

**УСТАНОВКА КРИСТАЛЛОВ. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИМВОЛОВ
(ИНДЕКСОВ) ГРАНЕЙ КРИСТАЛЛОВ**

Цель работы: определение индексов граней для кристаллов различных сингоний.

Оборудование и материалы: набор моделей кристаллов различных сингоний; таблицы классов симметрии кристаллов; измерительные линейки, угольники.

1. Общие сведения

Для полной характеристики кристаллических многогранников необходимо иметь точные сведения о взаимном пространственном расположении граней на кристаллах. Для этого используются *кристаллографические символы*, определяющие положение любой грани относительно некоторых координатных осей и некоторой грани, принятой за единичную (масштабную). Выбор кристаллографических осей и единичной грани называется установкой кристаллов.

Для кристаллов тригональной и гексагональной сингоний принимаются оси X, Y, Z , а для остальных сингоний U, Y, Z .

В кристаллографии принята правая система координат, то есть положительными направлениями считаются: для оси X – вперед на наблюдателя, Y – вправо от наблюдателя, Z – вверх (рис. 12).

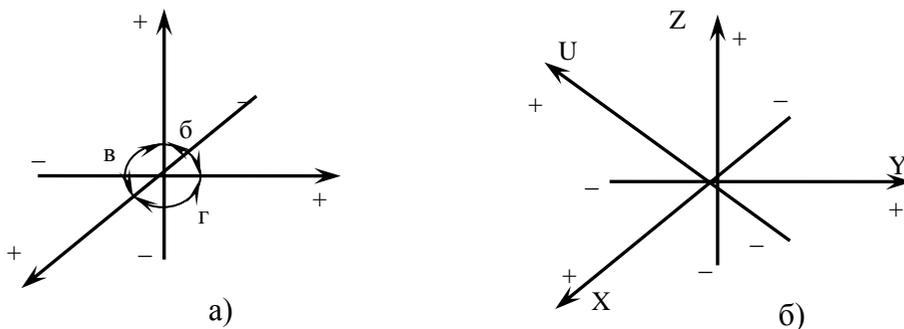


Рис.12. Направления кристаллографических осей в системах:
а) трехкоординатной; б) четырехкоординатной

Оси координат располагаются в соответствии с симметрией кристаллов либо по осям симметрии, либо по нормальям к плоскостям, а если их нет – по ребрам кристаллического многогранника (действительным или возможным).

Единичную грань принимают таким образом, чтобы она пересекала либо все координатные оси, либо максимальное их число. При этом масштабные отрезки, отсекаемые ею, принимаются за единицы измерения по соответствующей координатной оси.

Для каждой сингонии характерными являются углы между координатными осями (между Z и Y – α , между X и Z – β , между X и Y – γ) и масштабные

отрезки (единичные параметры) на координатных осях (на оси X отрезок a ; на Y – b ; на оси Z – c) (см. рис. 12). В табл. 2 приведены правила установки кристаллов в соответствии с их сингониями.

Учение о символах граней основывается на одном из важнейших законов кристаллографии – законе рациональности отношений параметров (закон Гаюи).

Закон Гаюи гласит: двойные отношения параметров, отсекаемых двумя любыми гранями кристалла на трех пересекающихся ребрах его, равны отношениям целых и сравнительно малых чисел. Для изображенного на рис. 13 кристалла эти соотношения составят:

$$\frac{OA_x}{OA_1} : \frac{OB_x}{OB_1} : \frac{OC_x}{OC_1} = p : q : r$$

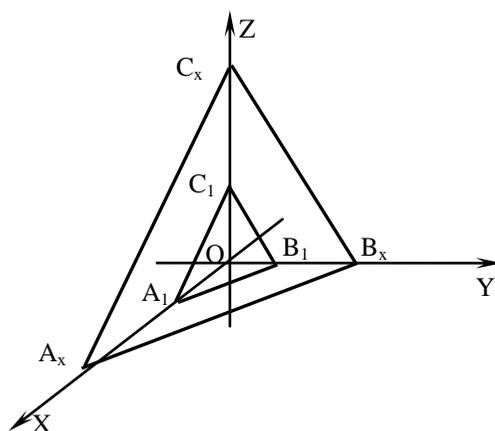


Рис. 13. Параметры граней кристалла и кристаллографические оси

Наличие целых чисел объясняется решетчатым строением кристаллов. Ребра кристалла соответствуют рядам кристаллической решетки, грани – плоским сеткам. Плоские сетки (грани), пересекая три ряда решетки (ребра), образуют на них отрезки (параметры), содержащие целые числа промежутков между узлами решетки (элементарными частицами).

Закон Гаюи связывает внешнюю форму кристаллов с их внутренним решетчатым строением. Для удобства математических преобразований пользуются обратными величинами отношений параметров, получивших название *индексов Миллера*:

$$\frac{OA_1}{OA_x} : \frac{OB_1}{OB_x} : \frac{OC_1}{OC_x} = \frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r} = h : k : l$$

Таблица 2

Установка кристалла

Сингония	Выбор координатных осей	Координатные углы и единичные параметры	Элементарная примитивная ячейка
Триклинная	За оси X, Y, Z принимают три ребра, которые пересекались бы под углами, более близкими к 90^0 . За вертикальную ось принимают ребро наиболее развитой зоны	$b \neq c \neq a \neq 90^0$ $a \neq b \neq c$	Комбинация трех пинакоидов – косугольный параллелепипед
Моноклинная	Ось Z – L_2 или $\perp P$; X и Y – два ребра, перпендикулярные оси Z; X – вперед наклонно вниз, Z – вертикально вдоль ребра наиболее развитой зоны	$b = c = 900$ $a \neq 1200$ $a \neq b \neq c$	Комбинация трех пинакоидов – прямоугольный параллелепипед
Ромбическая	X, Y – $2 L_2$ или нормали к $2P$, Z – L_2	$b = c = 90^0$ $a \neq b \neq c$	Комбинация трех пинакоидов – “кирпичик”
Тетрагональная	Z – L_4 ; X, Y – $2L_2$, или нормали к $2P$ (под 90^0) при их отсутствии – два перпендикулярных ребра под углом 90^0	$b = c = 90^0$ $a = b \neq c$	Тетрагональная призма с пинакоидом
Кубическая	X, Y, Z – $3L_4$ ($3L_{i4}$) – при их отсутствии – $3L_2$	$b = c = 90^0$ $a = b = c$	Октаэдр
Тригональная и гексагональная	Z – L_3 ; X, Y, U – $3L_2$ или нормали к $3P$. При их отсутствии – три перпендикулярных к оси Z ребра под углами 60^0 .	$b = c = 90^0$ $\gamma = 120^0$ $a = b \neq c$	Ромбоэдр
Гексагональная	Z – L_6 (L_{i6}); X, U, Z – $3L_2$ или нормали к $3P$	$b = c = 90^0$ $\gamma = 120^0$ $a = b \neq c$	Гексагональная призма с пинакоидом

Таким образом, любую грань в кристалле можно охарактеризовать тремя целыми и взаимно простыми числами (h, k, l) – индексами граней, представляющими отношение трех дробей, числители которых являются параметрами единичной грани (OA_1, OB_1, OC_1), а знаменатели соответствуют параметрам определяемой грани (OA_x, OB_x, OC_x).

После математических преобразований индексы как двойные параметры имеют вид небольших целых чисел. Но следует помнить, что чем больше параметр грани, то есть, чем больше отрезок отсекает грань на координатной оси, тем меньший индекс она имеет по данной оси.

Условные обозначения символов: грани – (hkl) , или $(hkil)$, где h – индекс по оси X, k – по оси Y, i – по оси U, l – по оси Z.

Для примера найдем индекс грани $A_x B_x C_x$. Параметры выражаем числом промежутков между элементарными частицами:

$$\frac{OA_1}{OA_x} : \frac{OB_1}{OB_x} : \frac{OC_1}{OC_x} = \frac{2}{4} : \frac{2}{3} : \frac{1}{2} = \frac{2 \cdot 3 : 2 \cdot 4 : 1 \cdot 12}{12} = 6 : 8 : 12 = 3 : 4 : 6$$

Индекс грани $A_x B_x C_x = (346)$ (читается три–четыре–шесть, а не триста сорок шесть).

Если грань пересекает какую-либо ось со стороны отрицательного значения (минуса), над индексом этой оси ставится знак минус ($h\bar{k}l$). Символ единичной грани всегда (III), независимо от того, какие отрезки, равные или неравные, отсекает она на координатных осях. Если грань, в том числе и единичная, параллельна одной или двум координатным осям, то индекс, соответствующий данным осям, равен нулю.

Каждое семейство плоскостей с индексами (hkl) характеризуется своим межплоскостным расстоянием d , т.е. расстоянием между двумя соседними параллельными плоскостями, которое измеряется в nm или ангстремах Å ($1\text{Å} = 0,1\text{ nm}$). Связь параметров элементарной ячейки (a, b, c и α, β, γ) и индексов граней выражается формулами в соответствии с сингонией кристалла.

Для кристаллов кубической сингонии (гранат, флюорит, пирит и др.) зависимость параметров выражается формулой

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Параметр элементарной ячейки будет равен:

$$a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Межплоскостное расстояние определится уравнением:

$$d = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Для тетрагональной сингонии (рутил, циркон, скаполит и др.):

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Для гексагональной сингонии (апатит, берилл):

$$\frac{1}{d^2} = \frac{3}{4} \frac{h^2 + hk + l^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Для тригональной сингонии (кварц, корунд, кальцит, гематит и др.):

$$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)\sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha)}$$

Для ромбической сингонии (оливин, анортит, кордиерит, андалузит и др.):

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}.$$

Для моноклинной сингонии (диопсид, роговая обманка, гипс и др.):

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} - \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}.$$

Для триклинной сингонии (плагиоклаз, родонит, кианит и др.):

$$\frac{1}{d^2} = \frac{\frac{h^2}{a^2} \sin^2 \alpha + \frac{k^2}{b^2} \sin^2 \beta + \frac{l^2}{c^2} \sin^2 \gamma + \frac{2hk}{ab} (\cos \alpha - \cos \beta - \cos \gamma) + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{2lh}{ca} (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)}{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$$

2. Порядок выполнения работы

Определить сингонию кристалла, произвести его установку относительно кристаллографических осей в соответствии с правилами, выполнить чертеж фигуры с нанесением кристаллографических осей. Записать название фигуры, определить формулу симметрии, указать вид и класс симметрии, сингонию и категорию кристалла.

Выбрав единичную грань в кристалле, произвести определение индексов всех граней (индексов Миллера) для исследуемого кристалла.

Контрольные вопросы

1. Что такое кристаллографическая система координат? В чем ее логика? Как располагаются и обозначаются кристаллографические оси?
2. Как обозначаются углы между осями?
3. Как определять символы плоскостей кристаллической решетки?
4. Дать определение закона рациональных отношений.
5. Что такое символ грани?
6. Как обозначаются символы граней простых форм?
7. Сколько координатных систем используется для описания кристаллов?
8. Чем отличается установка кристаллов в кубической и гексагональной сингониях?
9. Назовите символ грани на примере гексаэдра.