. Как изменятся геометрические константы, если в новой установке направ-

ление осей координат сохранится, а единичная грань получит символ (221)?

499. Для кристаллов некоторого соединения приняты две установки, геометрические константы в первом случае — $a_0=1,4403$, $c_0=0,9729$, $\beta=113^\circ55'$, во втором — $a_0=0,7203$, $c_0=0,4858$, $\beta=113^\circ55'$. Какой символ получит во второй установке грань, принятая в первой за единичную?

500. Переход гексагонального молизита к структурной установке описывается $(M) = \bar{1}\bar{1}00/0\bar{1}\bar{1}0/\bar{1}010/0002$. Получить четырехстрочную матрицу обратного преобразования.

501. Определить положение основных граней ратита, если заданы сферические координаты следующих граней:

	φ°	ρ°
(010)	0	90
(101)	90	$26\frac{1}{2}$
(310)	44	90
($\bar{2}11$)	$-26\frac{1}{2}$	50

К какой сингонии относятся кристаллы этого минерала?

502. Определить позиции граней (211), (051) и (302), если известны сферические координаты следующих граней:

	φ°	ρ°
(113)	$58\frac{1}{2}$	25
(121)	$39\frac{1}{2}$	62
(102)	90	$30\frac{1}{2}$
(130)	$28\frac{1}{2}$	90

503. Определить геометрические константы триклинного кристалла, если известны сферические координаты следующих граней:

	φ°	ρ°
($\bar{1}\bar{2}1$)	-141	$48\frac{1}{2}$
($0\bar{1}1$)	$147\frac{1}{2}$	$30\frac{1}{2}$
(201)	$97\frac{1}{2}$	67
(210)	85	90

504. Моноклинный кристалл считали триклинным. При исправлении ошибки оси X и Y получили соответственно символы [$\bar{2}01$] и

[021], направление оси Z и положение единичной грани не было изменено. Какие ребра приняты в правильной установке за оси координат?

505. Ромбический кристалл был принят за моноклинный. При исправлении ошибки у граней (100) и (010) символы сохранились, грань $(\bar{1}01)$ стала (001), а (011) — единичной. Какой символ стал у бывшей оси X и грани (121)?

506. Моноклинный акантит считали ромбическим. При первом исправлении ошибки было изменено направление оси Z , которую совместили с ребром $[\bar{1}01]$, при этом грань $(11\bar{1})$ получила символ $(21\bar{2})$. Впоследствии была предложена третья установка — структурная. Получить матрицу преобразования от первой моноклинной установки к структурной, если грани, имевшие в «ромбической» установке символы (103), (010) и $(\bar{1}01)$, оказались координатными, а ребро $[211]$ получило символ $[52\bar{1}]$.

507. Найти произведения следующих операций: а) $4^1 \cdot m_{\perp} =$
 б) $4^1 \cdot \bar{1} =$ в) $\bar{3} \cdot m_{\perp} =$.

508. Вычислить произведения следующих операций:

$$\begin{aligned} \text{а) } 4_2^{\circ} \cdot 2^{\circ} = \quad \text{б) } \bar{4}_2 \cdot \bar{2}_2 = \quad \text{в) } 5_2^{\circ} \cdot \bar{2}_2 = \quad \text{г) } \bar{5} \cdot 2^{\circ} = \quad \text{д) } 6_2^{\circ} \cdot \bar{2}_2 = \\ \text{е) } 6_2^{\circ} \cdot 2^{\circ} = \quad \text{ж) } 8_2 \cdot \bar{2}_2 = \quad \text{з) } \bar{8}_2 \cdot 2^{\circ} = . \end{aligned}$$

509. Доказать, что $3_2^2 \cdot 2x = 2_u \cdot 3_2^2 = 2x \cdot 3_2^1 = 3_2^1 \cdot 2_u$.

510. Доказать, что $2_z \cdot 3 = 3_y^{50}$.

511. Доказать, что повороты вокруг осей 2-го и 3-го порядков не коммутируют друг с другом.

512. Операцию какого рода, первого или второго, представляет каждая из перечисленных матриц:

$$\begin{pmatrix} 010 \\ 100 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0\bar{1}0 \\ \bar{1}00 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 00\bar{1} \\ 010 \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} 100 \\ 001 \\ 0\bar{1}0 \end{pmatrix} ?$$

513. Доказать на примере группы 422 осевую теорему Эйлера.

514. Перечислить операции, для которых справедливо равенство $(M) = (M^{-1}) = (M^{-1})'$.

515. Определить порядок группы по матричному представлению операции, задающей эту группу:

$$\text{а) } \begin{pmatrix} 010 \\ \bar{1}00 \\ 001 \end{pmatrix}, \quad \text{б) } \begin{pmatrix} \bar{1}\bar{1}0 \\ 010 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}, \quad \text{в) } \begin{pmatrix} 110 \\ 100 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}.$$

⁵⁰ Обозначения осей 3 в кубической сингонии см. на рис. 74.

516. Какие из перечисленных групп являются циклическими: $\bar{3}$, $\bar{6}$, $3m$, 32 и 6 ?

517. Группа задана следующими операциями:

$$\begin{pmatrix} 010 \\ \bar{1}00 \\ 001 \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} 100 \\ 010 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}.$$

Дать матричное представление всех остальных операций.

518. Известны две операции группы:

$$\begin{pmatrix} 0\bar{1}0 \\ 110 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} 010 \\ 100 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}.$$

Выписать ее подгруппы.

519. Дать матричное представление порождающих операций групп 32 и 23 .

520. Какую операцию представляет каждая из перечисленных матриц? Образуют ли они группу?

а) $\begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 100 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 010 \\ 001 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 100 \\ 010 \\ 001 \end{pmatrix}$;

б) $\begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 100 \\ 0\bar{1}0 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 010 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 100 \\ 010 \\ 001 \end{pmatrix}$;

в) $\begin{pmatrix} 100 \\ 0\bar{1}0 \\ 001 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 010 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} \bar{1}00 \\ 0\bar{1}0 \\ 00\bar{1} \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 100 \\ 010 \\ 001 \end{pmatrix}$;

г) $\begin{pmatrix} 110 \\ 100 \\ 001 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 010 \\ \bar{1}\bar{1}0 \\ 001 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 100 \\ 010 \\ 001 \end{pmatrix}$.

521. Дать матричное представление поворота вокруг вертикальной оси 8-го порядка. Найти способ проверки полученного результата.

522⁵¹. Размножить грань (hkl) и ребро $[rst]$ осью 6_z .

523. Размножить грань (hkl) осью 3_x .

524. Какой символ будет иметь грань (hkl) , если после поворота на 120° вокруг оси $\bar{3}_x$ по часовой стрелке отразить эту грань в плоскости m_z' ?

525. Определить, какой символ получит грань (123) , если после отражения в плоскости m_y' ⁵² повернуть ее вокруг оси $\bar{4}_x$ на 90° против часовой стрелки.

⁵¹ При решении задач 522—525 воспользоваться матричными представлениями операций симметрии.

⁵² Обозначения диагональных элементов в кубической сингонии очевидны из рис. 74.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Анизотропность 7
- Бипирамида дигональная (=ромбическая призма) 57
- ди-*n*-гональная 57
 - *n*-гональная 57
 - тригональная 55
- Биполярное направление 53
- Вершина кристалла 7
- Вид симметрии (=класс симметрии= =точечная группа) 13
- Высшая категория сингоний 25
- Гексагон 56
- Гексагональная пирамида 54
- призма 56
 - сингония 25
- Гексоктаэдр (=октагексаэдр=сорока-восьмигранник) 65
- Гексатетраэдр 66
- Гексаэдр (куб) 60
- Геометрические константы кристалла (=элементы кристалла) 12, 49
- Гироэдр (осевик) 24-гранный (=пентагон-триоктаэдр) 67
- — 12-гранный (=пентагон-трите-траэдр) 67
- Гномостереографическая проекция 16
- Грани таутозональные 37
- Грань кристалла 7
- — возможная 43, 47
 - — двуединичная 43
 - — единичная 38
 - — масштабная 42
 - — общего положения 52
 - — параметрическая 38
 - — частного положения 52
- — притупляющая 46
- Группа бесконечная 13
- двойниковая 49
 - замкнутая (конечная) 13
 - Клейна 85
 - математическая 13
 - симметрии 13
 - точечная (=класс симметрии= =вид симметрии) 13, 21
 - циклическая 13
 - — 2-го рода 82
- Двойник кристалла 49
- прорастания 50
 - срастания 50
- Двойниковая группа 49
- Двойниковая (=двойникующая) ось 49
- — плоскость 49
- Дельтоэдр 12-гранный (=тетрагон-три-тетраэдр) 63
- 24-гранный (=тетрагон-триокта-эдр) 64
- Ди-*n*-гональная бипирамида 57
- пирамида 53
 - призма 55
- Дигональная бипирамида (=ромбическая призма) 55
- пирамида (=диэдр осевой) 54
 - призма (=пинаконд) 54
- Дигональный трапецоэдр (=ромбический тетраэдр) 58
- Дидигональная (=ромбическая) призма 56
- Дидодекаэдр 66
- Дитригон 56
- Дитригональная пирамида 56
- призма 56
- Диэдр 57

- осевой (=сфеноид) 54
- плоскостной (=дома) 57
- Дома (=диэдр плоскостной) 57
- Дуги больших кругов 16
- малых кругов 16
- Единичная грань 38
- Единичное направление 21
- Единичный элемент группы 13
- Закон Гаюи (=закон рациональности двойных отношений параметров) 37
- зон (поясов) 44
- Вейса 44
- постоянства углов 32
- поясов (зон) 44
- преобразования ковариантный 69
- контравариантный 73
- симметрин 9, 32
- Законы двойничкования 51
- Зеркальная ось симметрии 11
- Зеркальная плоскость симметрии 9
- Зеркальное (энантиоморфное) равенство 8
- Зона (пояс) кристалла 37
- Зоноэдр (=ромбододекаэдр) 61
- Инверсионная ось симметрии 11
- Индексы грани 34
- — Миллера 34
- ребра 37
- Категории сингоний 23
- Категория высшая 25
- низшая 24
- средняя 24
- Квадраты Кейли 27
- Класс (=группа) симметрии 23
- — — гексаоктаэдрический 65
- — — гексатетраэдрический 66
- — — дидодекаэдрический 66
- — — пентагон-триоктаэдрический 67
- — — пентагон-тригексаэдрический 67
- — — пинакоидальный 59
- — — ромбоэдрический 59
- — — тетрагонально-тертаэдрический 59
- Классы (=группы) симметрии 54
- — — ди-*n*-гонально-бипирамидальные 57
- — — — пирамидальные 55—57
- — — — *n*-гонально-бипирамидальные 57
- — — — пирамидальные 54, 55
- — — «симметризованных трапецеэдров» (пинакоида, ромбоэдра, тетрагонального тетраэдра) 59
- — — скаленоэдрические 59
- — — трапецеэдрические 58
- Ковариантное преобразование 69
- Комбинационный многогранник 53
- Конгруэнтное равенство 8
- Константы (параметры) пространственной решетки 34
- Контравариантное преобразование 73
- Координатные системы («установки») кристаллов 23
- — — — Миллера 39
- — — — Бравэ 39
- Кристалл 7
- Кристаллический многогранник 7
- Кристаллическое вещество 7, 30
- Круг проекций (основной) 16
- Куб (гексаэдр) 60
- Кубическая сингония 25
- Кубический (правильный) тетраэдр 60
- Матрица обратная 69
- преобразования индексов граней 71, 72
- — — ребер 73
- — — координатных осей 69
- — — прямая 69
- — — симметрической операции 79
- — — транспонированная 71
- Метод косинусов Вульфа 47
- перекрестного умножения 44
- развития зон (поясов) 47
- треугольников 89
- Моноклиная сингония 24
- Моноэдр (педион) 54
- Многогранник комбинационный 53
- кристаллический 7
- Направление биполярное 53
- — — единичное 21
- — — особое 23
- — — полярное 53
- Направляющие косинусы 81
- n*-Гональная бипирамида 57
- пирамида 54
- призма 54
- Низшая категория сингоний 24
- Обозначения классов симметрии по Бравэ 12
- — — — Герману — Могену (международные) 26
- — — — Шенфлису 20
- Октаэдр 60
- Октагексаэдр (=гексаоктаэдр=сорока-восьмигранник) 65
- Операции коммутирующие 112
- некоммутирующие 81
- симметрии 7
- Осевик (гироэдр) 24-гранный (=пентагон-триоктаэдр) 67
- — — 12-гранный (=пентагон-тригексаэдр) 67

- Осевые углы 23, 34
- Основной круг проекций 16
- Особые направления кристалла 23
- Ось двойниковая (двойникоующая) 49
 - зоны 37
 - координатная 23
 - проектирования 15
 - симметрии зеркальная 11
 - — инверсионная 11
 - — поворотная 8
 - — сложная 11
- Параметры грани (узловой сетки) 33
 - Вейса 34
 - (константы) пространственной решетки 34
- Педиион (= моноэдр) 54
- Пентагон-додокаэдр 61
- Пентагон-триоктаэдр (= осевик, или ги-роэдр, 24-гранный) 67
- Пентагон-тритетраэдр (= осевик, или ги-роэдр, 12-гранный) 67
- Период повторяемости (идентичности) 33
- Пинакоид 54
- Пирамида гексагональная 54
 - дигональная (= диэдр осевой, или сфеноид) 54
 - ди-*n*-гональная 55
 - дитригональная 56
 - *n*-гональная 54
 - тригональная 54
- Пирамидальный куб (= тетрагексаэдр) 61
 - октаэдр (= тригон-триоктаэдр) 62
 - тетраэдр (= тригон-тритетраэдр) 64
- Плоскостная симметрия грани 52
- Плоскость двойниковая (двойникоующая) 49
 - проекций 16
 - симметрии зеркальная 9
- Поворотная ось симметрии 8
- Подгруппа 13
- Полярное направление 53
- Полярные углы 47
- Порядок группы 13
 - оси симметрии 8
- Пояс (зона) кристалла 37
- Правило расщепления индексов 47
 - сложения индексов 46
- Преобразование ковариантное 69
 - контравариантное 73
- Призма гексагональная 54
 - дигональная (= пинакоид) 54
 - дидигональная (ромбическая) 56
 - ди-*n*-гональная 55
 - дитригональная 56
 - *n*-гональная 54
 - тетрагональная 54
- тригональная 54
- Проекция гномостереографическая 16
 - двойника 44
 - стереографическая 15
- Простая форма кристалла 52
 - — — закрытая 53
 - — — общая 52
 - — — открытая 53
 - — — частная 52
- Простые формы кристалла основные 60
 - — — постоянные 60, 62
 - — — производные 61
- Пространственная решетка кристалла 30
- Равенство зеркальное 8
- Равенство конгруэнтное 8
- Ребро кристалла 7
- Ромбическая (= дидигональная) призма 56
 - сингония 24
- Ромбический тетраэдр (= дигональный трапецоэдр) 58
- Ромбододекаэдр (зоноэдр) 62
- Ромбоэдр 58
- Сетка Вульфа 16, приложение I
- Символ грани (узловых сеток) кристалла 33
 - Миллера 34
 - ребра (узловых рядов) кристалла 36
- Симметрия 7
- Симметрия грани (плоскостная) 52
- Симметрия двойника 49
 - кристалла 7
 - простой формы кристалла (собственная) 57
- Сингония 23
 - гексагональная 25
 - кубическая 25
 - моноклиная 24
 - ромбическая 24
 - тетрагональная 25
 - триклиная 24
- Скаленоэдр 59
 - тетрагональный 59
 - тригональный 59
- Сложные оси симметрии 11
- Собственная симметрия простой формы 57
- Сорокаосьмигранник (= гексооктаэдр = октагексаэдр) 65
- Сохранившаяся подгруппа двойника 49
- Средняя категория сингоний 24
- Стереографическая проекция 15
- Сфеноид (= диэдр осевой) 54
- Сфера проекций 15
- Сферическая проекция 15
 - — направления 15
 - — плоскости 16

- Сферические координаты (φ , ρ) 15, 113
- Таутозональные грани 37
- Тетрагексаэдр (=пирамидальный куб) 61
- Тетрагон-триоктаэдр (=дельтоэдр 24-гранный) 64
- Тетрагон-тритетраэдр (=дельтоэдр 12-гранный) 63
- Тетрагональная призма 54
— сингония 25
- Тетрагональный скаленоэдр 59
— тетраэдр 58
- Тетраэдр (=тетраэдр кубический или правильный) 60
— ромбический (=диагональный трапецоэдр) 58
— кубический (правильный) 60
— тетрагональный 58
- Точечная группа 13, 21
- Точка зрения 16
- Трапецоэдр 58
— диагональный (=ромбический тетраэдр) 58
— тригональный 58
- Трансляция 30
- Тригональная бипирамида 57
— пирамида 54
— призма 54
- Тригональный скаленоэдр 59
— трапецоэдр 58
- Тригон-триоктаэдр (=пирамидальный октаэдр) 62
- Тригон-тритетраэдр (=пирамидальный тетраэдр) 64
- Триклинная сингония 24
- Углы осевые 23, 34
— полярные 47
- Узловая сетка пространственной решетки 31
- Узловой ряд пространственной решетки 31
- Умножение симметрических операций 17
- Фигуры травления 52
- Центр симметрии (инверсии) 9
- Штриховка на гранях кристалла 52
- Элементарная ячейка пространственной решетки 34
- Элементарный угол поворота оси 8
- Элементы (геометрические константы) кристалла 12, 49
— симметрии 7, 8
— — двойниковые (двойнивающие) 49
— — неэквивалентные 12, 26
— — I рода 8
— — II рода 9
— — эквивалентные 12, 27
- Энантиоморфизм 8
- Энантиоморфное (зеркальное) равенство 8
- Энантиоморфные формы 58

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Предисловие редактора</i>	3
Глава I. СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ	7
§ 1. Элементы симметрии кристаллов. Операции симметрии	7
§ 2. Стереографические проекции. Сетка Вульфа	15
§ 3. Основные теоремы умножения симметрических операций	17
§ 4. Обозначение классов симметрии по Шенфлису	20
§ 5. Схематический вывод групп (классов) симметрии	21
§ 6. Координатные системы в кристаллографии	23
§ 7. Международные обозначения классов симметрии (символы Германа — Могена)	26
Глава II. СИМВОЛЫ ГРАНЕЙ И РЕБЕР КРИСТАЛЛОВ. ОСНОВНЫЕ ЗАКОНЫ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ	30
§ 1. Пространственная решетка кристалла. Закон постоянства углов и закон симметрии	30
§ 2. Символы узловых сеток (граней) кристалла	33
§ 3. Символы узловых рядов (ребер) кристалла	36
§ 4. Закон Гаюи. Определенные символы граней и ребер кристаллических многогранников	37
§ 5. Единичная грань в кристаллах разных сингоний	38
§ 6. «Четвертый» индекс в гексагональной сингонии	39
§ 7. Индексирование кристаллов, не имеющих грани, способной служить единичной	42
§ 8. Графическое определение символов и элементов кристалла. Закон Вейса	44
§ 9. Симметрия и проектирование двойников	49
Глава III. ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ	52
Глава IV. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КООРДИНАТНЫХ СИСТЕМ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МНОГОГРАННИКОВ	68
§ 1. Зависимость между старой (XYZ) и новой ($X'Y'Z'$) координатными системами, а также между старыми $\{(hkl), [rst]\}$ и новыми $\{(HKL), [RST]\}$ символами граней и ребер	68
§ 2. Вычисление матриц преобразования осей при различных заданиях координатных систем	74
§ 3. Матричное представление симметрических операций кристаллического многогранника	79
Глава V. РАЗБОР НЕКОТОРЫХ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ	82
Глава VI. УПРАЖНЕНИЯ	113
§ 1. Симметрия кристаллических многогранников	113
§ 2. Символы граней	122
§ 3. Простые формы кристаллов	127
§ 4. Символы простых форм	132
§ 5. Символы ребер. Закон зон	137
§ 6. Метод косинусов Вульфа. Графическое определение элементов (геометрических констант) кристалла	142
§ 7. Симметрия двойников и их проектирование	146
§ 8. Преобразование координатных систем кристаллических многогранников. Матричное представление симметрических операций	151
<i>Предметный указатель</i>	159

Юдифь Герцевна Загальская,
Галина Петровна Литвинская

Геометрическая кристаллография

Редактор Н. В. БАРИНОВА Переплет художника
М. М. НОСОВОЙ Технический редактор А. П. НИКОЛАЕВ
Корректоры И. А. БОЛЬШАКОВА, Н. И. КОНОВАЛОВА
Тематический план 1973 г. № 1136

Сдано в набор 16.V 1973 г. Подписано к печати 1.XI 1973 г.
Л-58523 Формат 60×90¹/₁₆ Бумага типографская № 2
Физ. печ. л. 10,25 Уч.-изд. л. 10,63 Изд. № 1905 Зак. 131
Тираж 5120 экз. + вклейка и вкладка Цена 47 коп.

Издательство Московского университета
Москва, К-9, ул. Герцена, 5/7. Типография Изд-ва МГУ.
Москва, Ленинские горы.

114

1508.