

Федеральное агентство по образованию
АМУРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ГОУВПО «АмГУ»

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой ГиП

_____ А. И. Дементиенко

«_____» _____ 200__ г.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, МИНЕРАЛОГИЯ

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС ПО ДИСЦИПЛИНЕ

для специальности 130301 -

«Геологическая съемка, поиски и разведка полезных ископаемых»

Составитель: Е. С. Астапова

Благовещенск

2007 г.

Печатается по решению
редакционно-издательского совета
инженерно-физического факультета
Амурского государственного
университета

Е. С. Астапова

Учебно-методический комплекс дисциплины «Кристаллография, минералогия» для студентов очной формы обучения специальности 130301 «Геологическая съемка, поиски и разведка полезных ископаемых. Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2007. – 124 с.

Учебно-методические рекомендации ориентированы на оказание помощи студентам очной формы обучения по специальности 130301 «Геологическая съемка, поиски и разведка полезных ископаемых».

Рецензент:

Мельников В. Д., профессор кафедры геологии АмГУ, доктор геолого-минералогических наук, профессор

Федеральное агентство по образованию РФ
Амурский государственный университет

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УНР
Е.С. Астапова

_____ подпись, И.О.Ф

«__» _____ 200__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

по дисциплине ***Кристаллография, минералогия***

для специальности ***130301 «Геологическая съемка, поиски и разведка полезных ископаемых»***

Курс 2 Семестры 3, 4

Лекции 50 (час.) Зачет - 3 семестр

Лабораторные работы 68 (час.) Экзамен – 4 семестр

Самостоятельная работа 117 (час.)

Всего часов – 235 (час.)

Составитель д.ф.-м.н., проф. Е. С. Астапова
Факультет ***инженерно - физический***

Кафедра ***геологии***

2007 г.

Рабочая программа составлена на основании ГОС.
Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры геологии
«__» _____ 200__ г., протокол № _____

Заведующий кафедрой _____ к.г.-м.н. Дементиев А. И.

Рабочая программа одобрена на заседании УМС _____
(наименование специальности)

«__» _____ 200__ г., протокол № _____

Председатель _____
(подпись, И.О.Ф.)

Рабочая программа переутверждена на заседании кафедры от _____
протокол № _____ .

Зав.кафедрой _____
подпись _____ Ф.И.О. _____

СОГЛАСОВАНО
Начальник УМУ

(подпись, И.О.Ф.)

«__» _____ 200__ г.

СОГЛАСОВАНО
Председатель УМС факультета

(подпись, И.О.Ф.)

«__» _____ 200__ г.

СОГЛАСОВАНО
Заведующий выпускающей
кафедрой

(подпись, И.О.Ф.)

«__» _____ 200__ г.

ВВЕДЕНИЕ

Занятия по дисциплине «Кристаллография, минералогия» ведутся в соответствии с рабочей программой, составленной на основании государственного образовательного стандарта и авторских разработок. На освоение дисциплины отводится 235 часов, из них: 50 часов лекций, 68 часов лабораторных работ, 117 часов самостоятельной работы студентов. Дисциплину изучают студенты 2 курса, в третьем семестре по данной дисциплине сдается зачет, в четвертом семестре - экзамен.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель курса – изучение теоретических основ кристаллографии и минералогии с использованием лабораторных занятий, раскрытие связи между структурой и свойствами минералов.

Программа составлена на основании государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования цикла (Дисциплины специализации СД.02) и авторских разработок.

Преподавание курса связано с другими курсами государственного образовательного стандарта: математика, физика, химия, введение в специальность, общая геология. и др.

По завершению обучения дисциплиной студент должен:

знать

- основные понятия кристаллографии и минералогии,
- основы геометрической кристаллографии, микрокристаллографии, теории симметрии, кристаллооптики, кристаллохимии, генетической кристаллографии, росту и морфологии кристаллов,
- основные законы внутреннего строения кристаллов, главнейшие типы кристаллических структур и их связь с химическим составом веществ и кристаллохимическими особенностями их элементов;
- физические свойства кристаллов и их зависимость от внутренней структуры вещества;
- химический состав, структура, формы выделения,
- физические свойства, генетические признаки самородных элементов, сульфидов, окислов и гидроокислов, силикатов, солей, кислородных кислот и галогенидов; генезис и парагенезис;
- парагенетические ассоциации минералов и их генетические признаки при разных условиях образования.

уметь

- определять минерал по характерным признакам,

- уметь решать кристаллографические задачи, строить сферические, стереографические, гномонические, гномостереографические проекции кристаллов,
- грамотно описывать внешнюю форму и внутреннее строение кристаллов, используя знания по точечной и пространственной симметрии, необходимые для правильной интерпретации результатов самостоятельной научной деятельности и понимания специальной литературы,
- описывать структуру и свойства минералов различных классов и групп и генетические признаки при разных условиях образования.

При определении оценки знаний студентов во время зачета преподаватели руководствуются следующими критериями:

Критерии оценки при сдаче зачета

К сдаче зачета допускаются студенты, посетившие лекционные занятия данного курса и выполнившие все лабораторные работы. При наличии пропусков темы пропущенных занятий должны быть отработаны. Программные вопросы к зачету доводятся до сведения студентов за месяц до зачета.

При определении итоговой оценки знаний студента учитывается активность и текущая успеваемость студента в течение семестра по данному предмету.

Оценка «зачет» - ставится при 70 - 100 % правильных ответах на зачете и наличии выполненных заданий.

Безупречным считается ответ, в котором правильно, ясно и подробно изложен теоретический материал по теоретическим вопросам и правильно (без единой погрешности) решены задачи с необходимыми пояснениями. Студент получает зачет при следующих соотношениях выполнения заданий билета:

при безупречном выполнении заданий билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы и решении задач с небольшими недочетами (погрешностями);

при спорности выставления зачета беседа ведется по конспекту лекций.

В остальных случаях задание считается невыполненным и зачет не выставляется.

Критерии оценки при сдаче экзамена

К сдаче экзамена допускаются студенты, посетившие лекционные занятия данного курса и выполнившие все лабораторные работы. При наличии пропусков темы пропущенных занятий должны быть отработаны. Программные вопросы к экзамену доводятся до сведения студентов за месяц до экзамена.

При определении итоговой оценки знаний студента учитывается активность и текущая успеваемость студента в течение семестра по данному предмету.

Безупречным считается ответ, в котором правильно, ясно и подробно изложен теоретический материал по теоретическим вопросам и правильно (без единой погрешности) выполнены практические задания с необходимыми пояснениями.

Ответ оценивается на «отлично»

при безупречном выполнении заданий билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы и выполнении практических заданий.

Ответ оценивается на «хорошо»

при полном выполнении заданий билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы и выполнении практических заданий с незначительными неточностями, исправленными в устной беседе.

Ответ оценивается на «удовлетворительно»

при выполнении заданий билета, при кратких пояснениях каждого пункта билета;

при правильных ответах на теоретические вопросы и выполнении практических заданий с неточностями;

Ответ оценивается на «неудовлетворительно»

при невыполнении заданий билета

или при кратких пояснениях каждого пункта билета со значительными ошибками;

при правильных ответах на теоретические вопросы и невыполнении практических заданий;

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС (3 семестр, 18 часов)

1. Предмет кристаллографии. Основные понятия. Макроскопические признаки кристаллических веществ: однородность, анизотропия, огранка, симметрия. Исторические сведения. Работы И. Кеплера, В. Дависсона. Основание кристаллографии как науки. Работы Н. Стенона, М. Ломоносова, Роме де Лиля. Закон постоянства углов. Геометрическая кристаллография. Опыты Э. Бартолина. Открытие эффекта дупреломления. Кристаллооптика. Кристаллофизика. Х. Гюйгенс. Рене Ж. Гаюи. Закон рациональности отношений параметров. И. Гессель. Х. С. Вейс. Закон поясов. Зональная кристаллография. О. Браве. 14 типов ячеек, 32 группы симметрии. Теория симметрии. А. Гадолин. Вывод 32 кристаллографических групп. Геометрическая макрокристаллография. Е. Федоров, А. Шенфлис. 230 пространственных групп симметрии. Геометрическая микрокристаллография. В.

Рентген. Открытие рентгеновских лучей. М. Лауэ. Явление дифракции рентгеновских лучей. У. Брегг, Г. Вульф. Метод рентгеноструктурного анализа. Нобелевские премии 1901, 1914, 1915 гг. Н. В. Белов. Теория плотнейшей упаковки. Кристаллохимия. Периоды зарождения и развития кристаллографии: предыстория (до конца XVII в.), становление кристаллографии как науки (конец XVII в.– начало XIX в.), развитие классической кристаллографии (начало XIX в. – начало XX в.), современный период (с начала XX в.). Труды ак. РАН Н.В.Белова. Основные законы внутреннего строения кристаллов. *(2 часа).*

2. Симметрия. Операции и элементы симметрии конечных фигур. Элементы симметрии I и II рода, конгруэнтно равные и энантиоморфные фигуры. Поворотные оси симметрии, элементарный угол поворота, порядок оси. Основной закон симметрии – отсутствие осей 5-го и выше 6-го порядков. Обозначение элементов симметрии в символике Бравэ. Неэквивалентные и эквивалентные одноименные элементы симметрии в символике Бравэ. Зеркальная плоскость симметрии. Центр инверсии (центр симметрии). Зеркальные и инверсионные оси симметрии. Правила взаимодействия операций симметрии и их использование при выводе 32 кристаллографических точечных групп. Осевая теорема Эйлера. Математическая справка из теории групп. Понятие группы. Групповые аксиомы. Взаимодействие элементов симметрии – групповое умножение. Точечная группа симметрии – совокупность операций симметрии (на примере группы L_33L_2).

(2 часа).

3. Главнейшие типы кристаллических структур и их связь с химическим составом веществ и кристаллохимическими особенностями их элементов. Методы проектирования кристаллов: сферические, стереографические, гномонические, гномостереографические проекции. Закон постоянства углов (закон Н.Стенона) – основа гониометрии. *(2 часа).*

4. Символика точечных групп симметрии Бравэ, Шенфлиса, Германа-Могена. Вывод 32 точечных групп симметрии в обозначениях по Шенфлису. Группы с единичными направлениями. Группы без единичных направлений. Группы с единственной поворотной осью C_n , C_{nv} , C_{nh} . Группа с плоскостью безразличной ориентации C_s . Группы с побочными осями D_n , D_{nh} , D_{nd} , обоснование невозможности существования групп D_{nv} . Группы со сложными (зеркальными, инверсионными) осями симметрии S_n . *(2 часа).*

5. Вывод точечных групп симметрии без единичных направлений. Группы T , O , T_d , T_h , O_h . Два способа вывода групп без единичных направлений. *(1 час).*

6. Понятие категории, сингонии в кристаллографии. Обозначения групп в различных номенклатурах: примитивные, центральные, планальные, аксиальные, планаксиальные, инверсионно-примитивные, инверсионно-планальные группы. Элементарная ячейка (ячейка Бравэ). 14 типов ячеек Бравэ. **(1 час).**
7. Символы граней и ребер кристаллов. Основные законы геометрической кристаллографии. Индексы Вейса и Миллера. Индицирование. Закон Гаюи – закон рациональности отношений параметров. Четвертая ось в гексагональной кристаллографической системе координат. Понятие «единичная грань», ее выбор в кристаллах разных сингоний. Символы ребер кристалла. Уравнение плоскости в кристаллографическом варианте. Связь между символами граней и ребер. Закон Вейса - закон зон. **(2 часа).**
8. Морфология кристаллов. Морфологические особенности кристаллических многогранников. Понятие «простая форма кристаллов». Вывод простых форм кристаллов в группах разных сингоний. Классификация точечных групп симметрии по виду простых форм.. **(2 часа).**
9. 230 пространственных групп. Трансляционные элементы симметрии. Специфические для бесконечной кристаллической структуры элементы симметрии: плоскость скользящего отражения g и винтовые оси n_s . Плоскости скользящего отражения **$g: a, b, c$** . Клиноплоскости **n и d** . Винтовые оси **n_s** . **(1 час).**
10. Предмет кристаллофизики. Главная задача. Предельные группы симметрии – группы Кюри. Основной принцип симметрии в кристаллофизике. Принцип Кюри. Принцип Неймана. Физические свойства кристаллов, их зависимость от внутренней структуры вещества. **(2 часа).**
- 11. Главнейшие особенности роста кристаллов в лабораториях, заводских и природных условиях. (1 час).**

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ (3 семестр, 36 час.)

1. Определение возможных элементов симметрии по внешней форме кристаллов минералов. Элементы симметрии I и II рода. Правила взаимодействия элементов симметрии. **(2 часа).**
2. Проектирования кристаллов: сферические, стереографические, гномонические, гномостереографические проекции. Сетка Вульфа. Координаты φ, ρ . **(2 часа).**

3. Индицирование кристалла. Символы граней и ребер кристаллов. Индексы Вейса и Миллера. Связь между символами граней и ребер. Графический метод определения граней и ребер кристалла - метод развития зон. (2 часа).
4. Преобразование координатных осей. Зависимость между старой (XYZ) и новой (X'Y'Z') координатными системами, между старыми (hkl), [rst] и новыми (HKL), [RST] символами граней и ребер. Преобразование индексов граней кристалла. узловых сеток. Преобразование индексов ребер кристалла. Вычисление матриц преобразования осей при различных заданиях координатных систем. (2 часа).
5. Графические методы индицирования граней кристаллов и определение констант. Метод развития зон. Определение позиции грани методом развития зон. Определение символов граней кристалла методом развития зон. (2 часа).
6. Метод косинусов Вульфа. Определение выходов координатных осей триклинного кристалла и символов его граней методом косинусов Вульфа. (2 часа).
7. Определение геометрических констант кристалла. (2 часа).
8. Определение позиций основных граней кристалла по его элементам. Построение проекций координатных граней. Определение положения единичной грани. (2 часа).
9. Преобразование координатного репера от четырехосной установки гексагонального кристалла к установке Миллера. (2 часа).
10. Вывод симморфных пространственных групп ***Pmmm, Cmmm, Immm, Fmmm*** из точечной группы ***mmm***. (2 часа).
11. Вывод несимморфных пространственных групп способом последовательной замены порождающих макроэлементов симметрии на микроэлементы. Вывод групп ***Pmta, Pbat, Pbsa, ...*** из группы ***Pmmm***; групп ***Cmta, Cmta, Cssa*** из группы ***Cmmm***. (2 часа).
12. Вывод пространственных групп, подчиненных точечной группе ***mm2 (C_{2v})***. (2 часа).
13. Пространственные группы с примитивной, базоцентрированной, объемноцентрированной решетками Бравэ. Приемы вывода пространственных групп, подчиненных точечным группам ***mmm (D_{2h}), 222 (D)***. (2 часа).
14. Построение графиков пространственных групп. (2 часа).
15. Вывод простых форм в группах с единичным направлением: а) с одним особым направлением в группах ***C_n, C_{nh}, S_{2n}***, б) с особым направлением 2 или $\bar{2}$,

перпендикулярным главному единичному направлению в группах C_{nv} , D_n , D_{nv} , D_{nd} .
(2 часа).

16. Вывод простых форм в группах без единичных направлений. Простые формы $\{hkl\}$ – производные гексаэдра.. Простые формы $\{hhl\}$ ($h>l$)– производные октаэдра (тетраэдра). Простые формы $\{hll\}$ ($h>l$)– производные октаэдра (тетраэдра) и гексаэдра. Общие простые формы кубической сингонии для групп $m\bar{3}m$, $\bar{4}3m$, $m\bar{3}$, 432 , 23 .
(2 часа).

17. Физические свойства кристаллов, описываемые тензорами первого, второго, третьего рангов.
(2 часа).

18. Напряжения и деформации в кристаллах. Упругие свойства кристаллов. (2 часа).

ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС (4 семестр, 32 часа)

1. Предмет минералогии. Основные понятия. Основы минералогической систематики. Принципы описания минералов: химический состав, структура, формы выделения, физические свойства, генетические признаки минералов, генезис и парагенезис, парагенетические ассоциации минералов и их генетические признаки при разных условиях образования. Тип I. Простые вещества. Класс самородных металлов и полуметаллов. Группа меди (Cu, Ag, Au). Группа платины-осьмия. Группа железа-никеля. Группа мышьяка (мышьяк, висмут, сурьма).
(2 часа).
2. Класс неметаллов. Группа серы. Группа графита-алмаза. Тип II: сульфиды (с селенидами, теллуридами, арсенидами). Класс 1: собственно сульфиды (с селенидами). Подкласс 1: Низшие сульфиды (моносulfиды). Отдел А: отдел минералов с координационной структурой. Группа акантита. Группа халькозина. Группа борнита. Группа сфалерита-вюрцита. Группа халькопирита (халькопирит, станин).
(2 часа).
3. Группа галенита. Группа киновари-метациннабарита. Группа пирротина (троилит, пирротин). Группа пентландита. Отдел Б: низшие сульфиды с цепочечной структурой. Группа антимонита (антимонит, висмутин, хоробетсуит, селенистый висмутин). Отдел В: сульфиды со структурой иного типа. Группа реальгара (реальгар As_4S_4). Группа аурипигмента (аурипигмент As_2S_3). Группа ковеллина (ковеллин CuS). Группа молибденита (MoS_2). Подкласс 2: высшие сульфиды (персульфиды). Группа пирита-марказита (пирит FeS_2 кубич., марказит FeS_2 ромбич.). Группа кобальтина – арсенопирита. Кобальтин $CoAsS$. Арсенопирит $FeAsS$.
(2 часа).
4. Подкласс 3: Сульфосоли. Отдел А: островные сульфосоли. Группа прустита Прустит Ag_3AsS_3 . Пираргирит Ag_3SbS_3 . Группа энаргита. Энаргит Cu_3AsS_4 . Отдел Б: цепочечные и ленточные сульфосоли. Группа буланжерита – джемсонита. Буланжерит $Pb_5Sb_4S_{11}$.

Джемсонит $\text{FePb}_4\text{Sb}_6\text{S}_{14}$. Отдел В: каркасные сульфосоли. Группа блеклых руд. Теннантит $\text{Cu}_{12}\text{As}_4\text{S}_{13}$. Тетраэдрит $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$. Класс 2: теллуриды. Группа алтаита. Алтаит PbTe . Группа тетрадимита. Тетрадимит $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{S}$. Группа сильванита. Сильванит AuAgTe_4 . Класс 3: арсениды. Подкласс 1: низшие арсениды (моноарсениды). Группа никелина. Никелин NiAs . Подкласс 2: высшие арсениды (перарсениды). Группа леллинита. Леллингит FeAs_2 . Саффорит $(\text{Co,Fe})\text{As}_2$. Раммельсбергит NiAs_2 . Группа скуттерудита. Скуттерудит CoAs_3 . Шмальтин $(\text{Co,Ni,Fe})\text{As}_{3\pm x}$. Хлоантит NiAs_3 .

(2 часа).

5. Тип III. Оксиды и гидроксиды. Класс 1: Оксиды. Подкласс 1: простые оксиды. Отдел А: минералы с координационной структурой. Подотдел 1: изометрические минералы. Группа уранинита. Уранинит, настуран $U_m^{4+}U_n^{6+}O_{2m+3n}$. Подотдел 2. Субцепочечные минералы. Группа рутила. Рутит TiO_2 . Касситерит SnO_2 . Пирролюзит MnO_2 . Подотдел 3. Субслоистые минералы. Группа корунда. Корунд Al_2O_3 . Гематит Fe_2O_3 . Отдел Б: минералы с каркасной структурой. Группа куприта. Куприт Cu_2O . Семейство кремнезема: полиморфные модификации, высоко- и низкотемпературные модификации. Кварц. Тридимит. Крестобалит. Лешательерит. Опал. Халцедон. Законы двойникования кварца, дофинейские двойники, бразильские двойники, японские двойники. Изоморфные примеси в кварце, горный хрусталь, морион, цитрин, аметист, празем. **(2 часа).**

6. Подкласс 2: сложные оксиды. Надотдел 1: алюминаты. Группа шпинели. Шпинель MgAl_2O_4 . Магнетит FeFe_2O_4 . Хромит FeCr_2O_4 . Надотдел 2: титанаты с координационной структурой. Группа ильменита. Ильменит FeTiO_3 . Отдел Б: титанаты с каркасной структурой. Группа перовскита. Перовскит CaTiO_3 . Лопарит $(\text{Ce,Na,Ca})(\text{Nb,Ti})\text{O}_3$. Надотдел 3: Тантало-ниобаты. Отдел А: тантало-ниобаты с субслоистой структурой. Группа колумбита. Колумбит $(\text{Fe,Mn})(\text{Nb,Ta})_2\text{O}_6$. Танталит $(\text{Fe,Mn})(\text{Ta,Nb})_2\text{O}_6$. Группа самарскита. Самарскит $(\text{Y,U})(\text{Nb,Fe}^{3+})_2\text{O}_6$. Группа эвксенита. Эвксенит YTiNbO_6 . Ферсмит CaNb_2O_6 . Отдел Б: Тантало-ниобаты с субкаркасной структурой. Группа эшинита. Эшинит CeTiNbO_6 . Группа пирохлора $\text{NaCaNb}_2\text{O}_6\text{F}$. **(2 часа).**

7. Класс 2: гидроксиды. Семейство гидроксидов Fe, Al, Mn. Группа манганита. Манганит MnOOH . Группа псиломелана. Псиломелан $(\text{Ba,Mn}^{2+},\dots)_3(\text{O,OH})_6\text{Mn}_8^{4+}\text{O}_{16}$. Группа гетита-лепидокрокита. Гетит $\alpha\text{-FeOOH}$. Диаспор $\alpha\text{-AlOOH}$. Лепидокрокит $\gamma\text{-FeOOH}$. Бемит $\gamma\text{-AlOOH}$. Группа гиббсита. Гиббсит $\alpha\text{-Al(OH)}_3$. Группа брусита. Брусит Mg(OH)_2 . Группа сассолина. Сассолин B(OH)_3 . **(2 часа).**

8. Тип IV. Соли кислородных кислот. Класс 1: Силикаты. Кристаллохимические особенности силикатов. Типы структурных мотивов. Подкласс 1. Собственно силикаты.

Отдел А: Ортосиликаты (с изолированными SiO_4 -тетраэдрами). Подотдел 1. Субслоистые ортосиликаты. Группа кианита-силлиманита. Кианит $\text{Al}_2^{\text{VI}}[\text{SiO}_4]\text{O}$. Андалузит $\text{Al}^{\text{VI}}\text{Al}^{\text{V}}[\text{SiO}_4]\text{O}$. Силлиманит $\text{Al}^{\text{VI}}[\text{AlSiO}_5]$. Группа ставролита. Ставролит $2\text{Al}_2[\text{SiO}_4]\text{O} \cdot \text{Fe}(\text{OH})_2$. Группа хлоритоида. Хлоритоид $(\text{Fe}^{2+}, \text{Mg})_2(\text{Al}, \text{Fe}^{3+})\text{Al}_3[\text{SiO}_4]_2\text{O}_2(\text{OH})_4$. Группа оливина. Форстерит $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$. Оливин $(\text{Mg}, \text{Fe})_2[\text{SiO}_4]$. Фаялит $\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$. Кнебелит $(\text{Mn}, \text{Fe})_2[\text{SiO}_4]$. Тефроит $\text{Mn}_2[\text{SiO}_4]$. Группа монтчеллита. Монтчеллит $\text{CaMg}[\text{SiO}_4]$. Группа гумита. Хондродит $2\text{Mg}_2[\text{SiO}_4] \cdot \text{Mg}(\text{F}, \text{OH})_2$. Гумит $3\text{Mg}_2[\text{SiO}_4] \cdot \text{Mg}(\text{F}, \text{OH})_2$. Клиногумит $4\text{Mg}_2[\text{SiO}_4] \cdot \text{Mg}(\text{OH}, \text{F})_2$. Подотдел 2: субкаркасные ортосиликаты. Группа гранатов. Пироп $\text{Mg}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$. Альмандин $\text{Fe}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$. Спессартин $\text{Mn}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$. Гроссуляр $\text{Ca}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$. Андрадит $\text{Ca}_3\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]_3$. Уваровит $\text{Ca}_3\text{Cr}_2[\text{SiO}_4]_3$. Отдел Б: орто-диортосиликаты (с изолированными тетраэдрами SiO_4 и Si_2O_7 -группами). Группа эпидота-цоизита. Цоизит $\text{Ca}_2\text{Al}_3[\text{SiO}_4][\text{Si}_2\text{O}_7]\text{O}(\text{OH})$. Клиноцоизит $\text{Ca}_2\text{Al}_3[\text{SiO}_4][\text{Si}_2\text{O}_7]\text{O}(\text{OH})$. Эпидот $\text{Ca}_2\text{FeAl}_2[\text{SiO}_4][\text{Si}_2\text{O}_7]\text{O}(\text{OH})$. Ортит $\text{Ce}_2\text{Fe}_2\text{Al}[\text{SiO}_4][\text{Si}_2\text{O}_7]\text{O}(\text{OH})$. Группа везувиана. Везувиан $\text{Ca}_{10}(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_2\text{Al}_4[\text{SiO}_4]_5[\text{Si}_2\text{O}_7]_2(\text{OH}, \text{F})_4$. (2 часа).

9. Отдел Г: цепочечные силикаты (метасиликаты). Семейство пироксенов. Группа ромбических пироксенов (ортопироксены). Энстатит $\text{Mg}_2[\text{Si}_2\text{O}_6]$. Ферросилит $\text{Fe}_2[\text{Si}_2\text{O}_6]$. Группа моноклинных пироксенов (клинопироксены). Кальциевые клинопироксены: диопсид $\text{CaMg}[\text{Si}_2\text{O}_6]$, геденбергит $\text{CaFe}[\text{Si}_2\text{O}_6]$, авгит $(\text{Ca}, \text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Ti}, \text{Al})_2[(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_6]$. Натриевые клинопироксены: эгирин $\text{NaFe}[\text{Si}_2\text{O}_6]$, жадеит $\text{NaAl}[\text{Si}_2\text{O}_6]$. Литиевые клинопироксены: сподумен $\text{LiAl}[\text{Si}_2\text{O}_6]$. Семейство пироксеноидов. Группа волластонита. Волластонит $\text{Ca}_3[\text{Si}_3\text{O}_9]$. Группа родонита. Родонит $\text{CaMn}_4[\text{Si}_5\text{O}_{15}]$. Отдел Д: ленточные силикаты. Семейство амфиболов. Группа антофиллита-куммингтонита ($\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}$ - амфиболы). Подгруппа антофиллита. Антофиллит $(\text{Mg}, \text{Fe}^{2+})_7[\text{Si}_4\text{O}_{11}]_2(\text{OH}, \text{F})_2$. Группа тремолита (Ca - амфиболы). Тремолит $\text{Ca}_2\text{Mg}_5[\text{Si}_4\text{O}_{11}]_2(\text{OH}, \text{F})_2$. Актинолит

$Ca_2(Mg, Fe^{2+})_5[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Группа роговой обманки (Ca - Na - амфиболы).
 Роговая обманка $(Ca, Na, K)_{2-3}(Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Al)_5[Si_3(Al, Si)O_{11}]_2(OH, F, Cl)_2$.
 Арфведсонит $NaCa_{0,5}Na_{1,5}(Fe^{2+}, Mg, Fe^{3+}, Al)_5[Al_{0,5}Si_{7,5}O_{22}] \times (OH, F)_2$. Группа глаукофана (Na-амфиболы). Глаукофан $Na_2Mg_3Al_2[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Рибекит $Na_2Fe_3^{2+}Fe_2^{3+}[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. (2 часа).

10. Отдел Е: слоистые силикаты. Подотдел 1: минералы со слоями из амфиболовых лент SiO_4 - тетраэдров. Группа талька. Тальк $Mg_3[Si_4O_{10}](OH)_2$. Пирофиллит $Al_2[Si_4O_{10}](OH)_2$. Группа серпентинов. Антигорит $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Лizardит $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Хризотил $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Семейство хлоритов. Семейство монтмориллонита-каолинита. Группа монтмориллонита. Группа каолинита. Группа галлуазита. Группа аллофана. Группа сапонита.

(2 часа).

11. Подкласс 2: алюмосиликаты. Отдел А: слоистые алюмосиликаты. Подотдел 1. минералы со слоями из амфиболовых лент SiO_4 и AlO_4 - тетраэдров. Семейство слюд. Диоктаэдрические и триоктаэдрические слюды. Группа мусковита. Подгруппа мусковита. Мусковит $KAl_2[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Парагонит $NaAl_2[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Подгруппа флогопита. Флогопит $KMg_3[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Биотит $K(Mg, Fe)_3[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Подгруппа лепидолита. Лепидолит $KLi_{1,5}Al_{1,5}[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Циннвальдит $KLi_{1,5}(Al, Fe)_{1,5}[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Группа Маргарита. Маргарит $CaAl_2[Al_2Si_2O_{10}](OH, F)_2$. Группа глауконита. Глауконит $K(Fe^{3+}, Al, Fe^{2+}, Mg)_2[AlSi_3O_{10}](OH)_2$. Группа гидрослюд. Гидромусковит $K_{1-x}(H_2O)_x\{Al_2[AlSi_3O_{10}](OH)_{2-x}(H_2O)_x\}$. Группа вермикулита. Вермикулит $Mg_x(H_2O)_4\{Mg_{3-x}[AlSi_3O_{10}](OH)_2\}$. Подотдел 2: алюмосиликаты со слоями иного типа. Группа пренита. Пренит $Ca_2Al[AlSi_3O_{10}](OH)_2$. Отдел Б: каркасные алюмосиликаты. Группа петалита. Петалит $Li[AlSi_4O_{10}]$. Группа кордиерита. Кордиерит $(Mg, Fe)_2[Al_4Si_5O_{18}]$. Семейство полевых шпатов. Группа калиевых полевых шпатов. Микроклин $K[AlSi_3O_8]$. Ортоклаз $K[AlSi_3O_8]$. Санидин $(K, Na)[AlSi_3O_8]$. (2 часа).

12. Группа натрия – кальциевых полевых шпатов (плаггиоклазов). Альбит $Na[AlSi_3O_8]$ (Ab). Олигоклаз An_{10-30} . Андезин An_{30-50} . Лабрадор An_{50-70} . Битовнит An_{70-90} . Анортит $Ca[Al_2Si_2O_8]$ (An). Группа бариевых полевых шпатов. Цельзиан $Ba[Al_2Si_2O_8]$. Гиалофан $K_{1-x}Ba_{x/2}[Al_{1+x}Si_{3-x}O_8]$. Семейство фельдшпатов. Группа скаполита. Мариалит $3Na[AlSi_3O_8] \cdot NaCl$ (Me₀₋₂₅). Дипир Me_{25-50} . Мицзонит Me_{50-75} . Мейонит $3Ca[Al_2Si_2O_8] \cdot CaCO_3$ (Me₇₅₋₁₀₀). Группа нефелина. Нефелин $KNa_3[AlSiO_4]_4$. Кальсилит $K[AlSiO_4]$. Карнегиит $Na[AlSiO_4]$. Группа содалита. Содалит $6Na[AlSiO_4] \cdot 2NaCl$. Нозеан $6Na[AlSiO_4] \cdot 2Na_2SO_4$. Гаюин $6(Na, \frac{1}{2}Ca)[AlSiO_4] \cdot 2 - 1(Na_2, Ca)SO_4$. Лазурит $6Na[AlSiO_4] \cdot 2Ca(SO_4, S, Cl_2)$. Группа канкринита. Канкринит $6Na[AlSiO_4] \cdot CaCO_3 \cdot 2H_2O$. Вишневит $6(Na, K)[AlSiO_4] \cdot CaSO_4 \cdot 1 - 5H_2O$. Группа лейцита. Лейцит $K[AlSi_2O_6]$. Семейство цеолитов. Особенности основного структурного мотива. Группа натролита. Натролит $Na_2[Al_2Si_3O_{10}] \cdot 2H_2O$. Томсонит $NaCa_2[Al_2Si_2O_8]_{2,5} \cdot 6H_2O$. **(2 часа).**
13. Группа ломонтита. Ломонтит $Ca[AlSi_2O_6]_2 \cdot 4H_2O$. Группа анальцима. Анальцим $Na[AlSi_2O_6] \cdot H_2O$. Поллуцит $(Ca_{1-x}, Na_x)[AlSi_2O_6] \cdot xH_2O$. Вайкарит $Ca[AlSi_2O_6]_2 \cdot 2H_2O$. Группа филлипсита. Филлипсит $KCa[AlSi_2O_6]_3 \cdot 6,75H_2O$. Гармотом $Ba_2(K, Na)[AlSi_2O_6]_5 \cdot 11,25H_2O$. Группа хабазита. Хабазит $(Na_2, Ca)[AlSi_2O_6]_2 \cdot 6H_2O$. Группа стильбита. Стильбит $Ca[AlSi_3O_8]_2 \cdot 6,25H_2O$. Гейландит $Ca[AlSi_3O_8]_2 \cdot 5,35H_2O$. Группа морденита. Морденит $(Ca, Na_2, K_2)[AlSi_5O_{12}]_2 \cdot 7H_2O$. Подкласс 3: боро- и боратосиликаты. Отдел А: минералы с кольцевой структурой. Группа турмалина. Дравит $NaMg_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Шерлит (шерл) $(Na, Ca)Fe_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Эльбаит $Na(Li, Al)_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Тсилазит $NaMn_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Отдел Б: минералы сослоистой структурой. Группа датолита. Датолит $Ca\{B[SiO_4]OH\}$. Отдел В: минералы с каркасной структурой. Группа данбурита. Данбурит $Ca[B_2Si_2O_8]$. Подкласс 4: бериллосиликаты. Подотдел 1:

субцепочечные бериллосиликаты. Группа фенакита. Фенакит $\{Be_2[SiO_4]\}$. Подотдел 2: субкольцевые бериллосиликаты. Группа берилла. Берилл $Al_2\{Be_3[Si_6O_{18}]\}$. Подотдел 3: изометрические бериллосиликаты. Группа гельвина. Гельвин $3Mn[BeSiO_4] \cdot MnS$. Даналит $3Fe[BeSiO_4] \cdot FeS$. Гентгельвин $3Zn[BeSiO_4] \cdot ZnS$.

(2 часа).

14. Подкласс 5: титано- и цирконосиликаты. Отдел А. Субцепочечные минералы. Группа циркона. Циркон $\{Zr[SiO_4]\}$. Группа титанита. Титанит $Ca\{Ti[SiO_4]O\}$. Отдел Б: субслоистые титано- и цирконосиликаты. Группа эвдиалита. Эвдиалит $(Na, Ca)_9(Zr, Fe)_3[Si_3O_9][Si_9O_{24}(OH)_3]$. Группа лампрофиллита. Лампрофиллит $Sr\langle Na_3Ti\{Ti_2[Si_2O_7]_2O_2F\}\rangle$. Группа астрофиллита. Астрофиллит $(K, Na)_3\langle (Mn, Fe)_7\{Ti_2[Si_4O_{12}]_2(OH)_5\}\rangle$. Подкласс 6: галогенидосиликаты. Отдел Ф: субкоординационные галогенидосиликаты. Группа зунита. Зунит $Al_{12}(OH, F)_{18}[AlO_4][Si_5O_{20}]Cl$. Отдел Б: субслоистые галогенидосиликаты. Группа топаза. Топаз $Al_2[SiO_4](F, OH)_2$. Группа апофиллита. Апофиллит $KCa_4[Si_4O_{10}]_2F \cdot 8H_2O$. Класс 2: бораты. Отдел А: островные бораты. Группа людвигита. Людвигит $(Mg, Fe)_2Fe[BO_3]O_2$. Группа ашарита. Ашарит $Mg_2[B_2O_4OH]OH$. Группа буры. Бура $Na_2[B_4O_5(OH)_4] \cdot 8H_2O$. Группа иньойта. Иньойт $Ca[B_3O_3(OH)_5] \cdot 4H_2O$. Отдел Б: бораты с цепочечной структурой. Группа гидроборачита. Гидроборачит $CaMg[B_3O_4(OH)_3]_2 \cdot 3H_2O$. Группа колеманита. Колеманит $Ca[B_3O_4(OH)_3] \cdot H_2O$. Отдел В: слоистые бораты. Группа пандермита. Пандермит $Ca_2[B_5O_8(OH)_3] \cdot 2H_2O$. Отдел Г: каркасные бораты. Борачит $Mg_3[B_7O_{13}]Cl$. Класс 3: фосфаты, арсенаты, ванадаты. Подкласс 1: безводные фосфаты без дополнительных анионов. Отдел А: субцепочечные фосфаты и их аналоги. Группа ксенотима. Ксенотим $Y[PO_4]$. Группа монацита. Монацит $Ce[PO_4]$. Подкласс 2. Безводные фосфаты с дополнительными анионами. Отдел А: субцепочечные фосфаты и их аналоги. Группа апатита. Апатит $Ca_2^{IX}Ca_3^{VIII}[PO_4]_3(F, OH)_2$. Группа пироморфита. Пироморфит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VIII}[PO_4]_3Cl$. Миметезит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VIII}[AsO_4]_3Cl$. Ванадинит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VIII}[VO_4]_3Cl$.

(2 часа).

15. Подкласс 3: водные фосфаты и их аналоги. Отдел Б: субслоистые фосфаты и их аналоги. Группа вивианита. Вивианит $Fe_3[PO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Эритрин $Co_3[AsO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Аннабергит $Ni_3[AsO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Семейство урановых слюдок (50 минералов). Группа торбернита. Торбернит $Cu(UO_2)_2[PO_4]_2 \cdot 10H_2O$. Отенит $Ca(UO_2)_2[PO_4]_2 \cdot 10H_2O$. Группа карнотита. Карнотит $K_2(UO_2)_2[V_2O_8] \cdot 3H_2O$. Тюямунит $Ca(UO_2)_2[V_2O_8] \cdot 5 - 8H_2O$. Отдел В: субкаркасные фосфаты, арсенаты, ванадаты. Скородит $Fe[AsO_4] \cdot 2H_2O$. Класс 4: карбонаты. Подкласс 1: безводные карбонаты без дополнительных катионов. Группа доломита. Доломит $CaMg[CO_3]_2$. Анкерит $Ca(Mg, Fe^{2+})[CO_3]_2$. Группа кальцита – арагонита. Кальцит $Ca[CO_3]$. Родохрозит $Mn[CO_3]$. Сидерит $Fe[CO_3]$. Смитсонит $Zn[CO_3]$. Арагонит $Ca[CO_3]$. Стронцианит $Sr[CO_3]$. Витерит $Ba[CO_3]$. Церуссит $Pb[CO_3]$. Подкласс 2: безводные карбонаты с дополнительными анионами. Группа бастнезита. Бастнезит $Ce[CO_3]F$. Паризит $CaCe_2[CO_3]_3F_2$. Группа малахита. Малахит $Cu_2[CO_3](OH)_2$. Группа азурита. Азурит $Cu_3[CO_3]_2(OH)_2$. Подкласс 3: карбонаты с кристаллизационной водой. Семейство содовых минералов. Термонатрит $Na_2[CO_3] \cdot H_2O$. Сода $Na_2[CO_3] \cdot 10H_2O$

(2 часа).

16. Класс 5: вольфраматы и молибдаты. Группа вольфрамита. Ферберит $FeWO_4$. Вольфрамит $(Fe, Mn)WO_4$. Гюбнерит $MnWO_4$. Группа шеелита. Шеелит $Ca[WO_4]$. Повеллит $Ca[MoO_4]$. Вульфенит $Pb[MoO_4]$. Класс 6: сульфаты. Подкласс 1: безводные сульфаты без дополнительных анионов. Группа барита. Барит $Ba[SO_4]$. Целестин $Sr[SO_4]$. Англезит $Pb[SO_4]$. Группа ангидрита. Ангидрит $Ca[SO_4]$. Группа тенардита. Тенардит $Na_2[SO_4]$. Подкласс 2: безводные сульфаты с дополнительными анионами. Группа алуниита. Алуниит $KAl_3[SO_4]_2(OH)_6$. Ярозит $KFe_3[SO_4]_2(OH)_6$. Подкласс 3: водные сульфаты без дополнительных анионов. Группа гипса. Гипс $Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$. $Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$ Группа мирабилита. Мирабилит $Na_2[SO_4] \cdot 10H_2O$. Группа полигалита. Полигалит $K_2Ca_2Mg[SO_4]_4 \cdot 2H_2O$. Класс 7. Нитраты. Группа селитры. Натриевая селитра $Na[NO_3]$. Калиевая селитра $K[NO_3]$. Тип V: галогениды. Класс 1: хлориды, бромиды, иодиды. Подкласс 1: безводные хлориды. Отдел А: минералы с координационной структурой. Группа галита. Галит $NaCl$. Сильвин KCl . Группа

нашатыря. Нашатырь NH_4Cl . Группа хлораргирита. Хлораргирит $AgCl$. Бромаргирит $AgBr$. Группа иодаргирита. Иодаргирит AgI . Подкласс 2: водные хлориды. Группа бишофита. Бишофит $MgCl_2 \cdot 6H_2O$. Группа карналлита. Карналлит $KMgCl_3 \cdot 6H_2O$. Класс 2: фториды. Группа флюорита. Флюорит CaF_2

(2 часа).

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ (4 семестр, 32 часа)

Лабораторные работы выполняются с использованием коллекции минералов различных групп, классов, типов. Студенты используют шкалу Мооса и коллекционный материал кафедры геологии.

Цель работы: определение неизвестных минералов. Студент должен описать физические свойства минерала (цвет, блеск, твердость, наличие иризации, флюоресценции, опалесценции, цвет черты), формы выделений, габитус кристаллов, спайность, отдельность, генетические признаки минерала, характерные особенности данного минерала. По полученным характеристикам определить минеральный вид.

Оформить работу по схеме: цель, свойства, габитус, спайность, название минерала, формула, структура, образование, изменение, значение. В конце лабораторной работы должен быть записан вывод.

Каждый студент получает индивидуальный набор минералов для определения.

Лабораторная работа № 1

Тип I. Простые вещества. Класс самородных металлов и полуметаллов. Группа меди (Cu, Ag, Au). Группа платины-осмия. Группа железа-никеля. Группа мышьяка (мышьяк, висмут, сурьма). **(2 часа).**

Лабораторная работа № 2

Класс неметаллов. Группа серы. Группа графита-алмаза. Тип II: сульфиды (с селенидами, теллуридами, арсенидами). Класс 1: собственно сульфиды (с селенидами). Подкласс 1: Низшие сульфиды (моносulfиды). Отдел А: отдел минералов с координационной структурой. Группа акантита. Группа халькозина. Группа борнита. Группа сфалерита-вюрцита. Группа халькопирита (халькопирит, станин). **(2 часа).**

Лабораторная работа № 3

Группа галенита. Группа киновари-метациннабарита. Группа пирротина (троилит, пирротин). Группа пентландита. Отдел Б: низшие сульфиды с цепочечной структурой. Группа антимонита (антимонит, висмутин, хоробетсуит, селенистый висмутин). Отдел В: сульфиды со структурой иного типа. Группа реальгара (реальгар As_4S_4). Группа аурипигмента (аурипигмент As_2S_3). Группа ковеллина (ковеллин CuS). Группа молибденита (MoS_2). Подкласс 2: высшие сульфиды (персульфиды). Группа пирита-марказита (пирит FeS_2 кубич., марказит FeS_2 ромбич.). Группа кобальтина – арсенопирита. Кобальтин $CoAsS$. Арсенопирит $FeAsS$. **(2 часа).**

Лабораторная работа № 4

Подкласс 3: Сульфосоли. Отдел А: островные сульфосоли. Группа прустита Прустит Ag_3AsS_3 . Пираргирит Ag_3SbS_3 . Группа энаргита. Энаргит Cu_3AsS_4 . Отдел Б: цепочечные и ленточные сульфосоли. Группа буланжерита – джемсонита. Буланжерит $Pb_5Sb_4S_{11}$. Джемсонит $FePb_4Sb_6S_{14}$. Отдел В: каркасные сульфосоли. Группа блеклых руд. Теннантит $Cu_{12}As_4S_{13}$. Тетраэдрит $Cu_{12}Sb_4S_{13}$. Класс 2: теллуриды. Группа алтаита. Алтаит $PbTe$. Группа тетрадимита. Тетрадимит Bi_2Te_2S . Группа сильванита. Сильванит $AuAgTe_4$. Класс 3: арсениды. Подкласс 1: низшие арсениды (моноарсениды). Группа никелина. Никелин $NiAs$. Подкласс 2: высшие арсениды (перарсениды). Группа леллинита. Леллингит $FeAs_2$. Саффлорит $(Co,Fe)As_2$. Раммельсбергит $NiAs_2$. Группа скуттерудита. Скуттерудит $CoAs_3$. Шмальтин $(Co,Ni,Fe)As_{3\pm x}$. Хлоантит $NiAs_3$. **(2 часа).**

Лабораторная работа № 5

Тип III. Оксиды и гидроксиды. Класс 1: Оксиды. Подкласс 1: простые оксиды. Отдел А: минералы с координационной структурой. Подотдел 1: изометрические минералы. Группа уранинита. Уранинит, настуран $U_m^{4+} U_n^{6+} O_{2m+3n}$. Подотдел 2. Субцепочечные минералы. Группа рутила. Рутит TiO_2 . Касситерит SnO_2 . Пирролюзит MnO_2 . Подотдел 3. Субслоистые минералы. Группа корунда. Корунд Al_2O_3 . Гематит Fe_2O_3 . Отдел Б: минералы с каркасной структурой. Группа куприта. Куприт Cu_2O . Семейство кремнезема: полиморфные модификации, высоко- и низкотемпературные модификации. Кварц. Тридимит. Крестобалит. Лешательерит. Опал. Халцедон. Законы двойникования кварца, дофинеийские двойники, бразильские двойники, японские двойники. Изоморфные примеси в кварце, горный хрусталь, морион, цитрин, аметист, празем. **(2 часа).**

Лабораторная работа № 6

Подкласс 2: сложные оксиды. Надотдел 1: алюминаты. Группа шпинели. Шпинель $MgAl_2O_4$. Магнетит $FeFe_2O_4$. Хромит $FeCr_2O_4$. Надотдел 2: титанаты с координационной структурой. Группа ильменита. Ильменит $FeTiO_3$. Отдел Б: титанаты с каркасной структурой. Группа перовскита. Перовскит $CaTiO_3$. Лопарит $(Ce,Na,Ca)(Nb,Ti)O_3$. Надотдел 3: Тантало-ниобаты. Отдел А: тантало-ниобаты с субслоистой структурой. Группа колумбита. Колумбит $(Fe,Mn)(Nb,Ta)_2O_6$. Танталит $(Fe,Mn)(Ta,Nb)_2O_6$. Группа самарскита. Самарскит $(Y,U)(Nb,Fe^{3+})_2O_6$. Группа эвксенита. Эвксенит $YTiNbO_6$. Ферсмит $CaNb_2O_6$. Отдел Б: Тантало-ниобаты с субкаркасной структурой. Группа эшинита. Эшинит $CeTiNbO_6$. Группа пирохлора $NaCaNb_2O_6F$.

(2 часа).

Лабораторная работа № 7

Класс 2: гидроксиды. Семейство гидроксидов Fe, Al, Mn. Группа манганита. Манганит $MnOOH$. Группа псиломелана. Псиломелан $(Ba,Mn^{2+},\dots)_3(O,OH)_6Mn_8^{4+}O_{16}$. Группа гетит-лепидокрокита. Гетит $\alpha\text{-}FeOOH$. Диаспор $\alpha\text{-}AlOOH$. Лепидокрокит $\gamma\text{-}FeOOH$. Бемит $\gamma\text{-}AlOOH$. Группа гиббсита. Гиббсит $\alpha\text{-}Al(OH)_3$. Группа брусита. Брусит $Mg(OH)_2$. Группа сассолина. Сассолин $B(OH)_3$.

(2 часа).

Лабораторная работа № 8

Тип IV. Соли кислородных кислот. Класс 1: Силикаты. Кристаллохимические особенности силикатов. Типы структурных мотивов. Подкласс 1. Собственно силикаты. Отдел А: Ортосиликаты (с изолированными SiO_4 -тетраэдрами). Подотдел 1. Субслоистые ортосиликаты. Группа кианита-силиманита. Кианит $Al_2^{VI}[SiO_4]O$. Андалузит $Al^{VI}Al^{VI}[SiO_4]O$. Силлиманит $Al^{VI}[AlSiO_5]$. Группа ставролита. Ставролит $2Al_2[SiO_4]O \cdot Fe(OH)_2$. Группа хлоритоида. Хлоритоид $(Fe^{2+},Mg)_2(Al,Fe^{3+})Al_3[SiO_4]_2O_2(OH)_4$. Группа оливина. Форстерит $Mg_2[SiO_4]$. Оливин $(Mg,Fe)_2[SiO_4]$. Фаялит $Fe_2[SiO_4]$. Кнебелит $(Mn,Fe)_2[SiO_4]$. Тефроит $Mn_2[SiO_4]$. Группа монтичеллита. Монтичеллит $CaMg[SiO_4]$. Группа гумита. Хондродит $2Mg_2[SiO_4] \cdot Mg(F,OH)_2$. Гумит $3Mg_2[SiO_4] \cdot Mg(F,OH)_2$. Клиногумит $4Mg_2[SiO_4] \cdot Mg(OH,F)_2$. Подотдел 2: субкаркасные ортосиликаты. Группа гранатов. Пироп $Mg_3Al_2[SiO_4]_3$. Альмандин $Fe_3Al_2[SiO_4]_3$. Спессартин $Mn_3Al_2[SiO_4]_3$. Гроссуляр $Ca_3Al_2[SiO_4]_3$. Андрадит $Ca_3Fe_2[SiO_4]_3$. Уваровит $Ca_3Cr_2[SiO_4]_3$. Отдел Б: ортодиортосиликаты (с изолированными тетраэдрами SiO_4 и Si_2O_7 -группами). Группа

эпидота-цоизита. Цоизит $Ca_2Al_3[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$. Клиноцоизит
 $Ca_2Al_3[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$. Эпидот $Ca_2FeAl_2[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$. Ортит
 $Ce_2Fe_2Al[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$. Группа везувиана. Везувиан
 $Ca_{10}(Mg, Fe^{2+})_2Al_4[SiO_4]_5[Si_2O_7]_2(OH, F)_4$. (2 часа).

Лабораторная работа № 9

Отдел Г: цепочечные силикаты (метасиликаты). Семейство пироксенов. Группа ромбических пироксенов (ортопироксены). Энстатит $Mg_2[Si_2O_6]$. Ферросилит $Fe_2[Si_2O_6]$. Группа моноклинных пироксенов (клинопироксены). Кальциевые клинопироксены: диопсид $CaMg[Si_2O_6]$, геденбергит $CaFe[Si_2O_6]$, авгит $(Ca, Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Ti, Al)_2[(Si, Al)_2O_6]$. Натриевые клинопироксены: эгирин $NaFe[Si_2O_6]$, жадеит $NaAl[Si_2O_6]$. Литиевые клинопироксены: сподумен $LiAl[Si_2O_6]$. Семейство пироксеноидов. Группа волластонита. Волластонит $Ca_3[Si_3O_9]$. Группа родонита. Родонит $CaMn_4[Si_5O_{15}]$. Отдел Д: ленточные силикаты. Семейство амфиболов. Группа антофиллита-куммингтонита (Mg, Fe^{2+} - амфиболы). Подгруппа антофиллита. Антофиллит $(Mg, Fe^{2+})_7[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Группа тремолита (Ca - амфиболы). Тремолит $Ca_2Mg_5[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Актинолит $Ca_2(Mg, Fe^{2+})_5[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Группа роговой обманки ($Ca - Na$ - амфиболы). Роговая обманка $(Ca, Na, K)_{2-3}(Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Al)_5[Si_3(Al, Si)O_{11}]_2(OH, F, Cl)_2$. Арфведсонит $NaCa_{0,5}Na_{1,5}(Fe^{2+}, Mg, Fe^{3+}, Al)_5[Al_{0,5}Si_{7,5}O_{22}] \times (OH, F)_2$. Группа глаукофана (Na - амфиболы). Глаукофан $Na_2Mg_3Al_2[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Рибекит $Na_2Fe_3^{2+}Fe_2^{3+}[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. (2 часа).

Лабораторная работа № 10

Отдел Е: слоистые силикаты. Подотдел 1: минералы со слоями из амфиболовых лент SiO_4 - тетраэдров. Группа талька. Тальк $Mg_3[Si_4O_{10}](OH)_2$. Пирофиллит $Al_2[Si_4O_{10}](OH)_2$. Группа серпентинов. Антигорит $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Лizardит $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Хризотил $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Семейство хлоритов. Семейство монтмориллонита-каолинита. Группа

монтмориллонита. Группа каолинита. Группа галлуазита. Группа аллофана. Группа сапонита. (2 часа).

Лабораторная работа № 11

Подкласс 2: алюмосиликаты. Отдел А: слоистые алюмосиликаты. Подотдел 1. минералы со слоями из амфиболовых лент SiO_4 и AlO_4 - тетраэдров. Семейство слюд. Диоктаэдрические и триоктаэдрические слюды. Группа мусковита. Подгруппа мусковита. Мусковит $KAl_2[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Парагонит $NaAl_2[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Подгруппа флогопита. Флогопит $KMg_3[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Биотит $K(Mg, Fe)_3[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Подгруппа лепидолита. Лепидолит $KLi_{1,5}Al_{1,5}[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Циннвальдит $KLi_{1,5}(Al, Fe)_{1,5}[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Группа Маргарита. Маргарит $CaAl_2[Al_2Si_2O_{10}](OH, F)_2$. Группа глауконита. Глауконит $K(Fe^{3+}, Al, Fe^{2+}, Mg)_2[AlSi_3O_{10}](OH)_2$. Группа гидрослюд. Гидромусковит $K_{1-x}(H_2O)_x\{Al_2[AlSi_3O_{10}](OH)_{2-x}(H_2O)_x\}$. Группа вермикулита. Вермикулит $Mg_x(H_2O)_4\{Mg_{3-x}[AlSi_3O_{10}](OH)_2\}$. Подотдел 2: алюмосиликаты со слоями иного типа. Группа пренита. Пренит $Ca_2Al[AlSi_3O_{10}](OH)_2$. Отдел Б: каркасные алюмосиликаты. Группа петалита. Петалит $Li[AlSi_4O_{10}]$. Группа кордиерита. Кордиерит $(Mg, Fe)_2[Al_4Si_5O_{18}]$. Семейство полевых шпатов. Группа калиевых полевых шпатов. Микроклин $K[AlSi_3O_8]$. Ортоклаз $K[AlSi_3O_8]$. Санидин $(K, Na)[AlSi_3O_8]$. (2 часа).

Лабораторная работа № 12

Группа натрий – кальциевых полевых шпатов (плагиоклазов). Альбит $Na[AlSi_3O_8](Ab)$. Олигоклаз An_{10-30} . Андезин An_{30-50} . Лабрадор An_{50-70} . Битовнит An_{70-90} . Анортит $Ca[Al_2Si_2O_8](An)$. Группа бариевых полевых шпатов. Цельзиан $Ba[Al_2Si_2O_8]$. Гиалофан $K_{1-x}Ba_{x/2}[Al_{1+x}Si_{3-x}O_8]$. Семейство фельдшпатов. Группа скаполита. Мариалит $3Na[AlSi_3O_8] \cdot NaCl$ (Me_{0-25}). Дипир Me_{25-50} . Мицзонит Me_{50-75} . Мейонит $3Ca[Al_2Si_2O_8] \cdot CaCO_3$ (Me_{75-100}). Группа нефелина. Нефелин $KNa_3[AlSiO_4]_4$. Кальсилит $K[AlSiO_4]$. Карнегиит $Na[AlSiO_4]$. Группа содалита. Содалит $6Na[AlSiO_4] \cdot 2NaCl$.

Нозеан $6Na[AlSiO_4] \cdot 2Na_2SO_4$. Гаюин $6\left(Na, \frac{1}{2}Ca\right)[AlSiO_4] \cdot 2 - 1(Na_2, Ca)SO_4$. Лазурит $6Na[AlSiO_4] \cdot 2Ca(SO_4, S, Cl_2)$. Группа канкринита. Канкринит $6Na[AlSiO_4] \cdot CaCO_3 \cdot 2H_2O$. Вишневит $6(Na, K)[AlSiO_4] \cdot CaSO_4 \cdot 1 - 5H_2O$. Группа лейцита. Лейцит $K[AlSi_2O_6]$. Семейство цеолитов. Особенности основного структурного мотива. Группа натролита. Натролит $Na_2[Al_2Si_3O_{10}] \cdot 2H_2O$. Томсонит $NaCa_2[Al_2Si_2O_8]_{2,5} \cdot 6H_2O$. (2 часа).

Лабораторная работа № 13

Группа ломонтита. Ломонтит $Ca[AlSi_2O_6]_2 \cdot 4H_2O$. Группа анальцима. Анальцим $Na[AlSi_2O_6] \cdot H_2O$. Поллуцит $(Ca_{1-x}, Na_x)[AlSi_2O_6] \cdot xH_2O$. Вайкарит $Ca[AlSi_2O_6]_2 \cdot 2H_2O$. Группа филлипсита. Филлипсит $KCa[AlSi_2O_6]_3 \cdot 6,75H_2O$. Гармотом $Ba_2(K, Na)[AlSi_2O_6]_5 \cdot 11,25H_2O$. Группа хабазита. Хабазит $(Na_2, Ca)[AlSi_2O_6]_2 \cdot 6H_2O$. Группа стильбита. Стильбит $Ca[AlSi_3O_8]_2 \cdot 6,25H_2O$. Гейландит $Ca[AlSi_3O_8]_2 \cdot 5,35H_2O$. Группа морденита. Морденит $(Ca, Na_2, K_2)[AlSi_5O_{12}]_2 \cdot 7H_2O$. Подкласс 3: боро- и боратосиликаты. Отдел А: минералы с кольцевой структурой. Группа турмалина. Дравит $NaMg_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Шерлит (шерл) $(Na, Ca)Fe_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Эльбаит $Na(Li, Al)_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Тсилазит $NaMn_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Отдел Б: минералы сослоистой структурой. Группа датолита. Датолит $Ca\{B[SiO_4]OH\}$. Отдел В: минералы с каркасной структурой. Группа данбурита. Данбурит $Ca[B_2Si_2O_8]$. Подкласс 4: бериллосиликаты. Подотдел 1: субцепочечные бериллосиликаты. Группа фенакита. Фенакит $\{Be_2[SiO_4]\}$. Подотдел 2: субкольцевые бериллосиликаты. Группа берилла. Берилл $Al_2\{Be_3[Si_6O_{18}]\}$. Подотдел 3: изометрические бериллосиликаты. Группа гельвина. Гельвин $3Mn[BeSiO_4] \cdot MnS$. Даналит $3Fe[BeSiO_4] \cdot FeS$. Гентгельвин $3Zn[BeSiO_4] \cdot ZnS$. (2 часа).

Лабораторная работа № 14

Подкласс 5: титано- и цирконосиликаты. Отдел А. Субцепочечные минералы. Группа циркона. Циркон $\{Zr[SiO_4]\}$. Группа титанита. Титанит $Ca\{Ti[SiO_4]O\}$. Отдел Б:

субслоистые титано- и цирконосиликаты. Группа эвдиалита. Эвдиалит $(Na, Ca)_9(Zr, Fe)_3[Si_3O_9][Si_9O_{24}(OH)_3]$. Группа лампрофиллита. Лампрофиллит $Sr\langle Na_3Ti\{Ti_2[Si_2O_7]_2O_2F\}\rangle$. Группа астрофиллита. Астрофиллит $(K, Na)_3\langle(Mn, Fe)_7\{Ti_2[Si_4O_{12}]_2(OH)_5\}\rangle$. Подкласс б: галогенидосиликаты. Отдел Ф: субкоординационные галогенидосиликаты. Группа зунита. Зунит $Al_{12}(OH, F)_{18}[AlO_4][Si_5O_{20}]Cl$. Отдел Б: субслоистые галогенидосиликаты. Группа топаза. Топаз $Al_2[SiO_4](F, OH)_2$. Группа апофиллита. Апофиллит $KCa_4[Si_4O_{10}]_2F \cdot 8H_2O$. Класс 2: бораты. Отдел А: островные бораты. Группа людвигита. Людвигит $(Mg, Fe)_2Fe[BO_3]O_2$. Группа ашарита. Ашарит $Mg_2[B_2O_4OH]OH$. Группа буры. Буря $Na_2[B_4O_5(OH)_4] \cdot 8H_2O$. Группа иньюита. Иньюит $Ca[B_3O_3(OH)_5] \cdot 4H_2O$. Отдел Б: бораты с цепочечной структурой. Группа гидроборачита. Гидроборачит $CaMg[B_3O_4(OH)_3]_2 \cdot 3H_2O$. Группа колеманита. Колеманит $Ca[B_3O_4(OH)_3] \cdot H_2O$. Отдел В: слоистые бораты. Группа пандермита. Пандермит $Ca_2[B_5O_8(OH)_3] \cdot 2H_2O$. Отдел Г: каркасные бораты. Борацит $Mg_3[B_7O_{13}]Cl$. Класс 3: фосфаты, арсенаты, ванадаты. Подкласс 1: безводные фосфаты без дополнительных анионов. Отдел А: субцепочечные фосфаты и их аналоги. Группа ксенотима. Ксенотим $Y[PO_4]$. Группа монацита. Монацит $Ce[PO_4]$. Подкласс 2. Безводные фосфаты с дополнительными анионами. Отдел А: субцепочечные фосфаты и их аналоги. Группа апатита. Апатит $Ca_2^{IX}Ca_3^{VII}[PO_4]_3(F, OH)_2$. Группа пироморфита. Пироморфит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VII}[PO_4]_3Cl$. Миметезит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VII}[AsO_4]_3Cl$. Ванадинит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VII}[VO_4]_3Cl$.

(2 часа).

Лабораторная работа № 15

Подкласс 3: водные фосфаты и их аналоги. Отдел Б: субслоистые фосфаты и их аналоги. Группа вивианита. Вивианит $Fe_3[PO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Эритрин $Co_3[AsO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Аннабергит $Ni_3[AsO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Семейство урановых слюдок (50 минералов). Группа торбернита. Торбернит $Cu(UO_2)_2[PO_4]_2 \cdot 10H_2O$. Отенит $Ca(UO_2)_2[PO_4]_2 \cdot 10H_2O$. Группа карнотита. Карнотит $K_2(UO_2)_2[V_2O_8] \cdot 3H_2O$. Тюямунит $Ca(UO_2)_2[V_2O_8] \cdot 5-8H_2O$. Отдел В: субкаркасные фосфаты, арсенаты, ванадаты. Скородит $Fe[AsO_4] \cdot 2H_2O$. Класс 4: карбонаты. Подкласс 1: безводные карбонаты без дополнительных катионов. Группа доломита. Доломит

$CaMg[CO_3]_2$. Анкерит $Ca(Mg, Fe^{2+})[CO_3]_2$. Группа кальцита – арагонита. Кальцит $Ca[CO_3]$. Родохрозит $Mn[CO_3]$. Сидерит $Fe[CO_3]$. Смитсонит $Zn[CO_3]$. Арагонит $Ca[CO_3]$. Стронцианит $Sr[CO_3]$. Витерит $Ba[CO_3]$. Церуссит $Pb[CO_3]$. Подкласс 2: безводные карбонаты с дополнительными анионами. Группа бастнезита. Бастнезит $Ce[CO_3]F$. Паризит $CaCe_2[CO_3]_3F_2$. Группа малахита. Малахит $Cu_2[CO_3](OH)_2$. Группа азурита. Азурит $Cu_3[CO_3]_2(OH)_2$. Подкласс 3: карбонаты с кристаллизационной водой. Семейство содовых минералов. Термонатрит $Na_2[CO_3] \cdot H_2O$. Сода $Na_2[CO_3] \cdot 10H_2O$
(2 часа).

Лабораторная работа № 16

Класс 5: вольфраматы и молибдаты. Группа вольфрамита. Ферберит $FeWO_4$. Вольфрамит $(Fe, Mn)WO_4$. Гюбнерит $MnWO_4$. Группа шеелита. Шеелит $Ca[WO_4]$. Повеллит $Ca[MoO_4]$. Вульфенит $Pb[MoO_4]$. Класс 6: сульфаты. Подкласс 1: безводные сульфаты без дополнительных анионов. Группа барита. Барит $Ba[SO_4]$. Целестин $Sr[SO_4]$. Англезит $Pb[SO_4]$. Группа ангидрита. Ангидрит $Ca[SO_4]$. Группа тенардита. Тенардит $Na_2[SO_4]$. Подкласс 2: безводные сульфаты с дополнительными анионами. Группа алунита. Алунит $KAl_3[SO_4]_2(OH)_6$. Ярозит $KFe_3[SO_4]_2(OH)_6$. Подкласс 3: водные сульфаты без дополнительных анионов. Группа гипса. Гипс $Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$. $Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$ Группа мирабилита. Мирабилит $Na_2[SO_4] \cdot 10H_2O$. Группа полигалита. Полигалит $K_2Ca_2Mg[SO_4]_4 \cdot 2H_2O$. Класс 7. Нитраты. Группа селитры. Натриевая селитра $Na[NO_3]$. Калиевая селитра $K[NO_3]$. Тип V: галогениды. Класс 1: хлориды, бромиды, иодиды. Подкласс 1: безводные хлориды. Отдел А: минералы с координационной структурой. Группа галита. Галит $NaCl$. Сильвин KCl . Группа нашатыря. Нашатырь NH_4Cl . Группа хлораргирита. Хлораргирит $AgCl$. Бромаргирит $AgBr$. Группа иодаргирита. Иодаргирит AgI . Подкласс 2: водные хлориды. Группа бишофита. Бишофит $MgCl_2 \cdot 6H_2O$. Группа карналлита. Карналлит $KMgCl_3 \cdot 6H_2O$. Класс 2: фториды. Группа флюорита. Флюорит CaF_2
(2 часа).

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ЛЕКЦИОННОГО КУРСА

1. ПРЕДМЕТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Кристаллография – наука о кристаллическом состоянии вещества. Кристаллография изучает симметрию, строение, образование и свойства кристаллов [1].

Кристаллические тела – твердые тела, обладающие упорядоченной трехмерно-периодической пространственной атомной структурой, способные самоограничаться в определенных условиях. Основной характеристикой кристаллического состояния вещества является трехмерная периодичность расположения материальных частиц [2].

1.1. Исторические сведения

Зародилась кристаллография в древности и развивалась в тесной связи с минералогией. В истории кристаллографии можно выделить четыре периода:

- 1) предыстория (от древнейших времен до конца XVII в.);
- 2) становление кристаллографии как науки (конец XVII – начало XIX вв.);
- 3) развитие классической кристаллографии (начало XIX – начало XX вв.);
- 4) современный период (начало XX в. – до наших дней) [2].

Первые упоминания о кристаллах и само слово «кристалл» встречаются в древнегреческих литературных источниках. Термин «симметрия» появился тоже в Древней Греции. Введение его приписывается древнегреческому скульптору Пифагору из Региума (V в. до н. э.). Понятие «симметрия» связывалось с понятиями гармонии, красоты в природе и искусстве. Существует предположение, что реальными прообразами тел Платона (427-347 гг. до н. э.) могли быть кристаллы минералов: тетраэдр тетраэдрита, куб поваренной соли, галенита, пирита, октаэдр шпинели и алмаза, пентагон-додекаэдр пирита, икосаэдр пирита. Часто сведения о кристаллах встречаются в трудах Плиния Старшего (23 – 79 гг. до н. э.): это описания кристаллов золота, алмаза, кварца, часто переплетающиеся с легендами о несуществующих камнях. Плиний Старший описывает окраску, чистоту, форму кристаллов. Несмотря на то, что период средневековья и Возрождения охватывает почти 15 столетий (III – XVII вв.), сведения того времени о кристаллах были незначительными, нечеткими и часто малодостоверными. Ал-Бируни (973–1048 гг.) в книге «Собрание сведений для познания драгоценностей» пишет о кристаллах горного хрусталя: «Удивительно, какие встречаются у хрусталя естественные формы! ...шестигранные, точно выточенные искусственно». Выдающийся философ, естествоиспытатель и врач Авиценна (~ 980–1037 гг.) разработал классификацию минералов, которой кристаллографы пользовались вплоть до XVIII в. Немецкий врач и натуралист Георгий Агрикола (~ 1494–1555 гг.) в книге «О природе ископаемых» особое внимание обращает на внешние признаки минералов: цвет, прозрачность, вкус, блеск, вес, форму. Г. Агриколу можно считать родоначальником практической кристаллографии. Итальянский математик, врач и философ Джероламо Кардано (~ 1501–1576 гг.) в трактате «О самоцветах и цветах» рассуждает об алмазе:

«Чистый адамас обладает наибольшей твердостью и блеском... Умеряет ночные страхи». Кардано указывал на связь между внешней формой и внутренним строением кристалла, он наметил линию развития теоретической и структурной кристаллографии. Итальянский ботаник, врач, философ Андреас Чезальпино (1519–1603) утверждал, что кварц является самым чистым из всех веществ, имеет шестиугольную форму, а пирамидальные заострения на концах его столбчатых кристаллов возникают в результате нехватки питающего вещества для растущего кристалла. Таким образом, Чезальпино принадлежат соображения по кристаллогенезису кварца. Первым кристаллографическим трактатом в области теоретической кристаллографии была книга немецкого математика и астронома Иоганна Кеплера (1571–1630) «Новогодний подарок или [трактат] о шестиугольном снеге», написанная в 1611 г. Трактат поражает широтой подхода при рассмотрении причин образования сложных форм снежинок, смелыми геометрическими обобщениями, остроумием, глубиной и дальновидностью рассматриваемых вопросов. Кеплер пытается использовать принцип плотнейшей упаковки для объяснения «шестиугольности снежных звездочек» [2].

В 1669 г. датский натуралист Николай Стенон (1638–1686) опубликовал книгу «О твердом, естественно содержащемся в твердом». При наблюдении многообразия форм кристаллов кварца Стенон нашел у них общее свойство – сохранение величин граничных углов. С именем Стенона связано открытие основного закона геометрической кристаллографии – закона постоянства углов, суть которого в том, что углы между соответственными гранями и ребрами во всех кристаллах одного и того же вещества постоянны. Большое значение Стенон придавал вопросам происхождения твердых тел, форме кристаллов, рассматривал элемент симметрии – тройную ось, обращал внимание на послойный рост кристаллов, описывал способность кристаллов раскалываться по определенным направлениям (спайность) [3].

В том же 1669 г. датский ученый Эразм Бартолин (1625–1698) публикует книгу «Эразма Бартолина опыты с двупреломляющим исландским кристаллом, которые привели к открытию чудесного и необычайного преломления», в 1661 г. – брошюру «О фигуре снега». В книге Бартолин описывает 17 опытов с кристаллами кальцита, в которых исследуются ромбоэдрическая форма кристаллов, спайность, явление трибоэлектричества, твердость, растворимость в жидкостях, определение двугранных углов. С седьмого по семнадцатый опыты посвящены «чудесному и необычайному явлению» – двупреломлению света в кальците. Великое открытие датчанина современники не поняли. «Работы Бартолина были встречены учеными с полным недоверием. Английское Королевское общество даже назначило для их проверки специальную комиссию из видных ученых (и каких ученых!):

Ньютона, Бойля, Гука и других. Эта авторитетная комиссия признала открытые Бартолином явления случайными, а законы несуществующими. Лишь двадцать с лишним лет спустя, в 1691 г., Христиан Гюйгенс (1629–1695) подтвердил правильность открытий Бартолина и сам открыл двупреломление света в кварце» [4].

Таким образом, 1669 г. является для кристаллографии дважды юбилейным: на страницах трудов Стенона зародилась генетическая и геометрическая кристаллография, на страницах трактата Бартолина – физическая кристаллография и кристаллооптика.

1669 - й г. является годом основания науки кристаллографии.

Термин «кристаллография» впервые появляется в 1719 г. в работе швейцарского ученого М. А. Капеллера (1685-1769) «Эскиз исторической, физической и медицинской кристаллографии, которую М. А. Капеллер в Люцерне желает преподнести с божьей помощью знаменитому обществу просвещенных физиков». Слово «кристаллография» Капеллер применяет лишь для описания горного хрусталя (crystallos) [2].

В 1749 г. выходит в свет диссертация русского ученого М. В. Ломоносова (1711-1756) «О рождении и природе селитры», в которой автор излагает принципы плотнейшей упаковки кристаллов, объясняет закон постоянства углов с помощью внутреннего строения кристаллов, пытается установить связь между морфологией кристаллов и их структурой [5]. Задачи, поставленные М. В. Ломоносовым в его трудах, подходят под формулировку задач кристаллохимии, которая «изучает пространственное расположение атомов в кристаллах, находит законы этого расположения и из них выводит физико-химические свойства соответствующих химических соединений» [6]. Удивительно и печально, что кристаллографические достижения М. В. Ломоносова не были оценены, диссертация о селитре пролежала невостребованной около 200 лет [2].

Книга немецкого минералога и геолога А. Г. Вернера (1749-1817) «О внешних признаках ископаемых тел» увидела свет в 1774 г. Она оказала большое влияние на развитие кристаллографии и описательной минералогии. Вернер предложил классифицировать минералы по внешним признакам: окраске, излому, цвету черты, прозрачности, твердости, побежалости, весу, запаху, вкусу и др. Вернер объясняет ряд свойств особенностями роста кристаллов, описывает некоторые простые формы кристаллов: «двадцативершинник» (пентагон-додекаэдр) пирита, «восьмивершинники» с квадратными и ромбическими очертаниями (куб и ромбоэдр) поваренной соли и плавикового шпата, «столбики» (кристаллографические призмы) турмалина и горного хрусталя, «пирамиды и удвоенные пирамиды» (пирамиды и дипирамиды), «таблички» гематита и мусковита, «клин» магнетита [7]. Заслуживают внимания отмеченные Вернером второстепенные грани, притупляющие вершины и ребра основных форм [2].

Ученик Вернера Х. С. Вейс (1780-1856) сформулировал правило вывода вторичных граней из первичных путем притупления ребер. Позднее оно переросло в закон зон, который лежит в основе зональной кристаллографии [2].

Французский ученый Ж. Б. Ромэ-Делиль (1736-1790) первым предпринял попытку оформить кристаллографию в виде самостоятельной науки. Ромэ-Делиль обратил внимание на важность закона постоянства углов, доказал его множеством измерений, определил место гониометрии при исследовании кристаллографических форм. В Париже Ромэ-Делиль читал лекции по курсу кристаллографии для избранного круга любителей естествознания – «первые лекции нашей науки, когда-либо читанные» [8]. В 1772 г. издается «Опыт кристаллографии, или Описание геометрических фигур, свойственных различным телам минерального царства и известных попросту под названием кристаллов» Ромэ-Делиля, в 1783 г. выходит в свет его «Кристаллография» в 4 томах [9]. Ромэ-Делиль описывает кристаллографические формы горного хрусталя, определяет объекты изучения кристаллографии, отмечает, что кристаллография требует осторожного подхода и строгого обоснования, рассматривает явления кристаллизации, отмечает, что «доказан рост веществ минерального царства путем простого соединения их молекул между собой» [10].

Французский ученый Р. Ж. Гаюи (1743–1822) разработал теорию структуры кристаллов. В 1784 г. вышла его книга «Опыт теории структуры кристаллов», в 1801 г. – «Курс минералогии» в 4 томах, в 1822 г. – «Курс кристаллографии». Гаюи открывает закон рациональности отношений, пытается определить «форму составных молекул кристаллов и способ их взаимного расположения в каждом кристалле» [11]. Его выводы о наличии в каждом кристалле совокупности параллелепипедов, равных между собой и смежных по целым граням, являются основой решетчатого строения кристаллов. Гаюи ввел систему символов для обозначения кристаллических форм [2].

В 1830 г. немецкий минералог И. Гессель (1796–1872) в статье «Кристалл» описал многогранники, распределил их в зависимости от комплексов элементов симметрии по 32 группам и по 4 категориям.

Немецкий кристаллограф Х. С. Вейс (1780–1856) открывает закон зон, устанавливающий связь между положением граней и ребер кристаллов, согласно которому все вторичные грани выводятся из первичных путем притупления ребер. Начинается развитие зональной кристаллографии [2].

Французский инженер-физик, ботаник Огюст Браве (1811–1863) в 1848 г. вводит понятие "пространственная решетка", устанавливает 14 типов элементарных ячеек (Браве), приводит неполный вывод 32 групп симметрии для конечных фигур [2].

Русский ученый, академик, профессор Петербургского артиллерийского училища А. В. Гадолин (1828–1892) в 1867 г. приводит четкий вывод 32 кристаллографических групп и публикует труд "Вывод всех кристаллографических систем и их подразделений из одного общего начала" [2].

Русский кристаллограф и минералог, горный инженер Е. С. Федоров (1853–1919) в труде "Симметрия правильных систем фигур" и немецкий математик Артур Шенфлис (1853–1928) в 1890 г. предлагают 230 способов размещения материальных частиц, то есть выводят 230 пространственных групп симметрии [2].

Знаменательным для дальнейшего развития кристаллографии было открытие в 1895 г. X-лучей (с длиной волны λ 10^{-5} – 10^2 нм) немецким физиком Вильгельмом Конрадом Рентгеном (1845–1923).

Немецкий физик Макс фон Лауэ (1879–1960) в 1912 г. открывает явление дифракции рентгеновских лучей. Английский ученый Уильям Брэгг (1862–1942) и русский ученый Георг Вульф (1863–1925) в 1913 г. разрабатывают метод исследования кристаллов – метод рентгеноструктурного анализа. Расшифрованы структуры несложных соединений NaCl, C. Работы Рентгена, Лауэ и Брегга удостоены Нобелевских премий [1].

В течение почти 90 лет были расшифрованы и детально описаны структуры нескольких десятков тысяч кристаллических соединений, кристаллографические данные занесены в международную рентгенометрическую картотеку.

Большая заслуга в формировании российской и советской школы кристаллографов принадлежит советскому кристаллографу и геохимику академику Н. В. Белову (1891–1982), создавшему фундаментальные труды по теории плотнейшей упаковки атомов в кристаллах, кристаллохимии силикатов. Им разработаны принципы "Второй главы кристаллохимии", им и его учениками расшифрованы структуры более 200 силикатов, германатов, боратов.

1.2. Основные макроскопические признаки кристаллических тел

Рассмотрим основные макроскопические свойства кристаллов: однородность, способность самоограничаться, анизотропию, симметрию [12].

Однородность – тождественность всех свойств в любых участках кристаллического вещества. Если обозначить $F(x)$ – свойство кристалла в точке $x(x_1, x_2, x_3)$, а $F(x+x')$ – свойство кристалла в точке $x+x'(x_1+x'_1, x_2+x'_2, x_3+x'_3)$, то $F(x)=F(x+x')$, причем рассматриваемые линейные размеры кристалла много больше размеров элементарной ячейки $L \gg a$. Таким образом, однородность есть независимость любого свойства F при переходе от т. $x(x_1, x_2, x_3)$ к точке $x+x'(x_1+x'_1, x_2+x'_2, x_3+x'_3)$ [12].

Способность самоограняться заключается в способности кристаллов приобретать естественную форму многогранников с плоскими гранями в процессе роста при равновесных условиях (рис. 1– 4).

Анизотропия - зависимость свойств F от направления n

$$F(n_1) \neq F(n_2).$$

Указательные поверхности – наглядное описание анизотропии свойств. Коэффициент теплопроводности, диэлектрическая и магнитная восприимчивости, показатель преломления, а также многие другие физические характеристики кристаллов имеют разные значения в зависимости от направления в кристалле.

Симметрия – инвариантность структуры объекта по отношению к некоторым преобразованиям в пространстве переменных, описывающих рассматриваемый объект. Термин «симметрия» происходит от греческого слова *symmetria* – соразмерность.



Рис. 1. Горный хрусталь. Сибирь 1:1
 SiO_2 .



Рис.2. Бериллы. Верхний ряд – массой 4,880 и 5,360 кг, нижний ряд –
массой 0,750 и 2,240 кг. Украина.
 $\text{Be}_3\text{Al}_2[\text{Si}_6\text{O}_{18}]$.



Рис.3. Турмалин. Размер кристалла в поперечнике около 5 см. Памир.
 $\text{NaR}_3\text{Al}_6\text{B}_3\text{Si}_6\text{O}_{27}(\text{OH})_4$; R = Fe^{2+} (шерл),
R = Mg^{2+} (дравит).

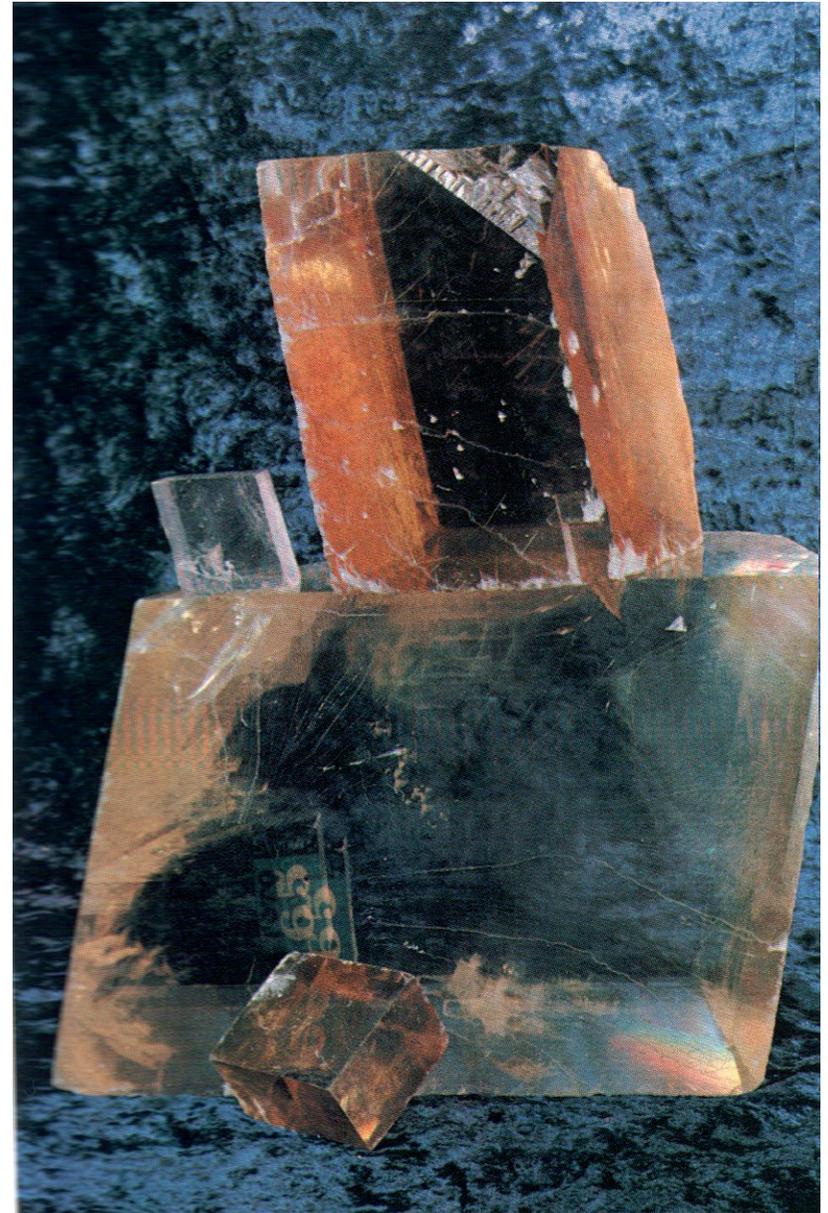


Рис.4. Исландский шпат. Сибирь. 1:1
 CaCO_3 .

Геометрическая симметрия – симметрия применительно к геометрическим объектам. Функция F симметрична, если она инвариантна к преобразованию всех или части своих переменных. Пусть $\mathbf{x}(x_1, \dots, x_m)$ – аргументы функции F , $\mathbf{x}'(x'_1, \dots, x'_m), \dots, \mathbf{x}^{(n)}(x^{(n)}_1, \dots, x^{(n)}_m)$ – преобразованные аргументы этой функции, тогда $F(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x}') = \dots = F(\mathbf{x}^{(n)})$ – условие симметрии функции F . Симметрия является одним из обобщающих фундаментальных понятий физики и естествознания в целом. Е. С. Федоров в 1901 г. определил понятие симметрии: «Симметрия есть свойство геометрических фигур повторять свои части, или, выражаясь точнее, свойство их в различных положениях приходиться в совмещение с первоначальным положением».

Кристаллическое состояние – термодинамически равновесное состояние твердого тела. Аморфное состояние не есть равновесное.

Контрольные вопросы

1. Определите предмет кристаллографии.
2. Какие тела называются кристаллическими?
3. Назовите основные периоды развития кристаллографии.
4. Охарактеризуйте каждый исторический период.
5. Назовите макроскопические свойства кристаллов.
6. Определите понятия «однородность», «анизотропия», «симметрия».
7. В чем заключается способность кристаллов самоограняться?

Библиографический список

1. Советский энциклопедический словарь. Под ред. А. М. Прохорова Изд-во «Сов. энциклопедия». М., 1982. 1600 с.
2. Шафрановский И. И, История кристаллографии. Л.: Наука. 1978. 296 с.
3. Стенон Н. О твердом, естественно содержащемся в твердом. /Пер. Г. А. Стратановского. Сер. «Классики науки». Л., 1957. 152 с.
4. Шубников А. В. У истоков кристаллографии. М., 1972. 52 с.
5. Меншуткин Б. Н. Труды Ломоносова по физике и химии. М.-Л., 1936. 538 с.
6. Бокий Г. Б. Введение в кристаллохимию. М., 1954.
7. Мокиевский В. А., Шафрановский И. И. Простые формы кристаллов. //Кристаллография. Вып.4. Л., 1955. С.160.
8. Вернадский В. И. Основы кристаллографии. Ч.1. Вып. 1. М., 1904. 345 с.
9. Из итогов тридцатипятилетия. Е. С. Федоров. М. 1904. 15 с.

10. Ромэ-Делиль Ж. Б. Предисловие и введение в «Кристаллографию» Ромэ-Делиля//Н. Стенон. О твердом, естественно содержащемся в твердом. М.-Л., 1957. С. 92-143.

11. Гаюи Р. Ж. Опыт строения кристаллов и его применение к разнородным кристаллическим веществам// Р. Ж. Гаюи. Структура кристаллов. Сер. «Классики науки». М.-Л., 1962. С. 7-106.

12. Шаскольская М. П. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1976. 392 с.

2. СИММЕТРИЯ

Изучение кристаллов начнем с описания их внешней формы, рассмотрим элементы и операции симметрии, необходимые для этого описания.

2.1. Операции и элементы симметрии конечных фигур

В идеально развитом кристалле грани, ребра и вершины могут быть преобразованы друг в друга с помощью поворотов и отражений – *операций симметрии* (рис. 5). Симметрические операции могут быть заданы с помощью геометрических объектов, которые называются элементами симметрии. К таким элементам относятся плоскости, прямые линии, точки. *Элементы симметрии* – геометрические места инвариантных точек, то есть точек, которые остаются неподвижными при данной симметрической операции [1,2].

2.1.1. Элементы симметрии I и II рода

Элементы симметрии в зависимости от характера делят на элементы симметрии I и II рода (рис. 6). *Элементы симметрии I рода* связывают друг с другом конгруэнтные фигуры, *элементы симметрии II рода* – энантиоморфные фигуры. *Фигуры T* и *T'* на рис. 7 являются *конгруэнтно равными* (конгруэнтными), они совмещаются при наложении или вложении. *Фигуры T* и *T'* являются *энантиоморфными* (зеркально равными), они совмещаются друг с другом при зеркальном отражении [1].

К элементам симметрии I рода относятся поворотные оси симметрии. К элементам симметрии II рода – зеркальная плоскость симметрии и центр инверсии (центр симметрии). Рассмотрим поворотные оси симметрии. *Поворотная ось симметрии* – это прямая, при повороте вокруг которой на определенный угол фигура совмещается сама с собой.

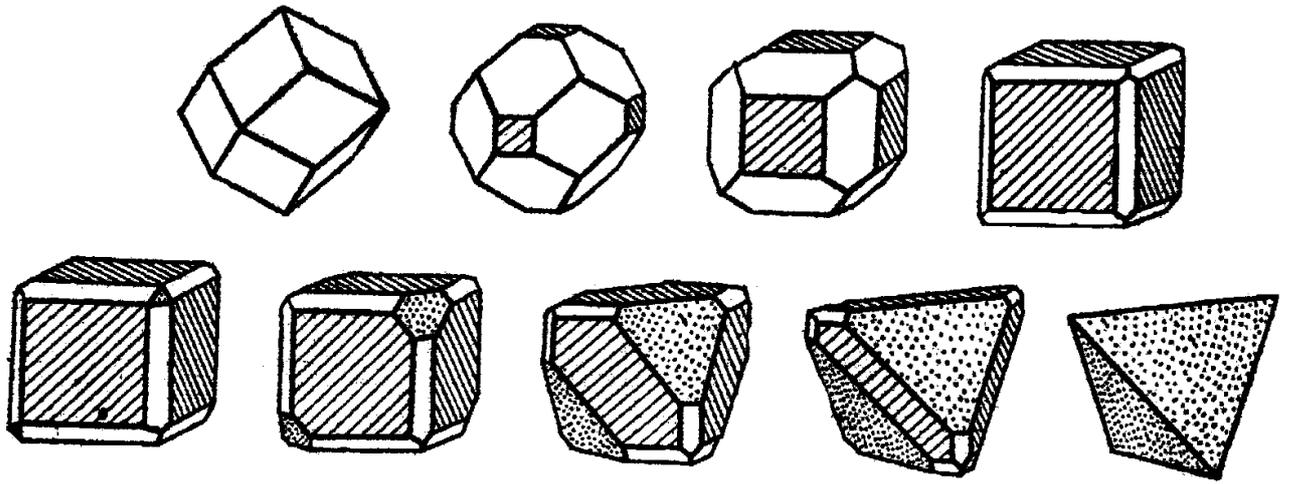


Рис. 5. Искажение очертаний граней простой формы в комбинационном кристалле.

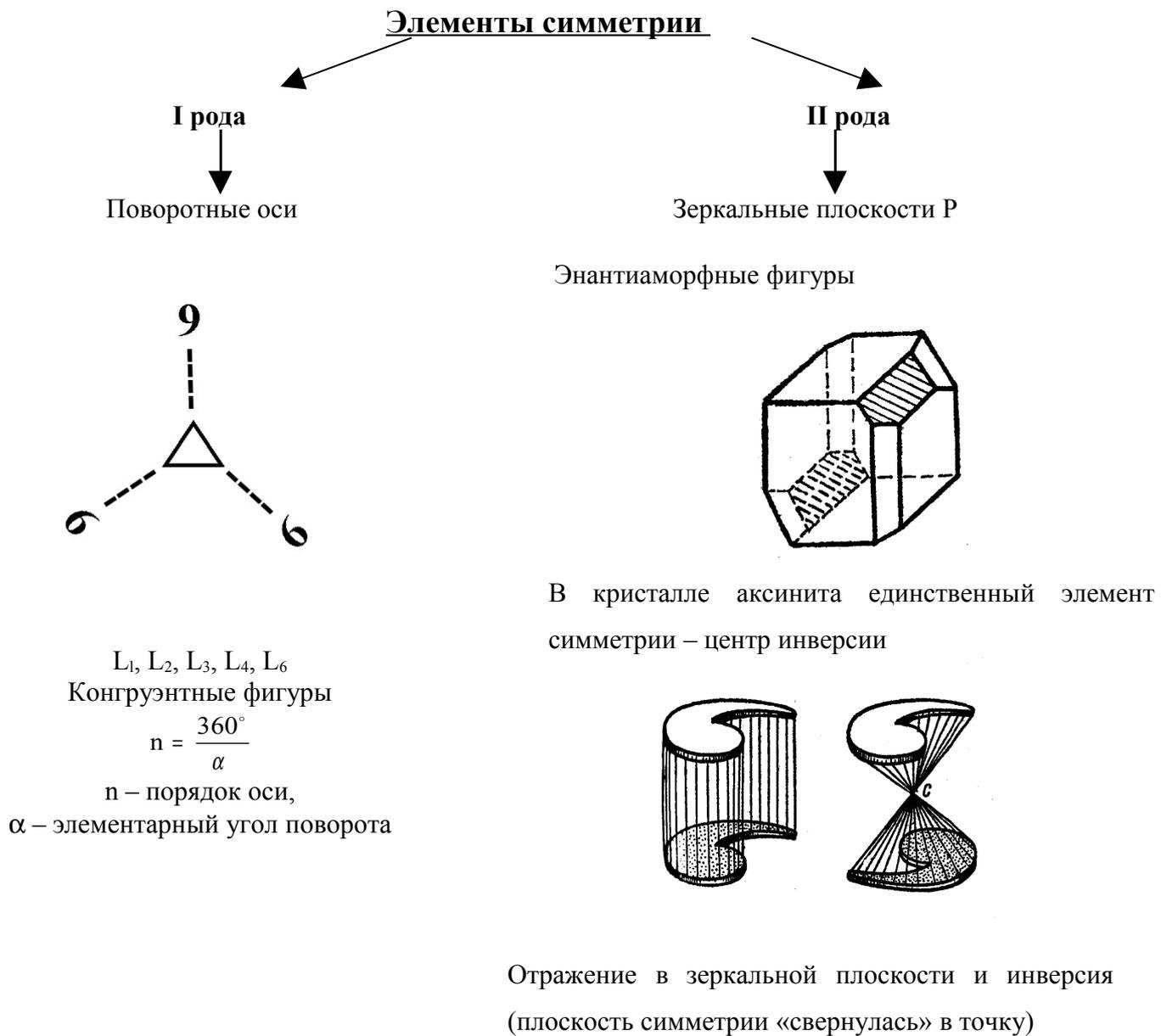


Рис. 6. Элементы симметрии I и II рода.

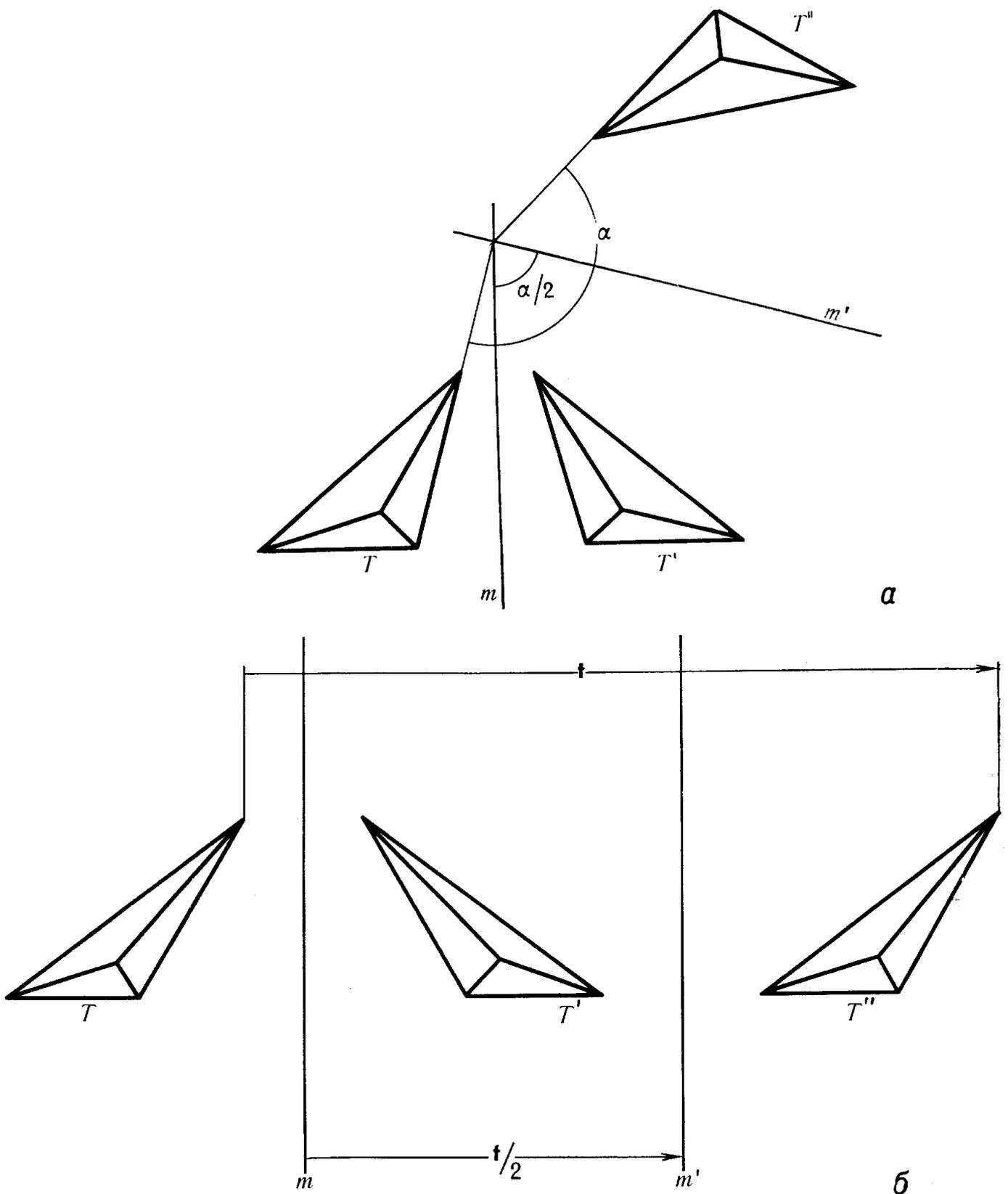


Рис. 7. Операция движения как результат последовательных отражений в двух плоскостях m и m' :

а – поворот (плоскости m и m' пересекаются, прямая пересечения – ось поворота)
 б – трансляция (плоскости m и m' параллельны).

Элементарный угол поворота α – это наименьший угол поворота вокруг оси, который приводит фигуру к самосовмещению. **Порядок оси n** определяется по формуле $n=360^\circ/\alpha$. Таким образом, порядок оси показывает число самосовмещений фигуры при полном повороте на 360° [1,3].

В кристаллических многогранниках возможны оси симметрии 1,2,3,4,6 порядков (рис. 8). Основной закон симметрии кристаллов гласит: «В кристаллах невозможны оси симметрии 5-го и выше 6-го порядков» [2,4].

Особо следует рассмотреть один из элементов симметрии – трансляцию. С одной стороны, трансляция является элементом симметрии, с другой, – операцией симметрии. Трансляция связывает конгруэнтные фигуры, расположенные на одной линии без поворота. Термин «трансляция» происходит от латинского слова translation – передача. Трансляция – перенос объекта в пространстве на некоторое расстояние параллельно самому себе вдоль прямой, называемой осью трансляции [6].

2.1.2. Сложные оси симметрии

Рассмотрим элементы симметрии II рода. **Зеркальная плоскость симметрии** – плоскость, отражаясь в которой фигуры соотносятся друг с другом как предмет и его отражение в зеркале (рис.6,7). Центр инверсии – это точка, отражаясь в которой фигуры соотносятся как предмет и его изображение на фотопленке, то есть центр инверсии играет роль фокуса оптической линзы (рис. 6). На рис. 6 приведен кристалл аксинита, в котором центр инверсии является единственным элементом симметрии [1,7].

На рис. 8 представлены элементы симметрии, с помощью которых возможно совмещение фигур путем двойных действий: операции симметрии I рода (поворота) и операции симметрии II рода (отражения), – это **сложные оси симметрии**. На рис. 8 изображены **инверсионные оси симметрии**, при действии такой оси за поворотом следует инверсия в точке. Если же за поворотом вокруг оси следует зеркальное отражение в плоскости, перпендикулярной оси, то сложная ось называется **зеркальной осью симметрии**. Операции в сложных осях симметрии являются коммутативными, то есть порядок операций (отражение и поворот) может быть любым [1,8].

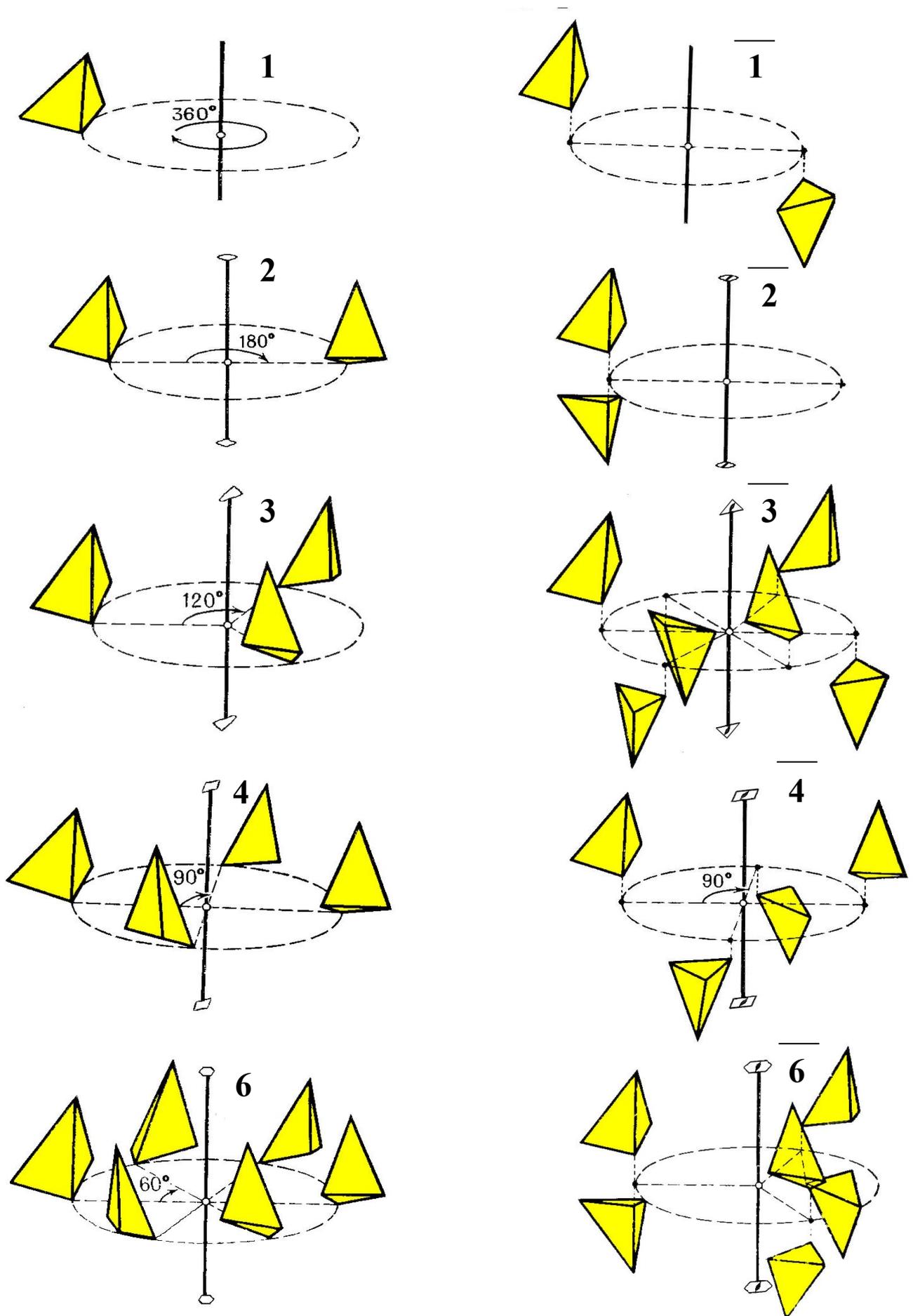


Рис.8. Кристаллографические поворотные и инверсионно-поворотные оси симметрии и их действие на асимметричную фигуру – тетраэдр

Контрольные вопросы

1. Определите понятие «симметрия».
2. Что называется операцией симметрии?
3. Перечислите элементы симметрии и определите понятие каждого элемента.
4. Как классифицируются операции симметрии в зависимости от их характера?
5. Опишите элементы симметрии I и II рода.
6. Какие фигуры называются энантиоморфными, а какие – конгруэнтно равными?
7. Опишите поворотные оси симметрии.
8. Какие оси в кристаллографии являются запрещенными?
9. Опишите зеркальную плоскость симметрии и центр инверсии.
10. Опишите сложные оси симметрии.
11. Что такое «трансляция»?
12. Сформулируйте основной закон симметрии кристаллов.
13. Можно ли сложные оси симметрии отнести к элементам симметрии I или II рода? Почему?
14. Дайте характеристику зеркальных осей симметрии.
15. Охарактеризуйте инверсионные оси симметрии.

Библиографический список

1. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992. 288 с.
2. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., Егоров-Тисменко Ю. К. Геометрическая кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1986. 166 с.
3. Бондарев В. П. Основы минералогии и кристаллографии. М.: Высшая школа, 1978. 192 с.
4. Нардов В. В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Л.: Изд-во ЛГУ, 1974. 138 с.
5. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Теория симметрии кристаллов. <http://students.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=index.htm>
6. Советский энциклопедический словарь/Под ред. А. М. Прохорова. Изд-во «Сов. энциклопедия». М., 1982. 1600 с.
7. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1989. 496 с.
8. Костов И. Кристаллография. М.: Мир, 1965. 528 с.

3. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ И СИНГОНИИ

При описании структуры используется понятие «элементарная ячейка», которая представляет собой элементарный параллелепипед повторяемости. К типам элементарных ячеек обратимся позже, а сейчас рассмотрим, каким образом можно распределить все многообразие кристаллов с соответствующими элементарными ячейками в зависимости от линейных соотношений масштабных единиц измерений по координатным осям. Обозначим единицы измерения масштабов a , b , c вдоль осей – X , Y , Z соответственно. Существуют три возможности распределения – **категории**:

- 1) **высшая категория** ($a=b=c$) характеризуется эквивалентностью координатных осей;
- 2) **средняя категория** ($a=b \neq c$) с частичной эквивалентностью координатных осей;
- 3) **низшая категория** ($a \neq b \neq c$) характеризуется полной неэквивалентностью координатных осей [1].

Перейдем к рассмотрению угловых величин кристаллографических координатных систем. **Сингония** – семейство групп с единой кристаллографической координатной системой [1-3].

К высшей категории принадлежит одна сингония – **кубическая**, в которой $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma$, где α угол между осями Y и Z ; β – угол между осями X и Z ; γ – угол между осями X и Y .

В средней категории выделяют три сингонии: гексагональную ($a=b \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$), тетрагональную ($a=b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$) и тригональную ($a=b \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$) с главными поворотными осями 6-го, 4-го и 3-го порядка соответственно.

В низшей категории выделяют три сингонии: ромбическую с тремя особыми направлениями ($a \neq b \neq c$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$), моноклинную с одним особым направлением ($a \neq b \neq c$, $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma \neq 120^\circ$, где γ – угол моноклинности) и триклинную без особых направлений ($a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$).

Контрольные вопросы

1. Определите понятия «категория» и «сингония».
2. Назовите и охарактеризуйте три категории.
3. Сколько существует сингоний? Дайте характеристику каждой.

Библиографический список

1. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992. 288 с.
2. Васильев Д. М. Физическая кристаллография. М.: Metallurgia, 1981. 248 с.
3. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Теория симметрии кристаллов. <http://students.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=index.htm>

4. СИМВОЛИКА В ТЕОРИИ СИММЕТРИИ

В кристаллографии приняты различные системы обозначений: Браве, Шенфлиса, Германа-Могена [1,2]. Рассмотрим символику в каждой из этих систем.

4.1. Обозначения Браве

Поворотные оси симметрии в символике Браве обозначаются L_n , где L – поворотная ось, n – порядок оси. Таким образом, все возможные поворотные оси можно представить в виде L_1, L_2, L_3, L_4, L_6 . Зеркальная плоскость симметрии обозначается P , центр инверсии – C . Символика Браве проста и удобна для обозначений элементов симметрии. Обозначения точечных групп симметрии складываются из перечислений всех элементов симметрии, – например, группа, содержащая максимальное число элементов симметрии, записывается так: $3L_4 4L_3 6L_2 3P_k 6P_d C$. Нижние индексы k и d указывают, что зеркальная плоскость симметрии – координатная или диагональная соответственно. Наглядная и простая символика Браве не является общепринятой в связи с тем, что она громоздка, не привязана к системе координат, не описывает всех особенностей симметричных преобразований (правые или левые повороты и др.) [2].

4.2. Обозначения Германа-Могена

Обозначения групп симметрии в символике Германа-Могена указывают на расположение кристалла относительно кристаллографических осей координат. Поворотные оси симметрии обозначают цифрами $1, 2, 3, 4, 6$, они обозначают одновременно и порядок оси. Зеркальная плоскость симметрии – m . Инверсионные оси симметрии обозначаются символами $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$, зеркальные оси – $\overset{\circ}{1}, \overset{\circ}{2}, \overset{\circ}{3}, \overset{\circ}{4}, \overset{\circ}{6}$. Символика Германа-Могена является международной [1,2].

Чтобы показать, что ось симметрии расположена перпендикулярно плоскости, ось записывают в числителе, а плоскость – в знаменателе дроби: например $\frac{2}{m}$, $\frac{6}{m}$.

Международные обозначения групп симметрии компактны, указывают на ориентировку кристалла относительно осей координат. Максимальное число позиций в обозначении группы – 3, каждая из них занята неэквивалентными особыми элементами.

В низшей категории элементы симметрии расположены следующим образом: особое направление по оси X – на 1-м месте, особое направление по оси Y – на 2-м месте, особое направление по оси Z – на 3-м месте (табл.1). Так, в группе $mm2$ ромбической сингонии вдоль осей X и Y располагаются нормали к зеркальным плоскостям m , вдоль оси Z – поворотная ось 2-го порядка. В моноклинной сингонии одно особое направление, поэтому будет занята одна позиция. Чтобы показать, как ориентирован кристалл, по двум другим позициям следует расположить оси первого порядка 1 : например, $11\frac{2}{m}$. В триклинной сингонии нет особых направлений, в обозначении группы один символ: поворотная или инверсионная ось первого порядка 1 или $\overset{0}{1}$.

В группах средней категории на первом месте располагается символ, обозначающий особое направление – ось высшего порядка: 3, 4, 6; на втором – побочное координатное направление, совпадающее с осями X и Y ; на третьем – особое направление, образующее с побочными координатными направлениями угол $\alpha/2$, где α – элементарный угол поворота главной оси, – например: 422 , $6mm$ [1].

В группах высшей категории обязательно наличие четырех осей 3-го порядка и символ этих осей 3 записывается на второй позиции, на первой указывается символ особых координатных направлений, на третьей – символ особых диагональных направлений. Примеры: $m3m$, 432 .

4.3. Обозначения Шенфлиса

В символике Шенфлиса не предусмотрено обозначение отдельных элементов симметрии, обозначаются группы симметрии, – например: C_{2v} , D_{3d} [1,2]. Подробно рассмотрим обозначения при выводе точечных групп симметрии.

Комплексы элементов симметрии 32 групп

Категория	Сингония	Группы							
		Примитивная	Инверсионно-примитивная	Центральная	Аксиальная	Планальная	Инверсионно-планальная	Аксиально-центральная	
Низшая	Триклинная	1		$\bar{1}$					
	Моноклинная				2	m			2
	Ромбическая				222	mm2			mmm
Средняя	Тригональная	3			32	3m			$\bar{3}m$
	Гексагональная	6		$\bar{6}$	622	6mm	m2		6/mmm
	Тетрагональная	4		4	422	4mm	2m		4/mmm
Высшая	Кубическая	23		m3	432	3m	$\bar{4}$		m3

Контрольные вопросы

1. Какие системы обозначений приняты в кристаллографии?
2. Как обозначаются поворотные оси симметрии и зеркальная плоскость симметрии в символике Браве?
3. Что обозначают индексы k и l в обозначении плоскости симметрии по Браве?
4. Приведите примеры обозначения групп по Браве.
5. Перечислите недостатки и преимущества символики Браве.
6. Назовите преимущества обозначений по Герману-Могену.
7. Как обозначаются простые и сложные оси симметрии по Герману-Могену?
8. Как в символике Германа-Могена обозначается зеркальная плоскость симметрии и каким образом указывается ее расположение относительно оси симметрии?
9. Назовите максимальное число позиций в обозначении групп по Герману-Могену.
10. Каким образом располагаются элементы симметрии по позициям в символике Германа-Могена в группах низшей, средней и высшей категорий? Приведите примеры.
11. Охарактеризуйте символику Шенфлиса.
12. Приведите примеры названия группы в символике Браве, Германа-Могена и Шенфлиса. Дайте пояснения по каждому символу.

Библиографический список

1. Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П. Основы кристаллофизики. М.: Наука; Физматлит, 1979. 639 с.
2. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992. 288 с.

5. МЕТОДЫ ПРОЕКТИРОВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Датский естествоиспытатель Нильс Стенон в 1669 г. открыл закон постоянства углов – один из основных законов кристаллографии, суть которого в том, что кристаллы одного определенного вещества имеют неизменные углы между соответствующими гранями. Это объясняется механизмом роста кристаллов: рост происходит путем послойного нарастания вещества на поверхность грани. Именно данным законом объясняется одно из макросвойств кристаллов – способность самоограняться [1,2]. Закон постоянства углов используется в методах проектирования кристаллов, главная задача которых – фиксация

граней кристалла относительно элементов симметрии этого кристалла [3,4]. Существуют различные принципы построения проекций кристалла, рассмотрим сферическую, стереографическую и гномостереографическую проекции кристалла.

5.1. Сферическая проекция

Возьмем произвольную сферу с центром в точке O (рис.9). Центр кристалла совместим с центром сферы. Из точки O опустим к одной из граней кристалла перпендикуляр, продолжим его до пересечения со сферой в точке A . Точка пересечения луча, исходящего из центра проекций, со сферой есть **сферическая проекция направления**. Точка A есть сферическая проекция направления OA .

Для определения положения точки на сфере принята градуировка системой параллелей и меридианов. С помощью пары чисел φ и ρ однозначно определяется положение точки на сфере. За **начало отсчета** берется точка пересечения экватора с одним из меридианов, который будет считаться нулевым. Точки пересечения меридианов называются **южным S и северным N полюсами** сферы проекций. Значения φ и ρ есть **сферические координаты**: φ – угол между меридианами, отсчитываемый от нулевого меридиана по часовой стрелке; ρ – угол, отсчитываемый от северного полюса сферы проекций по меридиональной дуге. **Интервалы изменения сферических координат**: $0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$, $0^\circ \leq \rho \leq 180^\circ$ [1-4].

Сферической проекцией плоскости, проходящей через центр проекций, является дуга большого круга, то есть геометрическое место точек, полученное при пересечении плоскости со сферой [4].

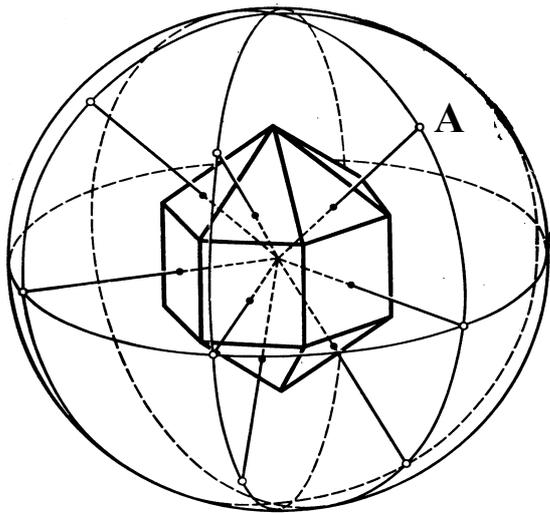
5.2. Стереографическая проекция

Построение стереографической проекции кристалла осуществляется в два этапа: 1) проектирование элементов симметрии кристалла, 2) проектирование граней кристалла.

Стереографический метод проектирования заключается в перенесении сферической проекции на плоскость экватора.

Поместим точку наблюдения в северный или южный полюс проекции: в N , если координата ρ меняется от 90° до 180° , в S , если координата ρ меняется от 0° до 90° (рис.10а). Выбранный полюс – точку S соединим со сферической проекцией – точкой A направления OA . **Стереографической проекцией направления OA** будет точка a – точка пересечения луча SA с экваториальной плоскостью. Стереодиаграмма направлений OA и OB

показана на рис. 10б. Точка верхней полусферы обозначена символом \circ , точка нижней полусферы – символом \times .

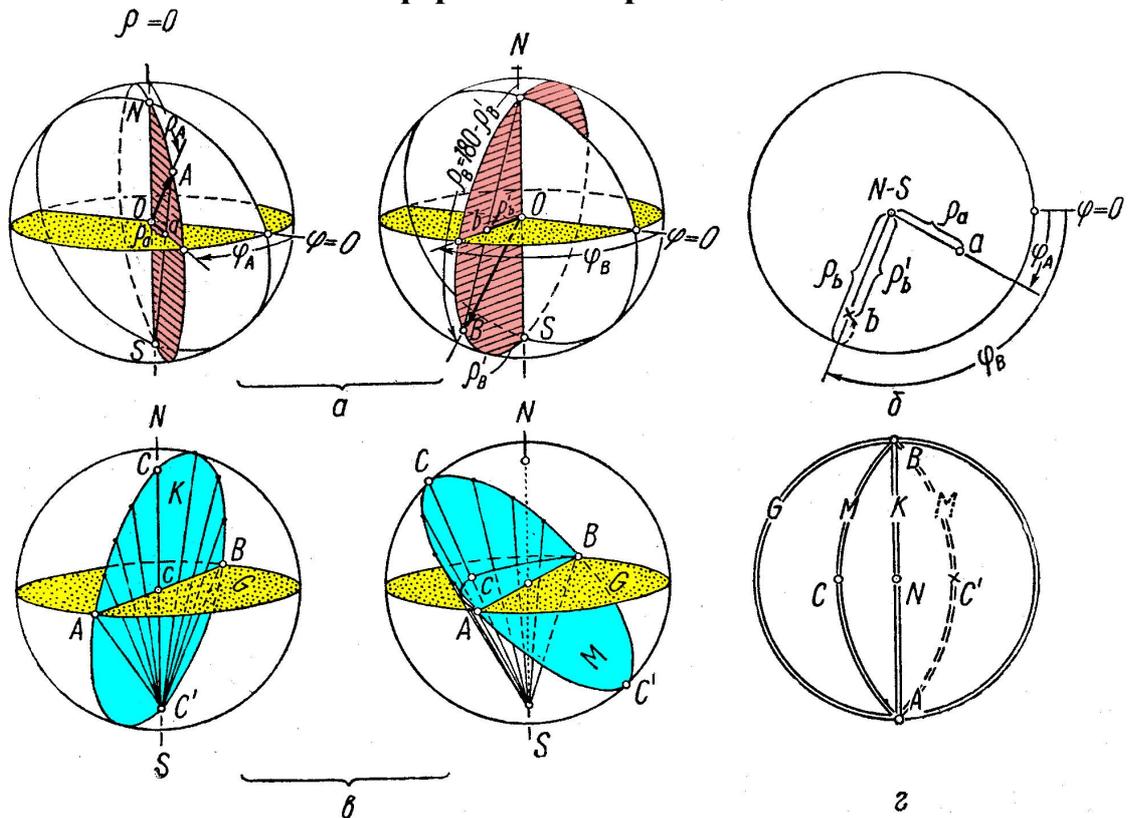


Угловые величины в неискаженном виде.
Закон постоянства углов. А – сферический полюс направления. Координаты ρ, φ :

$$0^\circ \leq \varphi \leq 360^\circ$$

$$0^\circ \leq \rho \leq 180^\circ$$

Рис. 9. Сферическая проекция.



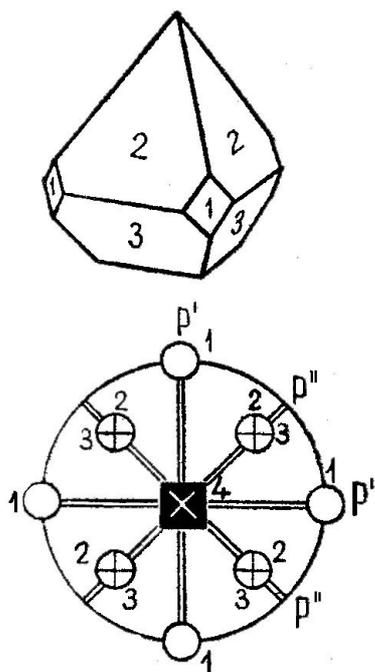
К методу стереографического проектирования:
 а – построение сферической и стереографической проекций направлений: $\rho < 90^\circ$ (вектор А) и $\rho > 90^\circ$ (вектор В);
 б – стереограмма направлений А и В;
 в – построение сферической и стереографической проекций плоскости, проходящей через центр сферы проекций;
 г – стереограмма таких плоскостей.

Рис. 10. Стереографическая проекция.

Для построения *стереографической проекции плоскости* точки дуги (сферической проекции этой плоскости) нужно соединить с соответствующими полюсами (рис. 10в). В результате пересечения отрезков с экваториальной плоскостью получим стереографическую проекцию проектируемой плоскости в виде дуг, – например, ACB и $AC'B$ на экваториальной плоскости. Дуги ACB и $AC'B$ будут стереографической проекцией плоскости северной и южной половин искомой проектируемой плоскости $ACBC'$ (рис.10г) [4].

5.3. Гномостереографическая проекция

Гномостереографической проекцией грани является проекция нормали к этой грани, *гномостереографической проекцией ребра* – проекция соответствующей перпендикулярной к грани плоскости [3,4]. На рис. 11 представлен кристалл тетрагональной сингонии и его стереограмма. Кристалл относится к точечной группе симметрии L_4P . Ось четвертого порядка перпендикулярна плоскости чертежа, Зеркальные плоскости симметрии пересекаются по линии оси симметрии. Неэквивалентность плоскостей показана одним и двумя штрихами в виде верхнего индекса.



Грани кристалла заменены нормальными, опущенными на них из центра тяжести кристалла, ребра – перпендикулярными к ним плоскостями, проходящими через центр сферы проекций.

Общий вид и стереограмма кристалла симметрии $L_4P = L_4P'2P''$.

Рис. 11. Гномостереографическая проекция.

Контрольные вопросы

1. Какой закон используется при проектировании кристаллов? Сформулируйте этот закон. Кто является его автором?
2. Какие типы проекций кристалла Вы знаете?
3. Какая задача является главной в проектировании кристаллов?
4. Как получить сферическую проекцию направления?
5. Какая градуировка принята для сферы?
6. Что является началом отсчета в сферической проекции?
7. Где расположены северный и южный полюсы проекции?
8. Какие величины являются сферическими координатами точки?
9. В каких интервалах могут меняться значения сферических координат?
10. Что является сферической проекцией плоскости?
11. Назовите два этапа построения стереографической проекции.
12. В чем заключается стереографический метод проектирования?
13. Что является стереографической проекцией направления?
14. В каком случае для наблюдения выбирается северный полюс проекции, в каком – южный?
15. Что является стереографической проекцией плоскости?
16. Назовите, что является гномостереографическими проекциями грани и ребра?

Библиографический список

1. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Теория симметрии кристаллов. <http://students.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=index.htm>
2. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., Егоров-Тисменко Ю. К. Геометрическая кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1986. 166 с.
3. Нардов В. В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Л.: Изд-во ЛГУ, 1974. 138 с.
4. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992. 288 с.

6. ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Совокупность операций макросимметрии образует *точечную группу симметрии*. Количество точечных групп симметрии конечно – их 32 (табл. 1,2). Точечные группы симметрии можно разделить на два типа: группы с одним или несколькими единичными

направлениями E (27 групп); группы без единичных направлений (5 групп). **Единичное направление** – не повторяющееся какими-либо операциями симметрии данной группы [1].

В теории симметрии используются законы теории групп. Вспомним аксиомы теории групп.

6.1. Групповые аксиомы

Если в множестве элементов $\{g_1, g_2, \dots\}$ выполняются четыре определенных правила (групповые аксиомы), то оно называется группой.

1. В группе G определено «групповое действие» – «умножение». $\forall g_i \in G, g_j \in G$
 $\exists g_k \in G: g_i g_j = g_k$

2. Ассоциативность.

$$\forall g_i \in G, g_j \in G, g_k \in G: g_i (g_j g_k) = (g_i g_j) g_k$$

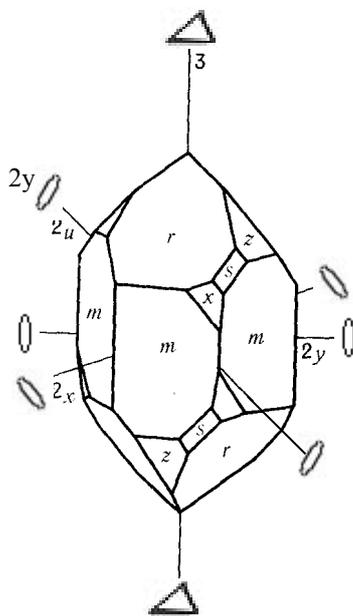
3. Единственный элемент.

$$\exists e \in G: \forall g_i \in G \Rightarrow e g_i = g_i$$

4. Обратный элемент.

$$\forall g_i \in G \exists g_i^{-1}: g_i g_i^{-1} = e$$

Рассмотрим применение аксиом на примере точечной группы симметрии L_33L_2 (рис. 12).



Операции симметрии:

- $g_0 = e$ (операция «отождествления» – единичная)
- $g_1 = 3$ (поворот на $2\pi/3$ против час. стрелки вокруг 3)
- $g_2 = 3^2$ (поворот на $4\pi/3$ против час. стрелки вокруг 3)
- $g_3 = 2x$ (поворот на π вокруг 2x)
- $g_4 = 2y$ (поворот на π вокруг 2y)
- $g_5 = 2u$ (поворот на π вокруг 2u)
- $g_1 g_1 = g_1^2 = g_2$
- $g_1 g_4 = g_5$
- $g_1 = g_2^{-1}$
- $g_3 = g_3^{-1}$
- $g g^{-1} = e$
- $g_1 g_2 = e$
- $g_1^3 = e$
- $g_4^2 = e$

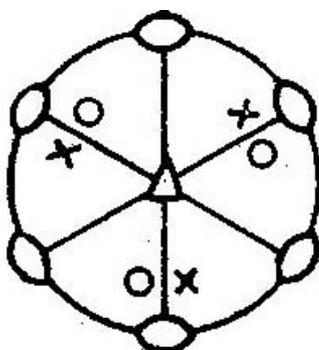


Рис.12. Точечная группа 32.

Обозначим за g_0 операцию «отождествления»; g_1 – поворот на $2\pi/3$ против часовой стрелке вокруг оси 3-го порядка; g_2 – поворот на $4\pi/3$ против часовой стрелке вокруг оси 3-го порядка; g_3 – поворот на π вокруг оси второго порядка 2_x ; g_4 – поворот на π вокруг оси 2_y ; g_5 – поворот на π вокруг оси 2_z . Различные операции симметрии в свете теории групп показаны на рис. 12.

6.2. Вывод точечных групп симметрии

с единичными направлениями в обозначениях по Шенфлису

Единичное направление может быть представлено простой или сложной осью симметрии. Символика Шенфлиса позволяет обозначать группу симметрии одной буквой с соответствующими индексами. Это обозначение включает полную характеристику элементов симметрии данной группы, объединив родственные подгруппы под обозначением одинаковой буквой [1-3]. Рассмотрим вывод точечных групп в обозначениях Шенфлиса.

Группы C_n – группы с единственной поворотной осью, где n – порядок оси. C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 – группы, имеющие единственную поворотную ось симметрии первого, второго, третьего, четвертого и шестого порядка соответственно.

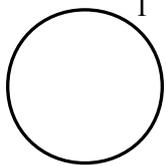
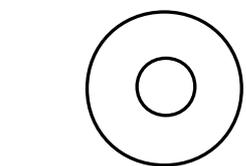
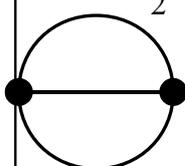
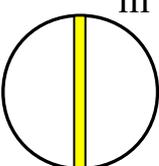
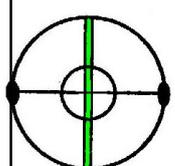
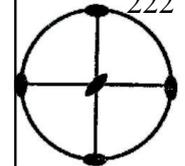
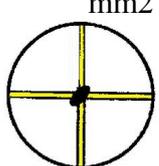
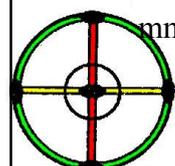
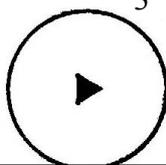
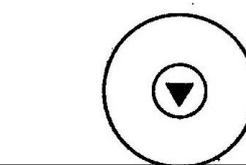
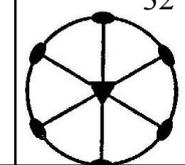
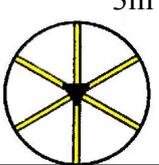
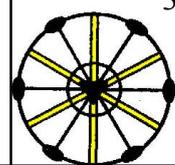
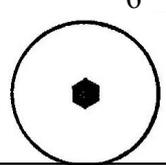
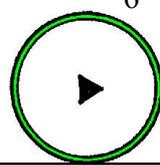
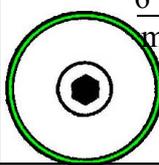
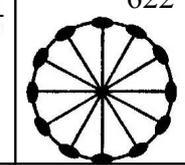
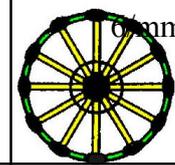
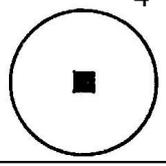
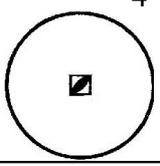
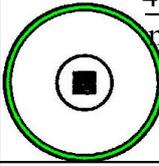
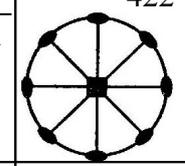
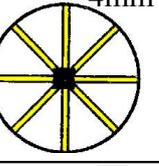
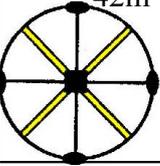
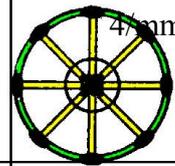
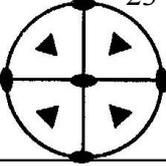
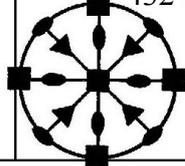
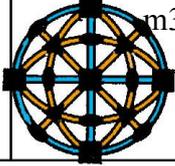
Для обозначения зеркальных плоскостей симметрии и их расположения относительно главного направления Шенфлис ввел индексы: h – горизонтальная плоскость, v – вертикальная плоскость, d – диагональная плоскость. Плоскость h расположена перпендикулярно главному направлению, v – вдоль главного направления, d делит угол между горизонтальными осями 2-го порядка пополам, а оси 2-го порядка расположены перпендикулярно главному направлению.

Группы C_{nh} – группы с единственной осью симметрии n – порядка и зеркальной плоскостью симметрии, перпендикулярной главной оси. Это группы симметрии $C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$. В группе C_{1h} присутствует один элемент симметрии зеркальная плоскость и не имеет значения, вертикально или горизонтально она расположена, поэтому эту группу принято обозначать C_s – группа с зеркальной плоскостью безразличной ориентации (s от немецкого «spiegel» – зеркало).

Таким образом, особняком стоит группа C_s .

Группы C_{nv} – группы с единственной осью симметрии n – порядка и вертикальными зеркальными плоскостями, количество которых в группе равно n . Это группы $C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$. Группа C_{3v} по Браве имеет вид L_33P .

Стереографические проекции элементов симметрии 32 групп

Группы						
Примитивная	Инверсионно-примитивная	Центральная	Аксиальная	Плланальная	Инверсионно-плланальная	Аксиально-центральная
						
						
						
						
						
						
						

Группы D_n – группы с побочными осями второго порядка, перпендикулярными единственной поворотной оси симметрии, порядок которой указывает индекс n . $D_2, D_3, D_4,$

D_6 – точечные группы симметрии, имеющие единственную поворотную ось 2-го, 3-го, 4-го, 6-го порядка соответственно и оси второго порядка, перпендикулярные к единственной оси. В обозначениях Браве это группы: $3L_2, L_33L_2, L_44L_2, L_66L_2$.

Группы D_{nh} – группы с единственной осью n порядка, перпендикулярно к которой расположены n осей второго порядка и зеркальная плоскость симметрии. Это группы $D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}$. В результате взаимодействия элементов симметрии по теореме Эйлера в этих группах появятся и вертикальные плоскости. Так, группа D_{3h} в обозначениях Браве имеет вид $L_33L_23P'P_{\perp}$.

Далее целесообразно было бы рассмотреть группы D_{nv} , но в группах D_{nv} индекс v теряет смысл. Дело в том, что расположение вертикальных плоскостей в группах D неоднозначно: плоскости могут либо совпадать с побочными осями второго порядка, либо делить угол между побочными осями пополам. В первом случае неизбежно возникнет горизонтальная плоскость h как результат взаимодействия вертикальной плоскости и лежащей в ней поворотной оси второго порядка, и мы получим группы D_{nh} , описанные в предыдущем абзаце. Во втором случае для того, чтобы подчеркнуть диагональное расположение вертикальных осей, введен индекс d , то есть такие группы обозначены D_{nd} .

Группы S_n – группы с единственной зеркальной осью симметрии (от немецкого «spiegelachse» – зеркальная ось). Если зеркальной оси предпочитают ее инверсионный аналог, то группу обозначают C_{ni} , где n – порядок сложной оси. Например: $S_2=C_i, S_6=C_{3i}$.

Следует особо подчеркнуть, что Шенфлис располагал главную единственную ось симметрии вертикально и в соответствии с этим расположением оси обозначал h и v – вертикальные и горизонтальные плоскости. Обозначения групп по Шенфлису не изменятся, если главная единственная ось будет расположена по-другому.

6.3. Вывод точечных групп симметрии без единичных направлений в обозначениях по Шенфлису

Существуют два способа вывода точечных групп симметрии без единичных направлений. Первый заключается в постепенном добавлении новых элементов симметрии и получении новых более сложных групп, второй – в постепенном исключении элементов симметрии из самой высокосимметричной группы $3L_44L_36L_23P_{\kappa}6P_{\delta}C$ (Браве) и получении групп с меньшим количеством элементов симметрии. Воспользуемся вторым способом.

Известно, что сочетание нескольких осей высшего порядка может быть таким, как в правильных многогранниках: тетраэдре, гексаэдре, октаэдре, правильном додекаэдре и икосаэдре («Платоновы тела») [1]. Исключим многогранники с осями 5-го порядка, запрещенными в кристаллографии, останутся три первых многогранника.

Группы O содержат полный набор осей симметрии – осевой набор гексаэдра и октаэдра $3L_44L_36L_2$.

Группы T – комплекс $4L_33L_2$, в этих группах нет диагональных осей симметрии, есть набор осей симметрии кубического тетраэдра.

Если в группе имеются плоскости симметрии, то координатные плоскости обозначаются индексом h , а диагональные – индексом d , если присутствуют оба типа плоскостей, то записывается символ h .

Сопоставим обозначения точечных групп симметрии без единичных направлений по Шенфлису и по Браве.

Группа O_h содержит весь набор элементов симметрии, по Браве группа обозначается $3L_44L_36L_23P_κ6P_дC$.

Если из группы O_h отбросить все плоскости симметрии, то получим чисто осевой набор, составляющий группу O , эта группа по Браве обозначается $3L_44L_36L_2$.

Если из группы O_h отбросить 6 диагональных плоскостей, то понизится порядок координатных осей: $3L_4 \rightarrow 3L_2$. В этом случае получим группу $3L_24L_33P_κC$, которая по Шенфлису обозначается T_h .

Если из группы O_h отбросить три координатные плоскости, то получим группу, содержащую три инверсионные оси четвертого порядка, 4 поворотные оси третьего порядка, 6 диагональных плоскостей – это группа симметрии тетраэдра T_d .

Если в последних двух группах оставить только оси симметрии, то получим младшую группу T , которая по Браве обозначается $3L_24L_3$.

Все перечисленные точечные группы симметрии без единичных направлений возможны только в кристаллах кубической сингонии. Таких групп пять, обязательными элементами симметрии в них являются 4 оси третьего порядка.

6.4. Матричное представление симметрических операций и групп симметрии

Итак, 32 точечные группы – это возможные сочетания симметрических операций кристаллических многогранников. С помощью точечных групп описывают внешнюю

форму кристалла. В табл. 3 приведены обозначения точечных групп симметрии в разных символиках [3].

Для однозначного описания макросимметрии кристалла служат кристаллографические координатные оси X, Y, Z , правила выбора которых изложены в п. 4.2 на страницах 24-26. Для описания физических свойств кристаллов используются ортогональные кристаллофизические оси X_1, X_2, X_3 , правила выбора которых приведены в табл. 4 [3].

Кристаллофизические и кристаллографические координатные системы выбирают всегда правыми, углы между соответствующими положительными направлениями кристаллографических и кристаллофизических осей $< 90^\circ$. Направления кристаллофизических и кристаллографических осей совпадают только в ромбической, тетрагональной и кубической сингониях. Углы между новыми и старыми осями определяются направляющими косинусами. C_{ij} ($i, j=1,2,3$), индекс i относится к новым осям, индекс j – к старым.

Любое симметрическое преобразование можно записать в матричном виде.

Рассмотрим на примере группы mmm матричное представление некоторых операций

симметрии. Операция отражения в плоскости $m \perp X_3$ может быть записана в виде:

$$C_{ij} | m \perp X_3 | : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Операция инверсии в центре симметрии может быть записана в виде матрицы:

$$C_{ij} | \bar{1} | : \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Таблица 3

Обозначения 32 групп симметрии

Сингония	Обозначения		
	интернациональные	по Шенфлису	формула симметрии

Триклинная	1	C_1	L_1
	$\bar{1}$	C_i	C
Моноклинная	2	C_2	L_2
	m	C_s	P
	2/m	C_{2h}	L_2PC
Ромбическая	222	D_2	$3L_2$
	mm2	C_{2v}	L_22P
	mmm	D_{2h}	$3L_23PC$
Тетрагональная	4	C_4	L_4
	4/m	C_{4h}	L_4PC
	422	D_4	L_44L_2
	4mm	C_4	L_44P
	4/mmm	D_{4h}	L_44L_25PC
	$\bar{4}$	S_4	$L_{\bar{4}}$
	$\bar{4}2m$	D_{2d}	$L_{\bar{4}}2L_22P$
Тригональная	3	C_3	L_3
	$\bar{3}$	C_{3i}	L_3C
	32	D_3	L_33L_2
	3m	C_{3v}	L_33P
	$\bar{3}m$	D_{3i}	L_33L_23PC
Гексагональная	6	C_6	L_3
	6/m	C_{6h}	L_6PC
	622	D_6	L_66L_2
	6mm	C_{6v}	L_66P
	6/mmm	D_{6h}	L_66L_27PC
	$\bar{6}$	C_{3h}	L_3P
	$\bar{6}m2$	D_{3h}	L_33L_24P

Продолжение таблицы 3

Кубическая	23	T	$4L_33L_2$
	m3	T_h	$4L_33L_23PC$
	432	O	$4L_33L_46L_2$
	$\bar{4}3m$	T_d	$4L_33L_{\bar{4}}6P$
	m3m	O_h	$4L_33L_46L_29PC$

Правила выбора кристаллофизических осей

Сингония	X_3	X_2	X_1
Триклинная	[001]	В плоскости, перпендикулярной к направлению [001]	
Моноклинная	[001]	[010]	В плоскости (100)
Ромбическая	[001]	[010]	[100]
Тетрагональная	[001]	[010]	[100]
Тригональная	[0001]	$[01\bar{1}0]$	$[2\bar{1}\bar{1}0]$
Гексагональная	[0001]	$[01\bar{1}0]$	$[2\bar{1}\bar{1}0]$
Кубическая	[001]	$[01\bar{1}0]$	[100]
		[010]	

Матрица поворота на 360° вокруг оси X_3 имеет вид: $C_{ij}(X_3, 360^\circ) : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Контрольные вопросы

1. Определите понятие «точечная группа симметрии».
2. Что называется единичным направлением?
3. Назовите количество точечных групп симметрии.
4. Сколько существует точечных групп симметрии с единичным направлением и сколько – без единичных направлений?
5. Какие законы используются в теории симметрии?
6. Перечислите аксиомы теории групп.
7. Поясните применение групповых аксиом на примере точечной группы симметрии 32.
8. Дайте краткую характеристику символике Шенфлиса.

9. Опишите группы C_n .
10. Что обозначают индексы h , ν и d в обозначениях Шенфлиса?
11. Дайте характеристику группам C_{nh} .
12. Из каких элементов симметрии состоит группа C_s ?
13. Расскажите о группах C_{nv} .
14. Какие новые элементы симметрии появляются в группах D_n по сравнению с группами C_n ?
15. Обоснуйте, почему индекс ν теряет смысл в группах D_n ?
16. Опишите группы D_{nh} и группы D_{nd} .
17. Дайте характеристику группам S_n и группам C_{ni} .
18. Используя таблицу 2, поставьте в соответствие каждой из 32 точечных групп в символике Германа-Могена обозначения по Браве и по Шенфлису.
19. Опишите два способа вывода точечных групп симметрии без единичных направлений.
20. Какие элементы симметрии характерны для групп O и T ?
21. Что обозначают индексы h и d в группах без единичных направлений?
22. Какая группа по Шенфлису содержит максимальный набор элементов симметрии?
23. Какую группу Вы получите, если из группы O_h отнимите все плоскости симметрии?
24. Какая группа получится, если из группы O_h отбросить все диагональные плоскости?
25. Какая группа получится, если из группы O_h отбросить все координатные плоскости?
26. Как по Шенфлису обозначается младшая группа симметрии без единичных направлений и какие элементы симметрии она содержит?
27. Какие элементы симметрии являются обязательными в группах кубической сингонии?
28. Дайте характеристику кристаллографической и кристаллофизической системам координат. Для каких целей используется каждая из систем?
29. Приведите примеры симметрических преобразований в матричном виде.

Библиографический список

1. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992. 288 с.

2. Современная кристаллография в 4 т/ Под ред. Б. К. Вайнштейна Т.4. Шувалов Л.А., Урусовская А.А., Желудев И.С. и др. Физические свойства кристаллов. М.: Наука, 1981. 496 с.

3. Переломова Н.В., Тагиева М.М. Задачник по кристаллофизике. М.: Наука, 1972. 192 с.

7. ЭЛЕМЕНТАРНАЯ ЯЧЕЙКА

Характеристической называется ячейка, наиболее полно отражающая особенности трехмерной структуры. *Характеристическая ячейка* – это параллелепипед, построенный на трех некопланарных кратчайших трансляционных векторах, совпадающих с особыми направлениями максимальной симметрии. Если характеристическая ячейка выбирается по трем правилам, она называется *элементарной ячейкой (ячейкой Браве)*. Правила выбора элементарной ячейки [1,2]:

- 1) объем ячейки должен быть минимальным;
- 2) симметрия ячейки должна соответствовать симметрии кристалла;
- 3) ячейка должна содержать максимально возможное число прямых углов между гранями.

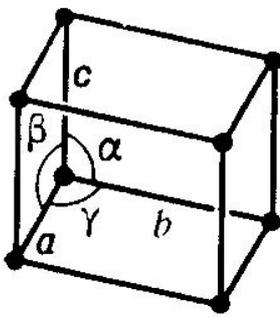
Существуют различные типы ячеек Браве [1,2]. *Примитивная ячейка P* – ячейка, в вершинах которой расположены атомы. Если атомы расположены не только в вершинах, то ячейка называется *непримитивной*. Дополнительные узлы в ячейке находятся либо в центре граней, либо в центре объема ячейки, поэтому такие ячейки называют *центрированными*. Если в ячейке центрирована пара граней, то ячейку называют *базоцентрированной* и обозначают в зависимости от того, какие грани центрированы (рис. 13):

C, если центрированы грани $\{001\}$;

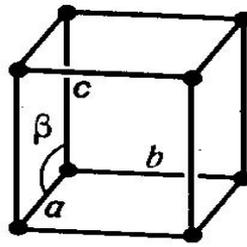
A, если центрированы грани $\{100\}$;

B, если центрированы грани $\{010\}$.

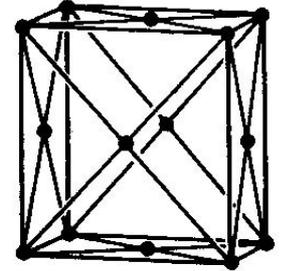
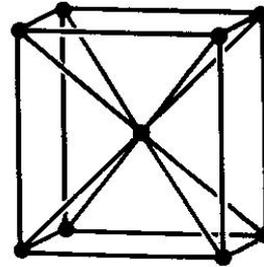
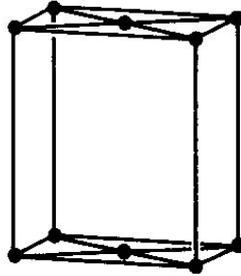
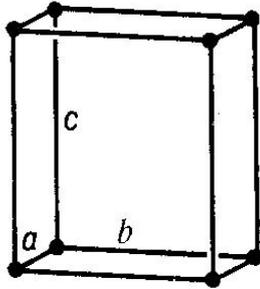
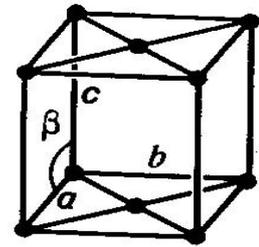
Объемноцентрированная ячейка I – ячейка с дополнительным узлом в центре объема, *гранецентрированная ячейка F* – с дополнительными узлами в центрах всех граней. В гексагональной сингонии возможны два типа ячеек:



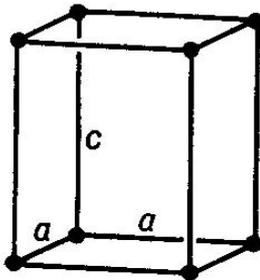
Триклинная



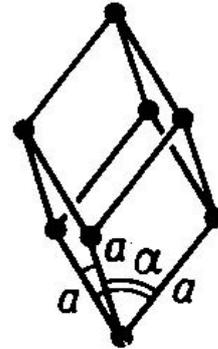
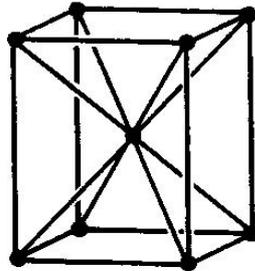
Моноклинные



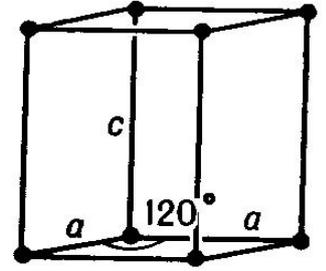
Ромбические



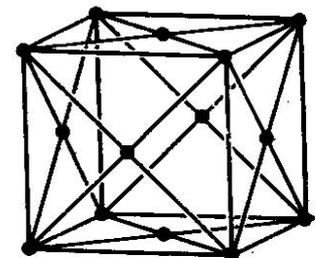
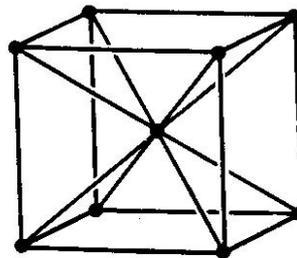
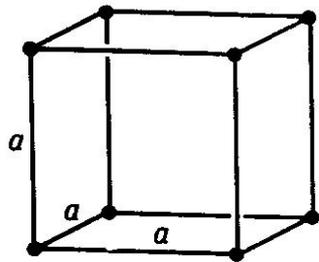
Тетрагональные



Тригональная

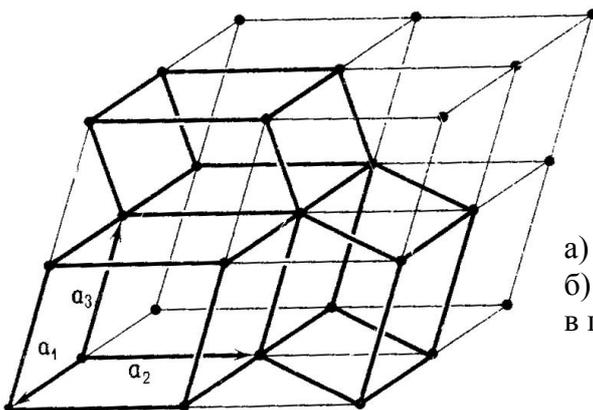


Гексагональная



Кубические

а)



б)

Рис. 13. Элементарные ячейки.

- а) 14 типов элементарных ячеек;
 б) возможность различного выбора элементарной ячейки в пространственной решетке.

примитивная и *дважды центрированная ячейка R (ромбоэдрическая)* (рис. 13).

На рис. 14 изображены структуры различных по составу соединений, имеющих один тип ячейки Браве – гранецентрированную ячейку: алмаз, поваренная соль NaCl , хлорплатинат калия K_2PtCl_6 . Известны модификации углерода: графит и алмаз, структуры которых показаны на рис. 15. Структура борнитрида, кристаллизующегося в гексагональной сингонии, аналогична структуре углерода. Учеными было высказано предположение о возможности существования модификации BN со структурой алмаза, а позже это соединение было синтезировано [3,4].

На рис. 16 изображены структуры молекул C_{60} , C_{70} и соединения фуллерит, имеющего гранецентрированную ячейку, в вершинах и центрах граней которой расположены гигантские углеродные молекулы.

Вывел 14 типов элементарных ячеек Огюст Браве, он выделил четыре типа и распределил ячейки по 6 сингониям. Впоследствии была выделена тригональная сингония и число сингоний доведено до 7 [5].

Контрольные вопросы

1. Определите понятие «характеристическая ячейка».
2. Определите понятие «элементарная ячейка».
3. Перечислите правила выбора элементарной ячейки.
4. Назовите все возможные типы элементарных ячеек.
5. Какие элементарные ячейки возможны в кристаллах гексагональной сингонии?
6. Какие грани центрированы в ячейках А, В, С? Как называются эти ячейки?
7. Дайте характеристику примитивной и непримитивной ячейкам.
8. Охарактеризуйте центрированные ячейки.
9. Приведите примеры соединений, имеющих один тип ячейки Браве.
10. Расскажите об известных Вам модификациях углерода, их структурах, элементарных ячейках.
11. Какая ячейка называется объемноцентрированной и как она обозначается?
12. Дайте характеристику ячейки F. В каких сингониях возможен этот тип ячейки?
13. Какие ячейки Браве возможны в кристаллах кубической сингонии?
14. В каких сингониях возможны базоцентрированные ячейки?
15. Какие типы ячеек выделил Огюст Браве?

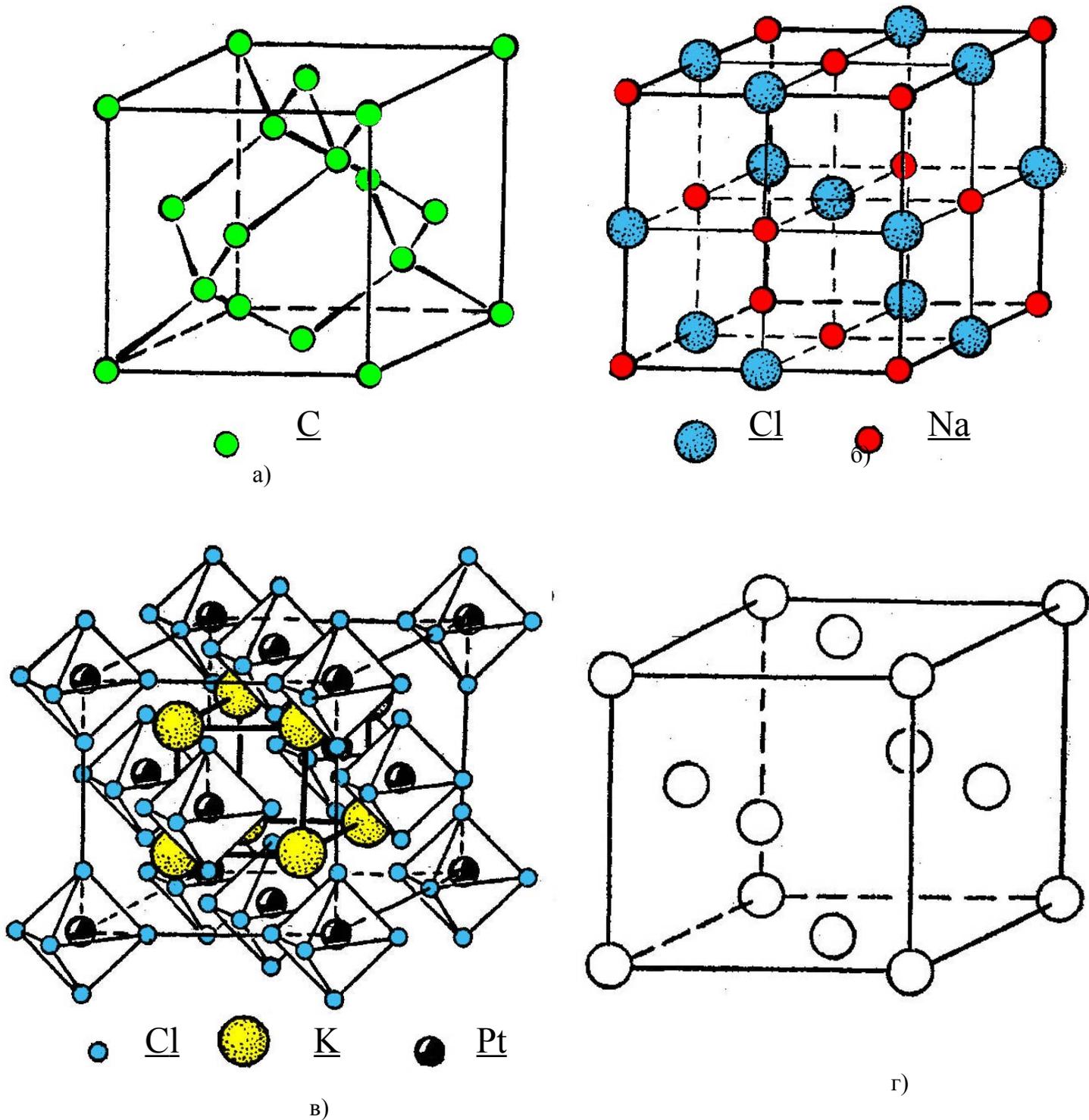
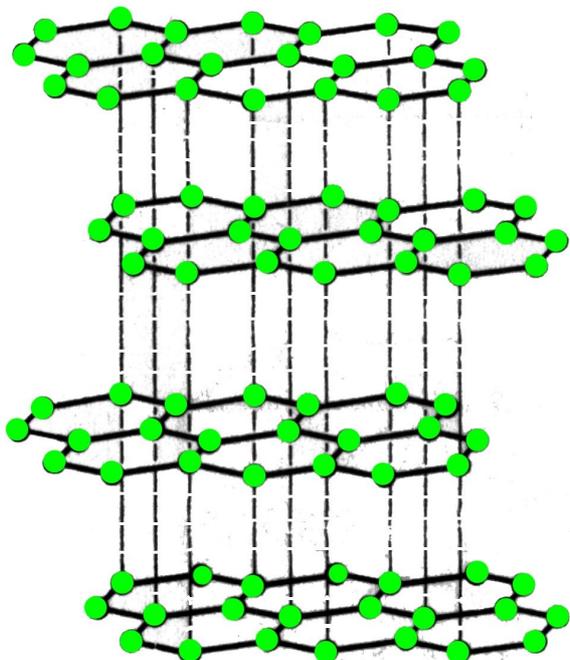
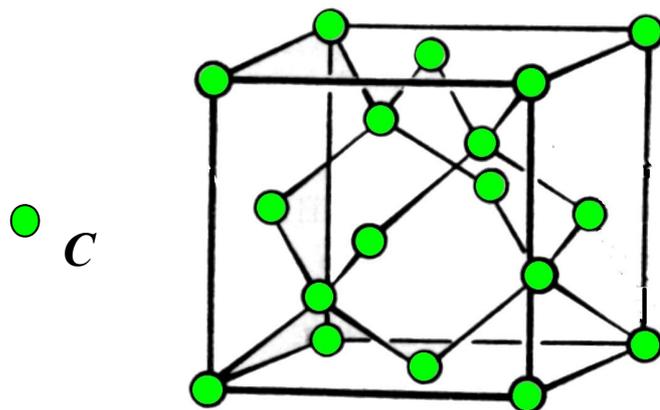


Рис. 14. Трехмерная периодичность в структурах алмаза (а), хлористого натрия (б) и хлорплатината калия K_2PtCl_6 (в) описывается одной и той же решеткой (г).

Графит

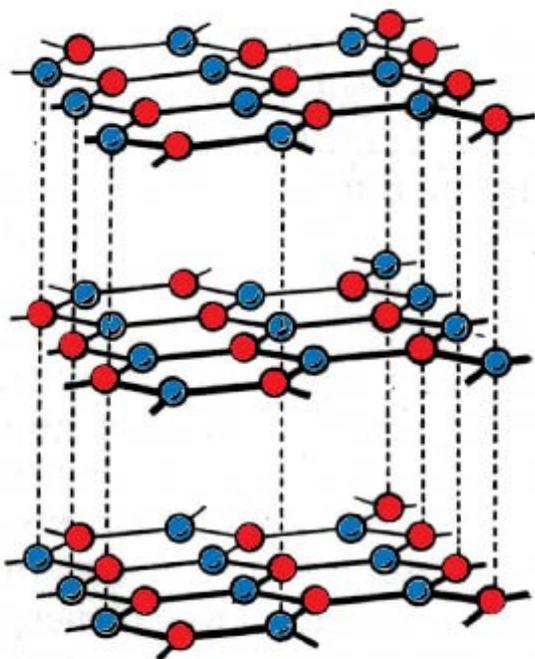


Алмаз

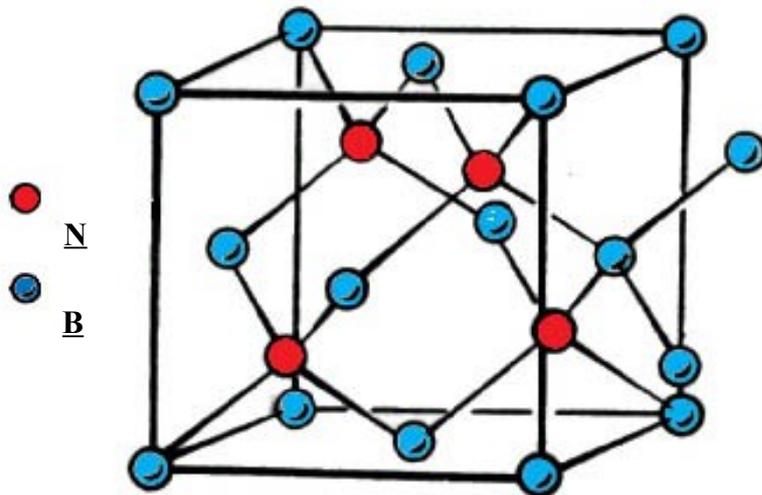


● C

Гексагональный борнитрид

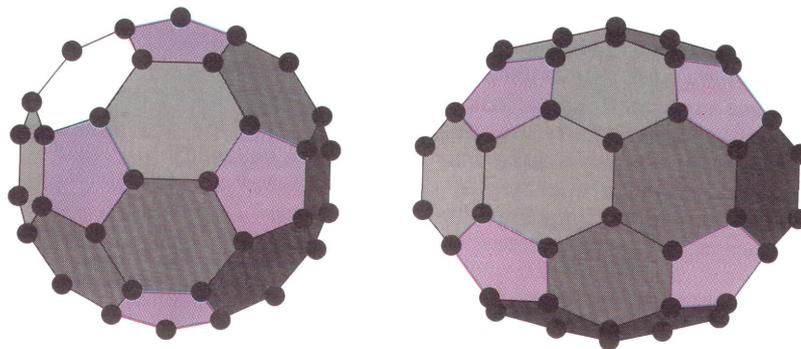


Кубический боразон

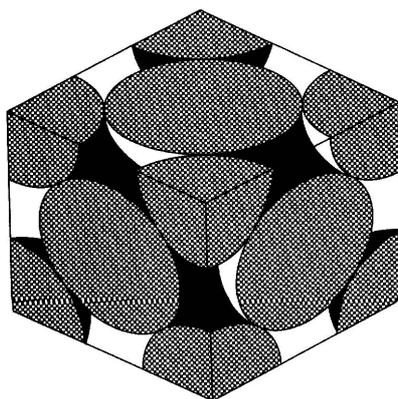


● N
● B

Рис.15. Соединения с подобными структурами.



а)



б)

Рис. 16. Структуры фуллеренов и фуллерита:

а) структура фуллеренов C_{60} , C_{70} ;

б) F- ячейка фуллерита.

Библиографический список

1. Шубников А.В. У истоков кристаллографии. М.: Наука, 1972. 51 с.
2. Белов Н. В. Структурная кристаллография. М.: Изд-во АН СССР, 1951. 87 с.
3. Смит Г. Драгоценные камни. М.: Мир, 1980. 587 с.
4. Васильев Л. А., Белых Э. П. Алмазы, их свойства и применение. М.: Недра, 1983. 101 с.
5. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. 399 с.

8. СИМВОЛЫ ГРАНЕЙ КРИСТАЛЛОВ

Символы граней кристалла предназначены для определения положения грани в пространстве. Для фиксирования произвольной грани в пространстве необходимо выбрать

систему координат, измерить отрезки, которые грань кристалла отсекает по координатным осям. На рис. 17 грань n отсекает отрезки OA , OB , OC по координатным осям OX , OY , OZ соответственно. В процессе роста кристалла положение грани будет меняться, и в определенный момент времени грань n будет характеризоваться параметрами OA_l , OB_l , OC_l . Использовать в расчетах абсолютную величину параметров грани неудобно вследствие неустойчивости данной характеристики [1,2].

8.1. Индексирование. Закон Гаюи

На рис. 18 изображены две грани: грань ABC произвольного положения и грань $A_eB_eC_e$, называемая единичной гранью и расположенная по определенным правилам выбора единичной грани. Отношения параметров граней ABC и $A_eB_eC_e$ равны $a:b:c$ и $a_e:b_e:c_e$ соответственно. В этом случае расположение грани ABC можно выразить двойным

отношением параметров $\frac{a}{a_e} : \frac{b}{b_e} : \frac{c}{c_e}$, при этом для кристаллов в кристаллографической

системе координат эти отношения будут рациональными, и, следовательно их отношение

можно привести к отношению целых взаимно простых чисел $\frac{a}{a_e} : \frac{b}{b_e} : \frac{c}{c_e} = p : q : r$. Такая

особенность огранки кристаллов была замечена в 1783 г. французским кристаллографом и минералогом Р. Ж. Гаюи и сформулирована им в виде **закона рациональности отношений параметров**: двойные отношения параметров двух любых граней кристалла равны отношению целых небольших взаимно простых чисел [2,3]. Этот закон называется также законом целых чисел, или законом Гаюи. Этот закон – следствие трехмерной периодичности расположения материальных частиц в структуре кристаллов.

Числа p , q , r , заключенные в круглые скобки, называются **индексами Вейса (pqr)**, они характеризуют положение грани в пространстве относительно кристаллографической системы координат. Использование индексов Вейса в расчетах оказалось неудобным вследствие того, что грани, параллельные координатной оси, имеют индекс ∞ . В связи с этим В. Миллер в 1839 г. предложил использовать индексы h , k , l :

$$h : k : l = \frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{r} = \frac{a_e}{a} : \frac{b_e}{b} : \frac{c_e}{c}.$$

Числа h , k , l , заключенные в круглые скобки, называются **символами Миллера (hkl)**, или символами грани. В символах Миллера грань, параллельная координатной оси, будет иметь индекс, равный нулю. На рис. 18 индексы Вейса для произвольной грани $(pqr)=(136)$, символы Миллера $(hkl)=(621)$, для единичной грани $(hkl)=(111)$. Знак «минус»

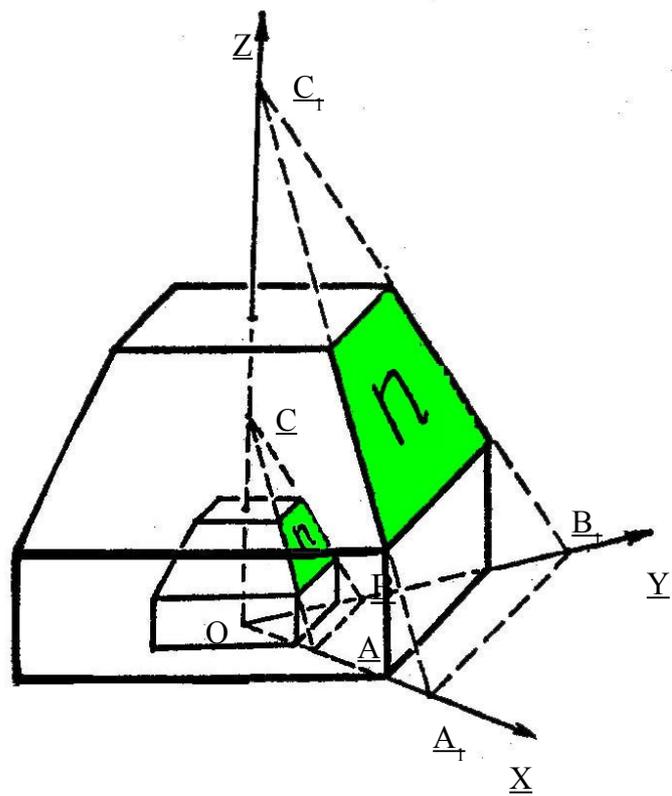


Рис.17. Положение граней растущего кристалла.

Грань n «малого» и «большого» кристаллов пересекает координатные оси в одинаковом отношении

$$OA:OB:OC = OA_1:OB_1:OC_1.$$

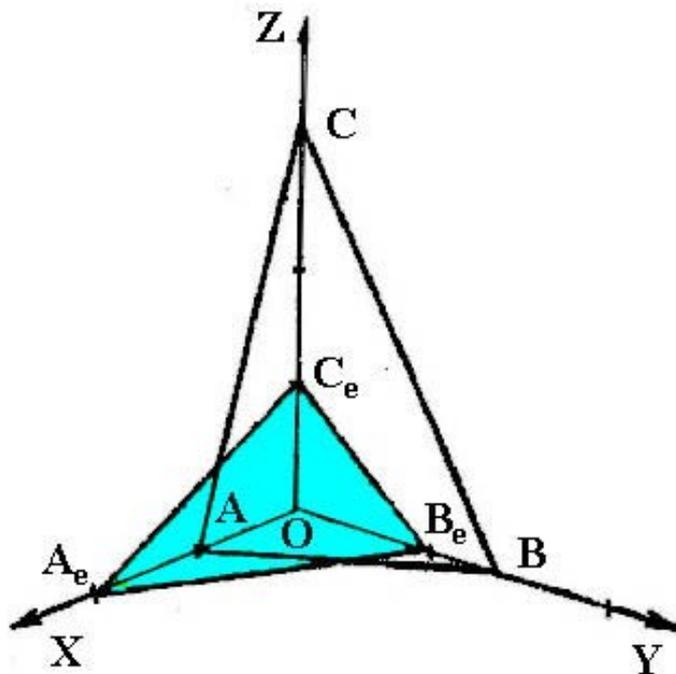


Рис.18. Расположение произвольной грани относительно единичной грани.

$$OA:OB:OC = a : b : c \quad OA_e:OB_e:OC_e = a_e : b_e : c_e$$

$$p : q : r = \frac{1}{2} : \frac{3}{2} : 3 = 1 : 3 : 6 \quad h : k : l = \frac{1}{1} : \frac{1}{3} : \frac{1}{6} = 6 : 2 : 1$$

для отрицательных значений символа обозначается чертой сверху в символах Миллера и индексах Вейса, – например: $(1\bar{3}2)$. Процесс присвоения грани тройки символов, характеризующих ее расположение в пространстве относительно кристаллографической системы координат, называется *индицированием* [2-4].

8.2. Выбор единичной грани в кристаллах разных сингоний

В сингониях низшей категории параметры единичной грани по всем трем осям в общем случае различны. Единичная грань (111) будет отсекают по координатным осям разные по длине отрезки $a_e \neq b_e \neq c_e$, параметры единичной грани указывают только на то, что именно эта грань выбрана в качестве реперной, ее параметры служат относительными единицами измерения параметров остальных граней [2].

В кристаллах средней категории равномасштабными будут оси OX и OY , поэтому запись (111) указывает на равенство первых двух параметров $a_e = b_e \neq c_e$. В гексагональной и тригональной сингониях вследствие поворота в горизонтальной плоскости на 120° вокруг оси высшего порядка (L_3 и $L_6 - 60^\circ \times 2$) возникает третье координатное направление OU , эквивалентное осям OX и OY . В связи с этим в индексы граней вводится дополнительно четвертый индекс i , и символ грани становится четырехиндексным $(hkil)$, причем справедлива формула $h + k = \bar{i}$. Единичная грань в гексагональной и тригональной сингониях будет иметь символ $(11\bar{2}1)$, единичная грань в кристаллах тетрагональной сингонии – символ (111) [2-4].

В кристаллах кубической сингонии все три координатные оси равномасштабны, так как они связаны осью симметрии третьего порядка, которая расположена равнонаклонно к координатным осям. Единичная грань (111) отсекает равные отрезки по осям $a_e = b_e = c_e$ [2-4].

Контрольные вопросы

1. Сформулируйте закон рациональности отношений параметров.
2. В чем заключается процесс индицирования?
3. Каким образом определяются индексы Вейса?
4. Дайте характеристику символам Миллера.
5. По каким правилам выбирается единичная грань в кристаллах низшей категории?

6. Почему в кристаллах гексагональной сингонии вводится дополнительный индекс для обозначения символа грани?

7. Охарактеризуйте положение единичной грани кристалла тетрагональной сингонии.

8. Почему единичная грань в кристаллах кубической сингонии отсекает по координатным осям равные отрезки?

9. Чем обусловлено возникновение координатного направления OU в гексагональной и тригональной сингониях?

Библиографический список

1. Современная кристаллография. В 4 т. Структура кристаллов/ Под ред. Б. К. Вайнштейна М.: Наука, 1979. 359 с.

2. Загальская Ю. Г., Литвинская Г. П., Егоров-Тисменко Ю. К. Геометрическая кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1986. 166 с.

3. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Теория симметрии кристаллов. <http://students.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=index.htm>

4. Нардов В. В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Л.: Изд-во ЛГУ, 1974. 138 с.

9. МОРФОЛОГИЯ КРИСТАЛЛОВ

Простой формой называется семейство граней, получающееся при взаимодействии исходной грани с элементами симметрии данного комплекса симметрии.

9.1. Простые формы в группах различных сингоний

На рис. 19-31 приведены простые формы, возможные в группах различных сингоний. Следует различать простые формы, образованные от грани общего, и частного положения. Грань занимает частное положение, если она:

- 1) перпендикулярна особому направлению, например единственной поворотной оси симметрии;
- 2) параллельна особому направлению, – например, единственной оси симметрии;
- 3) расположена под одинаковыми углами к эквивалентным элементам симметрии.

В остальных случаях грань занимает общее положение [1,2].

Рассмотрим простые формы в группах с единичным направлением по схеме «от простого к сложному».

Простые формы кристаллов в группах низшей и средней категории

Простые формы в любой группе можно получить, размножая грань, расположенную по-разному относительно элементов симметрии.

В группах с единственным особым направлением исходная грань может быть расположена тремя способами: параллельно единственному особому направлению, перпендикулярно или наклонно. При этом в первых двух случаях будут созданы частные простые формы, в последнем – общие. В группах с побочными особыми направлениями возможны три способа получения частных форм: в случае параллельного или перпендикулярного расположения исходной грани относительно единственного особого направления, а также в случае равнонаклонного расположения исходной грани относительно эквивалентных побочных направлений – $L_{2\perp}$ или $P_{//}$ [1].

Простые формы кристаллов в группах C_n

Моноэдр – простая форма в виде грани, перпендикулярной оси L_n . Это одногранная форма, не зависящая от порядка оси. Если исходная грань расположена параллельно единственной оси n -го порядка, то в результате действия оси получится ***n*-гональная призма**. Кристаллографические n -гональные призмы могут быть гекса-, три-, тетрагональными в зависимости от порядка оси. Если единственное особое направление представлено осью второго порядка L_2 , то образуется вырожденная двугранная призма – ***пинакоид*** (рис.19).

Если грань расположена наклонно по отношению к единственной поворотной оси, то в результате симметрических преобразований образуется ***n*-гональная пирамида**, являющаяся общей простой формой. В группе с единственной осью второго порядка пирамида вырождается в ***осевой диэдр (сфеноид)***.

В группах C_n частными формами являются моноэдры и призмы, включая пинакоид, общими – пирамиды, поэтому ***группы C_n*** называют ***n*-гонально-пирамидальными** (рис.19):

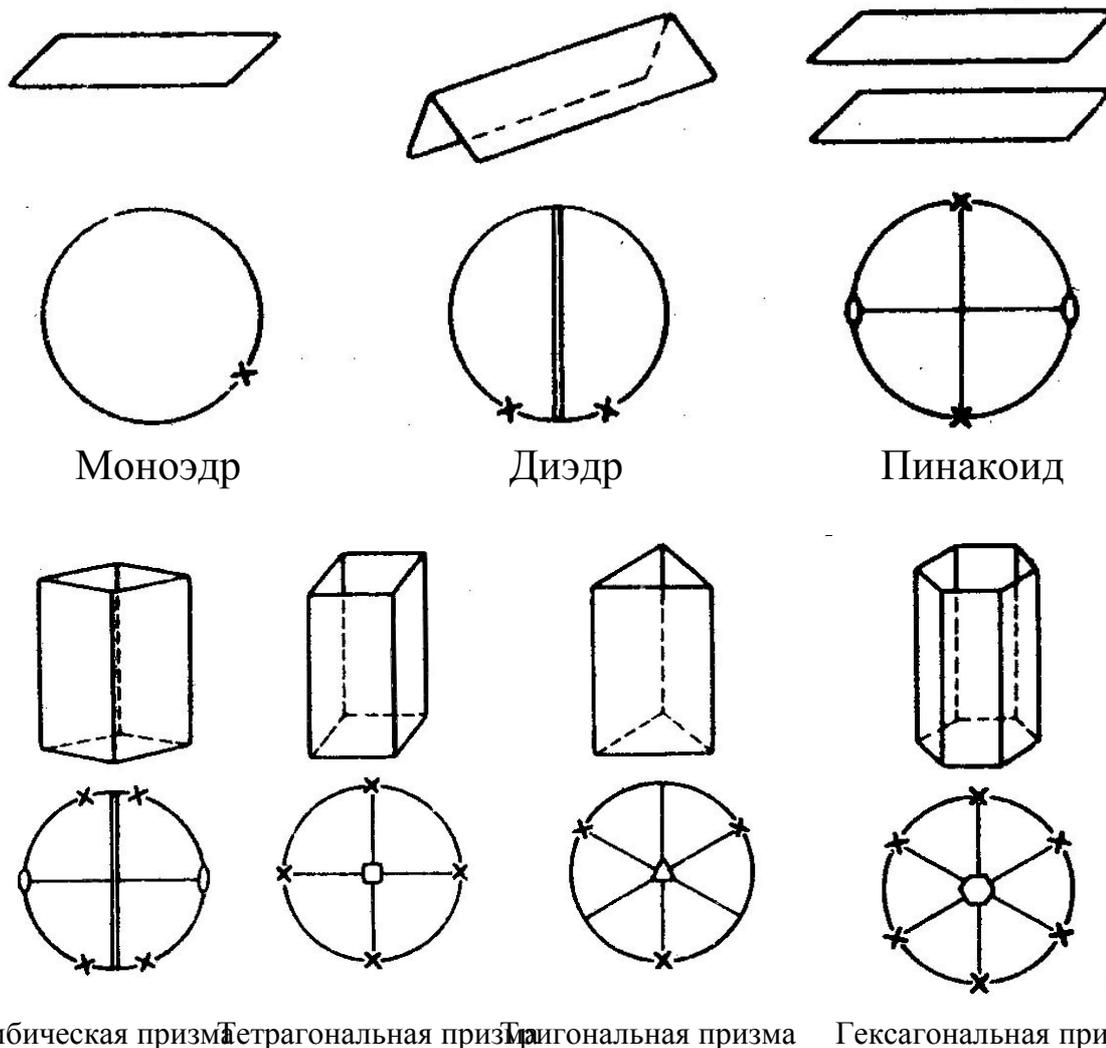


Рис. 19. Простые формы кристаллов в группе C_n .

- C_3 – тригонально-пирамидальная группа;
- C_4 – тетрагонально-пирамидальная группа;
- C_6 – гексагонально-пирамидальная группа;
- C_2 – сфеноидальная или диэдрическая группа;
- C_1 – моноэдрическая группа [1-3].

Простые формы кристаллов в группах C_{nv}

Некоторые простые формы повторяются: это моноэдр, n -гональные призмы, n -гональные пирамиды, причем n – гональные пирамиды будут являться частными формами, так как грани расположены равнонаклонно к эквивалентным побочным особым

направлениям. Появятся новые простые формы, образованные гранями, имеющими разные углы с эквивалентными плоскостями симметрии: **ди-п-гональные призмы** в случае параллельности граней единственной поворотной оси, **ди-п-гональные пирамиды** в случае наклонного расположения исходной грани относительно единственной поворотной оси. В группе C_{2v} две последние простые формы будут соответственно ромбической призмой и ромбической пирамидой. В группе C_s единственный элемент симметрии – зеркальная плоскость, в этой группе появится новая простая форма – **плоскостной диэдр (до́ма)** при наклонном расположении исходной грани к плоскости симметрии [1]. Ди-п-гональные пирамиды являются простыми формами общего вида, поэтому **группы C_{nv}** по их общим формам называют **ди-п-гонально-пирамидальными** (рис.20).

9.1.1.3. Простые формы кристаллов в группах C_{nh} и D_{nh}

В этих группах неизменными останутся п-гональные и ди-п-гональные призмы. Моноэдры из групп C_n и C_{nv} превратятся в пинакоиды, пирамиды вследствие наличия горизонтальной плоскости удвоятся и превратятся в **бипирамиды (п-гональные и ди-п-гональные)**, по которым и называются группы: C_{nh} – **п-гонально-бипирамидальными** и D_{nh} – **ди-п-гонально-бипирамидальными** [1,2]. Так, группа C_{4h} называется тетрагонально-бипирамидальной группой, D_{3h} – дитригонально-бипирамидальной, группа C_{2h} – ромбопризматической, D_{2h} – ромбо-бипирамидальной группой (рис.21).

9.1.1.4. Простые формы кристаллов в группах D_n

Некоторые простые формы из групп C_{nh} и D_{nh} переходят в группу D_n : пинакоиды, призмы, п-гональные бипирамиды. Новые простые формы **трапецоэдры** (рис. 22) являются формами общего вида. Группы D_n в соответствии с общими формами называют **трапецоэдрическими**, группу D_2 – **ромботетраэдрической** [1].

9.1.1.5. Простые формы кристаллов в группах S_{2n}

Рассмотрим простые формы в группах S_2 , S_4 , S_6 . Зеркальный поворот преобразует грань общего положения в п-гональную пирамиду верхнюю и симметричную к ней нижнюю. В группе S_4 общей формой будет **тетрагональный тетраэдр** (симметризованный ромбический тетраэдр), в группе S_6 – **ромбоэдр** (симметризованный трапецоэдр). Группы по названию общей простой формы кристаллов называются соответственно **тетрагонально-тетраэдрической** и **ромбоэдрической**.

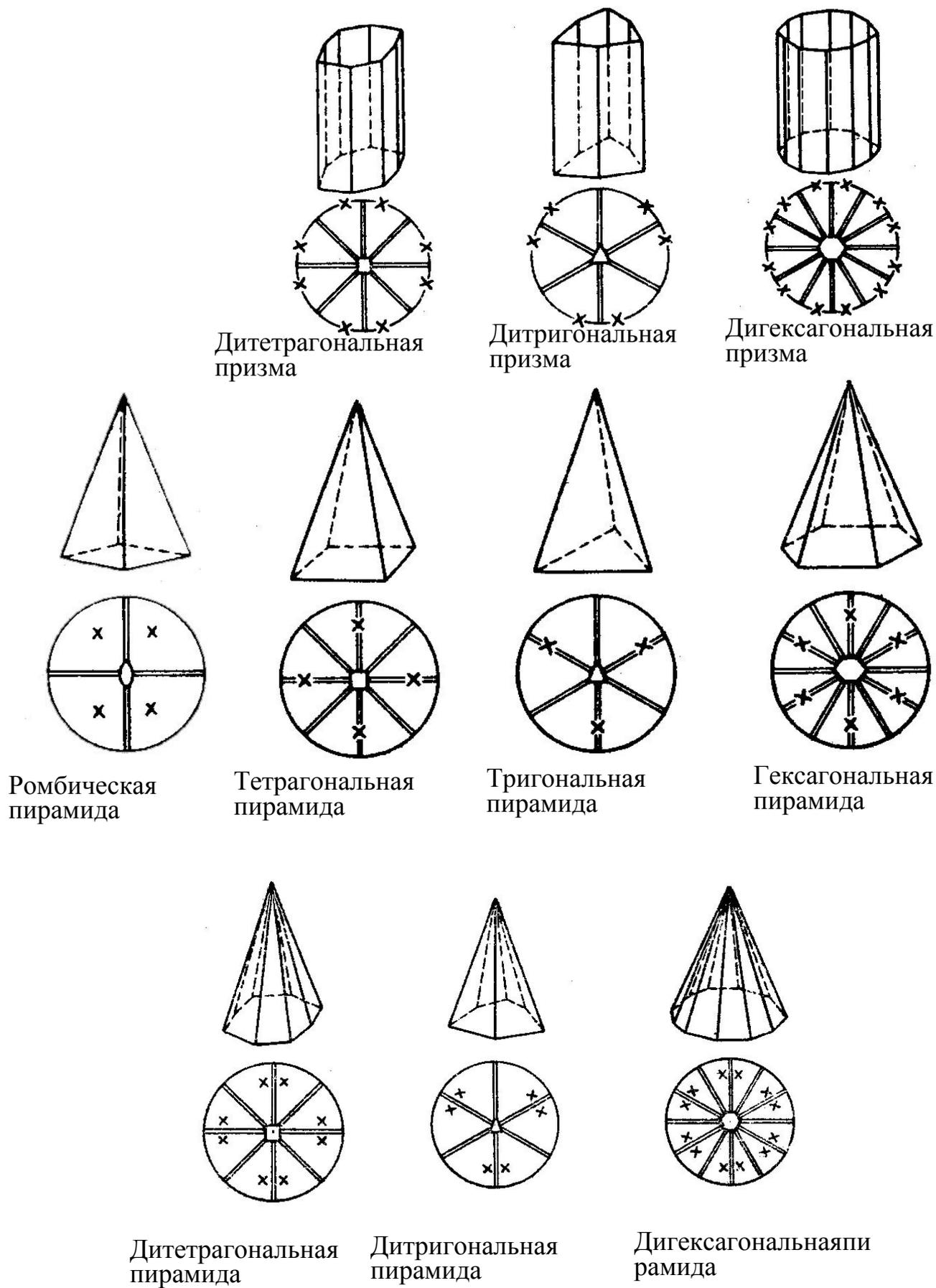
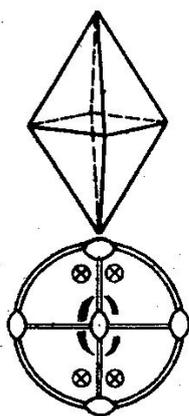
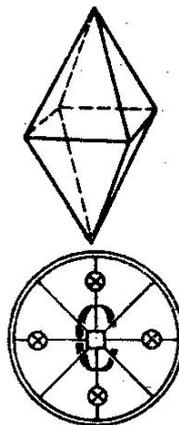


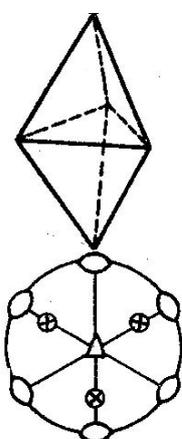
Рис. 20. Простые формы кристаллов в группах C_{nv} .



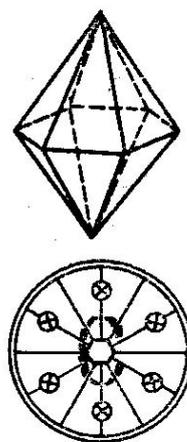
Ромбическая
дипирамида



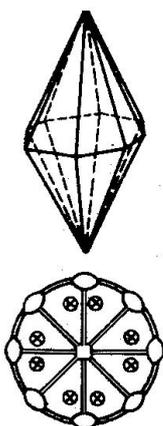
Тетрагональная
дипирамида



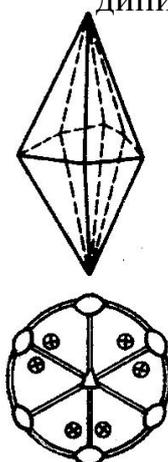
Тригональная
дипирамида



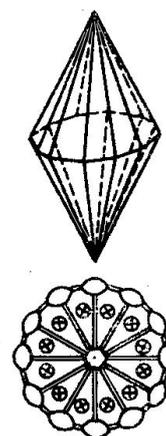
Гексагональная
дипирамида



Дитетрагональная
дипирамида

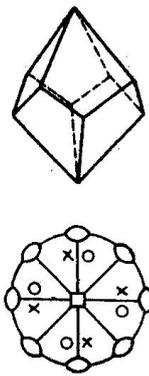


Дитригональная
дипирамида

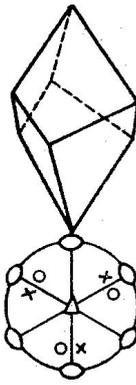


Дигексагональная
дипирамида

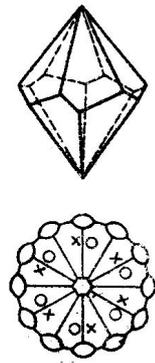
Рис. 21. Простые формы кристаллов в группах C_{nh} и D_{nh} .



Тетрагональный трапецоэдр

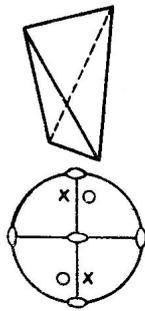


Тригональный трапецоэдр

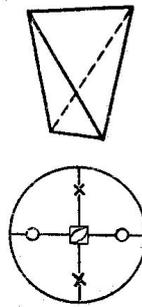


Гексагональный трапецоэдр

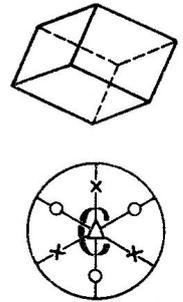
Рис. 22. Простые формы кристаллов в группах D_n .



Ромбический тетраэдр

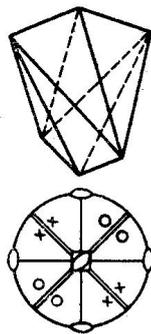


Тетрагональный тетраэдр

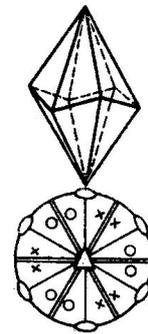


Ромбоэдр

Рис. 23. Простые формы кристаллов в группах S_{2n} .



Тетрагональный скаленоэдр



Тригональный скаленоэдр

Рис. 24. Простые формы кристаллов в группах D_{nd} .

В группе S_2 общая форма образована двумя параллельными гранями – это *пинакоид* (рис.23). Группа S_2 называется *пинакоидальной* [1,2].

9.1.1.6. Простые формы кристаллов в группах D_{nd}

В группах D_{2d} тетрагональный тетраэдр и D_{3d} ромбоэдр являются частными простыми формами, так как их грани перпендикулярны плоскостям симметрии. Если грань вывести в общее положение, то образуется новая общая простая форма в группах D_{nd} *скаленоэдр* (рис.24). В кристаллах возможны лишь две скаленоэдрические формы: *тригональный скаленоэдр* (преломленный ромбоэдр) в группе D_{3d} и *тетрагональный скаленоэдр* (преломленный тетрагональный тетраэдр) – в группе D_{2d} . Название групп будет соответственно *тригонально-скаленоэдрическая* (D_{3d}) и *тетрагонально-скаленоэдрическая* (D_{2d}) [1,2].

Простые формы кристаллов в группах высшей категории

Простые формы кристаллов низшей категории можно вывести двумя способами: размножением исходной грани, занимающей частное и общее положение относительно элементов симметрии, как это было сделано для кристаллов средней и низшей категории, или представив простые формы кристаллов кубической сингонии как производные простейших основных форм. Первый способ очень громоздкий вследствие большого количества операций симметрии, второй способ изящен и прост, он предложен академиком Н. В. Беловым [1].

9.1.2.1. Основные простые формы

Три из пяти платоновых тел, не имеющих оси пятого порядка, являются основными простыми формами кристаллов кубической сингонии: тетраэдр, октаэдр и гексаэдр (рис.25). Грани основных форм перпендикулярны особым направлениям кубической сингонии – четырем осям третьего порядка и трем осям четвертого порядка: грани

октаэдра $\{111\}$ и тетраэдра $\{11\bar{1}\}$ перпендикулярны осям L_3 , грани гексаэдра $\{100\}$ –

перпендикулярны осям L_4 [1,2]. Остальные простые формы можно считать производными от трех основных форм, некоторые из них изображены на рис. 25.

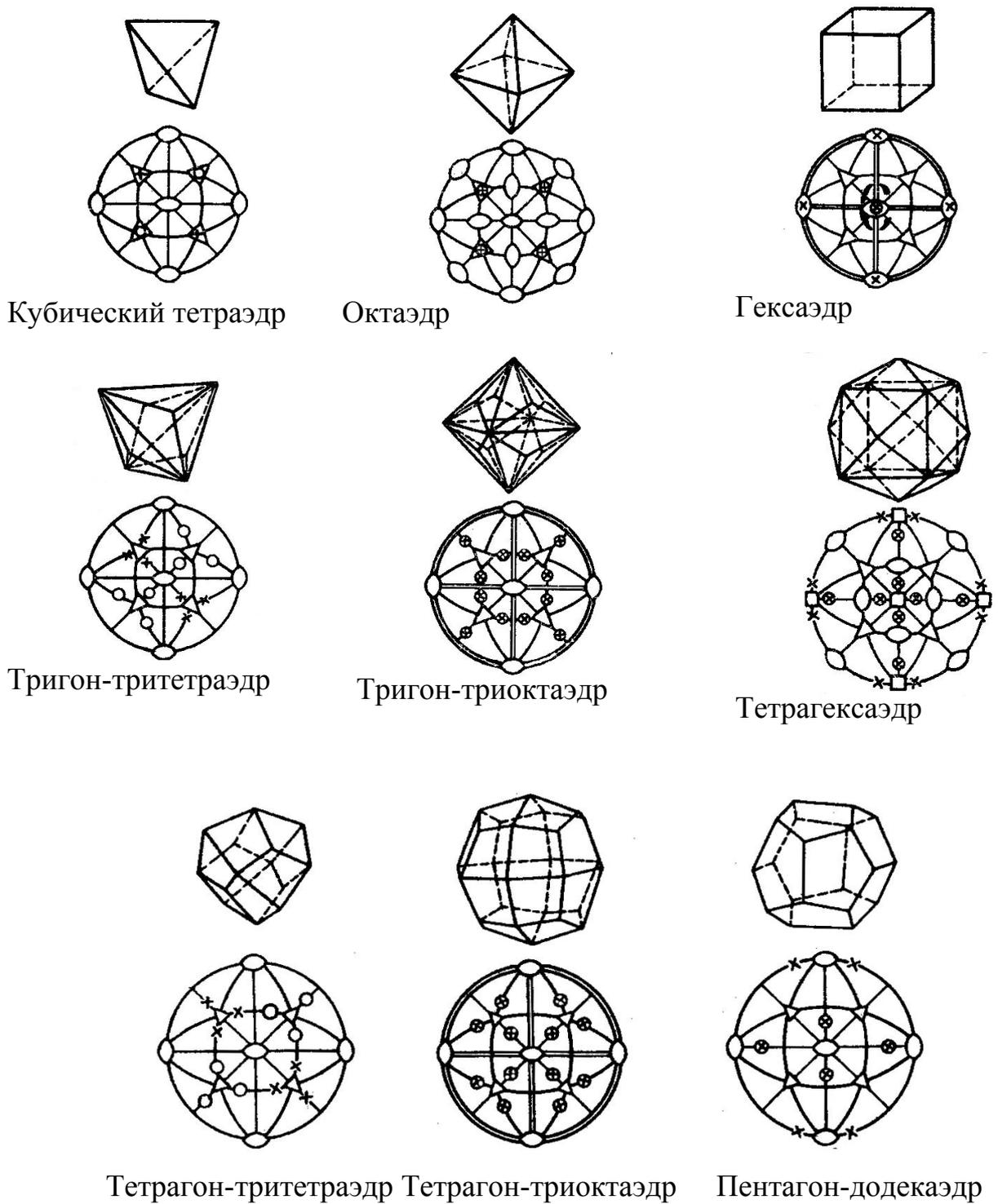
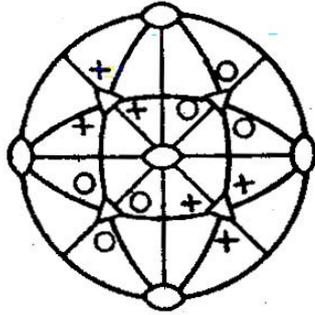
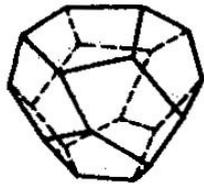
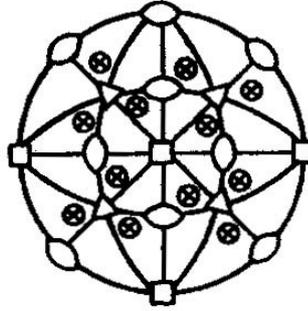
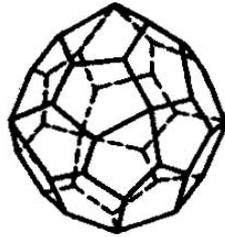


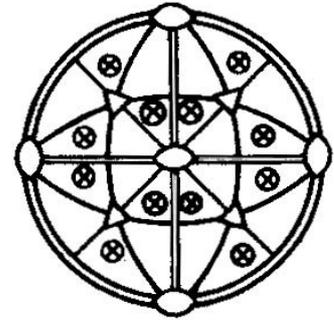
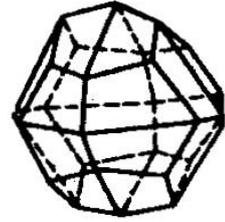
Рис. 25 а). Простые формы кубической сингонии.



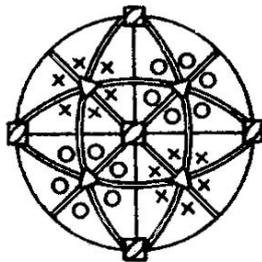
Пентагон-тритетраэдр



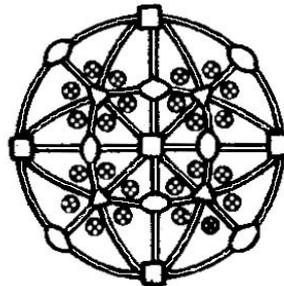
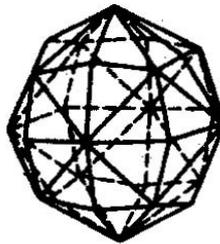
Пентагон-триоктаэдр



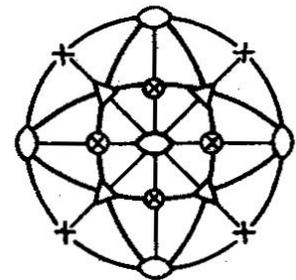
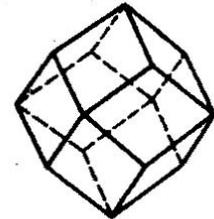
Дидодекаэдр



Гексатетраэдр



Гексоктаэдр



Ромбо-додекаэдр

Рис. 25 б). Простые формы кубической сингонии.

Рассмотрим производные простые формы от каждой основной простой формы и простые формы, которые могут существовать в каждой из пяти групп кубической сингонии.

9.1.2.2. Производные от гексаэдра простые формы $\{hk0\}$

При изменении положения грани гексаэдра из положения (100) в положение (hk0) количество граней увеличится в 4 раза в группах $m\bar{3}m$, 432 , $\bar{4}3m$ или увеличится в 2 раза в группах 23 , $m\bar{3}$, в связи с чем образуется двадцатичетырехгранная форма – **тригон-тетрагексаэдр** (пирамидальный куб) или двенадцатигранная форма – **пентагон-додекаэдр** (рис. 26). Пирамиды, образованные на каждой грани гексаэдра, имеют разные углы наклона граней в зависимости от соотношения h:k. При $h \gg k$ пирамиды пологие и простая форма приближена к форме гексаэдра, – например, при (hk0)=(910). При $h \approx k$ появится новая форма тетрагексаэдр с большим углом наклона граней пирамид или пентагон-додекаэдр, – например, при (hk0)=(980). В предельном случае, когда $h=k$, каждые две грани пирамид сольются в одну грань в виде ромба, образуя новую форму **ромбододекаэдр** $\{110\}$. Ромбододекаэдр относят к четвертой основной форме кристаллов кубической сингонии [1].

9.1.2.3. Производные от октаэдра и тетраэдра простые формы $\{hhl\}$

Рассмотрим случай, когда $h>l$. Смещение грани (111) из положения, перпендикулярного оси третьего порядка, в положение (hhl) приведет к увеличению числа граней в 3 раза вследствие действия оси L_3 . В группах $\bar{4}3m$, 23 образуется **тетрагон-трикетраэдр**, в группах $m\bar{3}m$, 432 , $m\bar{3}$ – образуется **тригон-триоктаэдр**, или пирамидальный октаэдр (рис. 27). Увеличение угла наклона граней пирамиды приведет в предельном случае к образованию **ромбододекаэдра**. В этом процессе (hhl)→(110) [1,2].

9.1.2.4. Простые формы $\{hll\}$ – производные октаэдра (тетраэдра) и гексаэдра

Рассмотрим случай $h>l$. Если грань (111) перевести в положение (hll), то появится 24-гранная простая форма – **тетрагон триоктаэдр** в группах $m\bar{3}m$, 432 , $m\bar{3}$. В группах $\bar{4}3m$, 23 образуется простая форма **тригон-трикетраэдр** (пирамидальный тетраэдр). Эти же простые формы можно получить как производные гексаэдра: **тетрагон-**

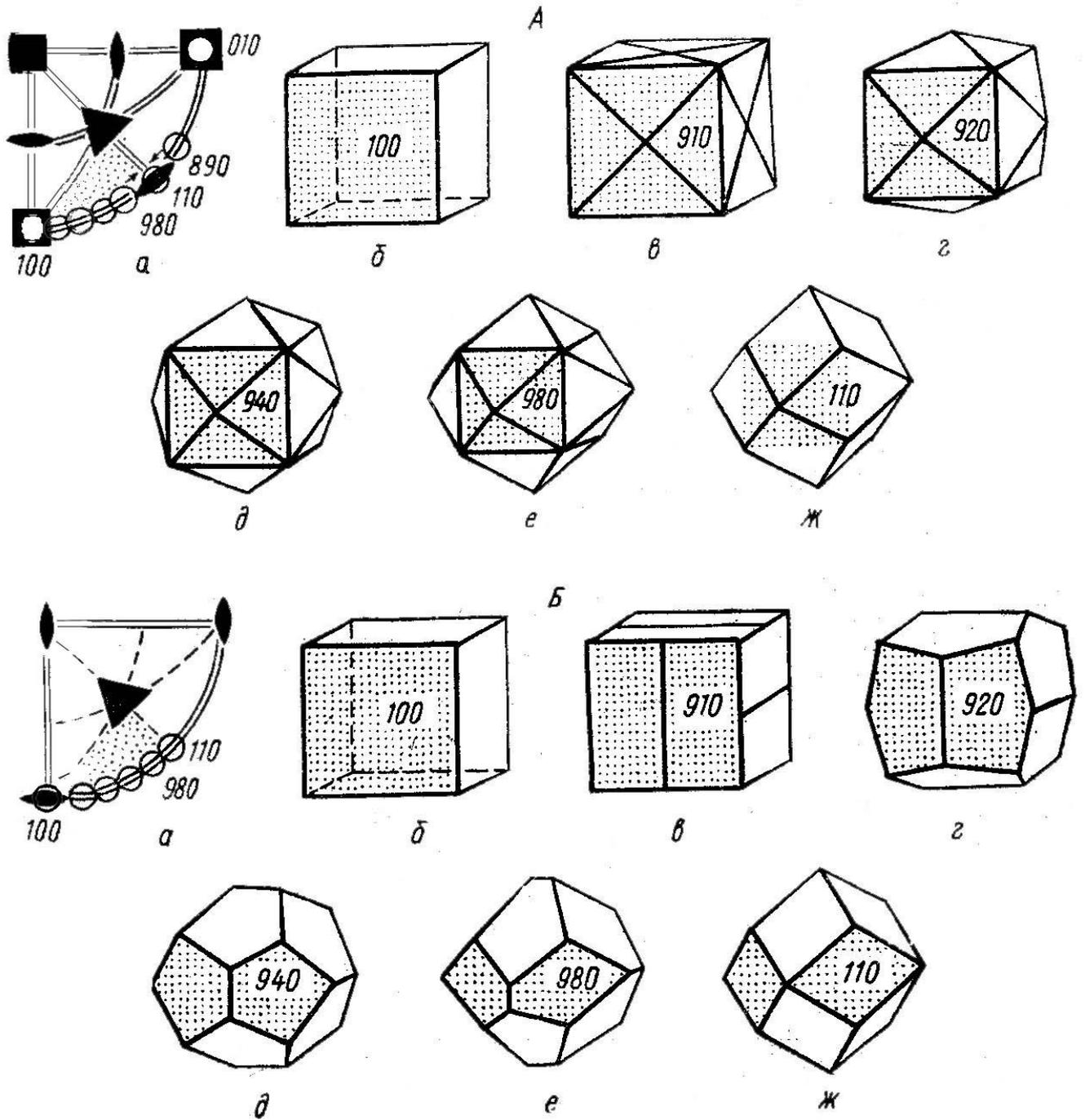


Рис. 26. Простые формы $\{hk0\}$ – производные куба:

А – тригон-тетрагексаэдр и его генезис;

Б – пентагон-додекаэдр и его генезис.

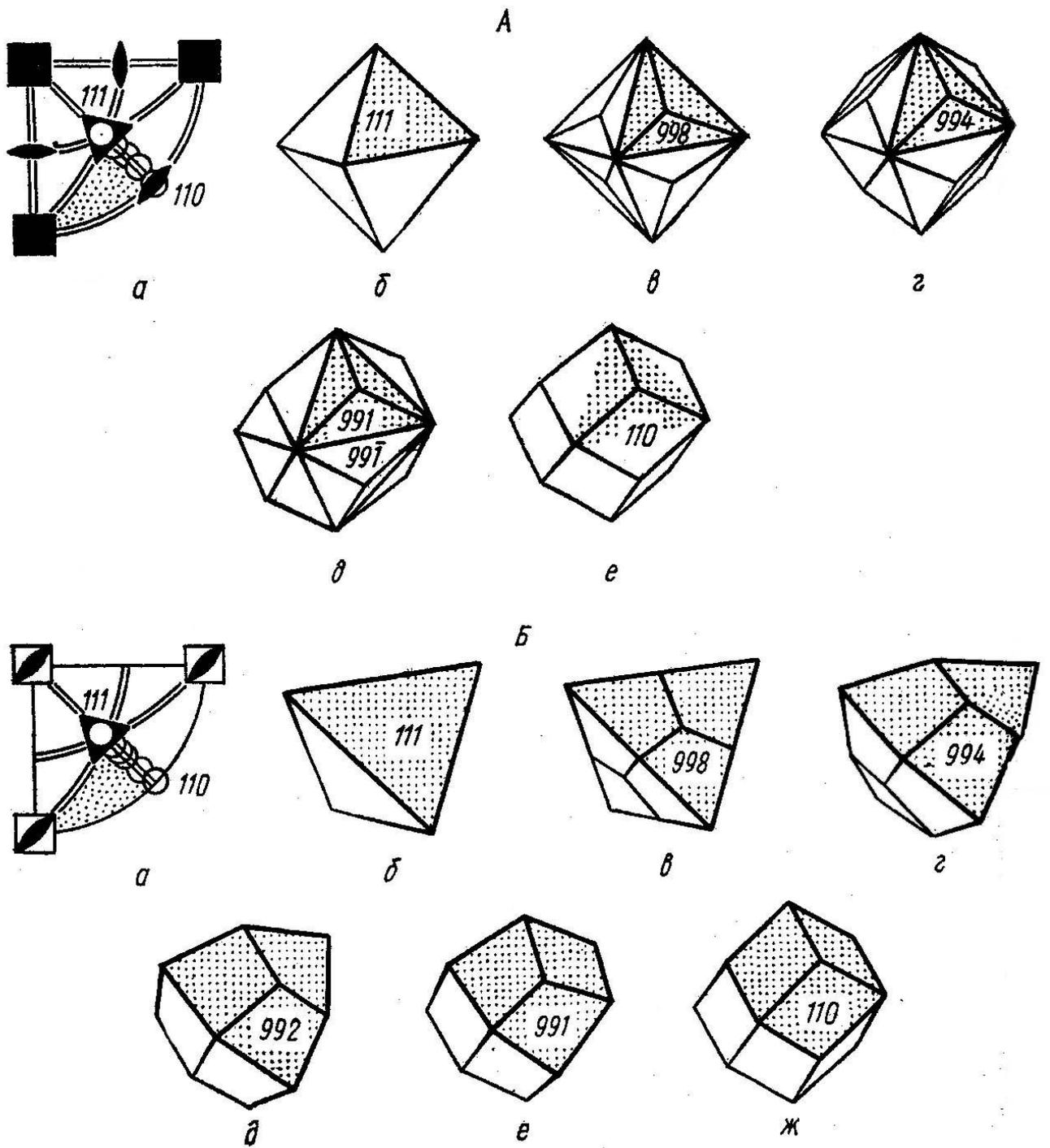


Рис. 27. Простые формы $\{hhl\}$, где $h > l$:

А – производные октаэдра – тригон-триоктаэдр;

Б – производные тетраэдра – тетрагон-тритетраэдр.

тетрагексаэдр ($l < h$), – например, $\{hll\} = \{922\}$, $\{911\}$. Но при $h \approx l$ 24-гранную форму правильнее называть *тетрагон-триоктаэдром*, – например, при $\{hll\} = \{988\}$ (рис.28). В случае возникновения «двускатной крыши» вместо грани гексаэдра в группах $\bar{4}3m$, 23 образуется простая форма – *тригон-дигексаэдр*, особенно при $l < h$, – например, при $\{hll\} = \{922\}$. В случае $h \approx l$ правильнее простую форму называть *тригон-тритетраэдром*, – например, при $\{hll\} = \{988\}$ (рис. 28) [1,2].

9.1.2.5. Общие простые формы кристаллов кубической сингонии

Группа $m\bar{3}m$. При переводе грани октаэдра (111) в общее положение (hkl) количество граней простой формы увеличится в 6 раз и возникнет 48-гранная простая форма. В случае $h \approx l < k$ эту форму следует называть *октагексаэдром*, – например, при $\{hkl\} = \{921\}$. В случае $h \approx k \approx l$ форма называется *гексаоктаэдром*, – например при $\{hkl\} = \{987\}$ (рис. 29). Группа $m\bar{3}m$ по виду общей простой формы кристаллов именуется *гексаоктаэдрической* [1,2].

Группа $\bar{4}3m$. При переводе грани тетраэдра (111) в общее положение (hkl) количество граней простой формы увеличится в 6 раз и возникнет 48-гранная простая форма. Если $k \approx l < h$, то простую форму следует считать производной гексаэдра и называть *тригон-тетрагексаэдром*, – например при $\{hkl\} = \{921\}$. Если $h \approx k \approx l$, то форма называется *гексатетраэдром*, – например при $\{hkl\} = \{987\}$ (рис. 29). По виду общей простой формы группа $\bar{4}3m$ именуется *гексатетраэдрической* [1,2].

Группы 432 и 23. В осевых группах простые формы можно назвать *гироздрами* (осевиками). В группе 432 гироздр будет 24-гранным, в группе 23 – 12-гранным. Общая простая форма в группе 432 называется *пентагон-триоктаэдр*, в группе 23 – *пентагон-тритетраэдр* (рис. 30). Группы 432 и 23 по виду общей простой формы называют *пентагон-триоктаэдрической* и *пентагон-тритетраэдрической* соответственно. В случае $h \gg k, l$ название общей простой формы является производным от гексаэдра: *пентагон-тетрагексаэдр* в группе 432, *пентагон-дигексаэдр* – в группе 23 [1,2].

Группа $m\bar{3}$. Общая простая форма кристаллов группы $m\bar{3}$ может быть представлена как дважды преобразованный гексаэдр – 24-гранник (дидигексаэдр), полученный вследствие увеличения граней в 2 раза в пентагон-додекаэдре (дигексаэдре) при действии координатных плоскостей. Преломленный пентагон-додекаэдр называется *дидодекаэдром* (рис.31). При стремлении формы к гексаэдрическому габитусу данную простую форму называют *тетрагон-тетрагексаэдром*, при этом $h > k, l$, – например, $\{hkl\} = \{942\}$;

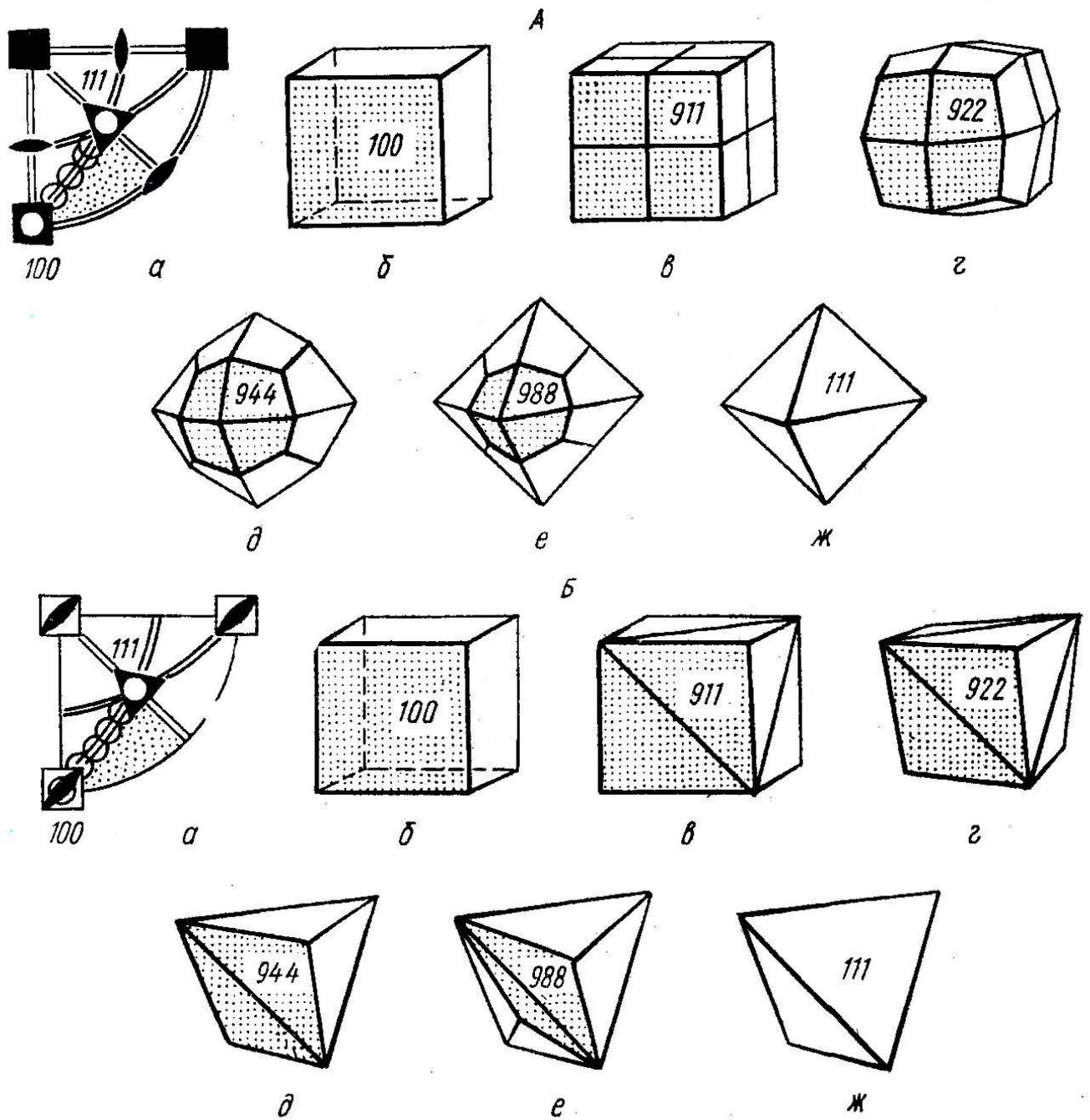
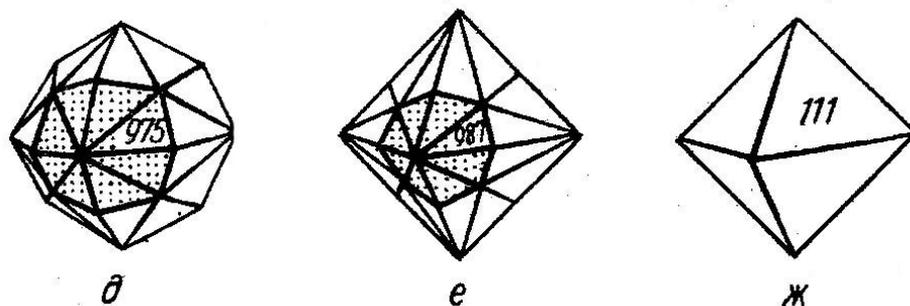
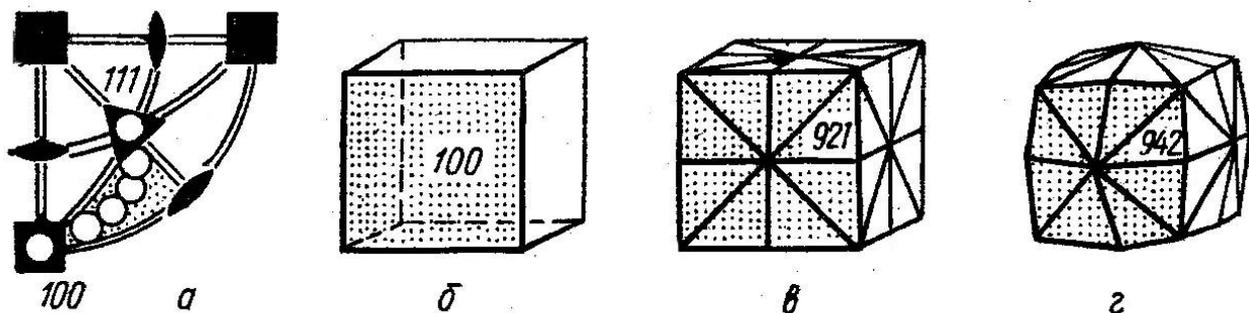


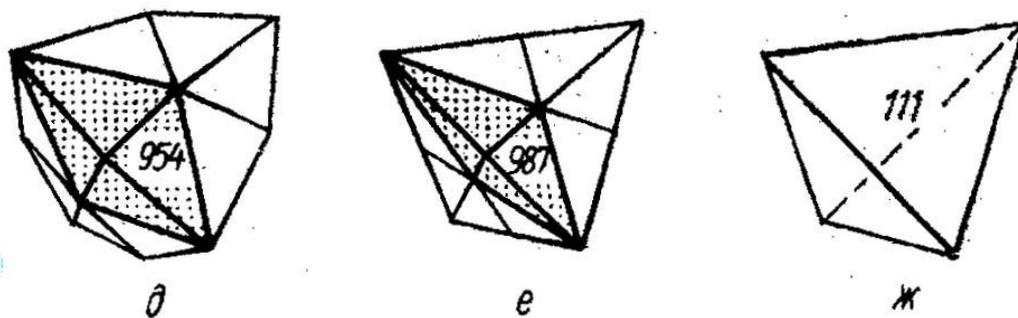
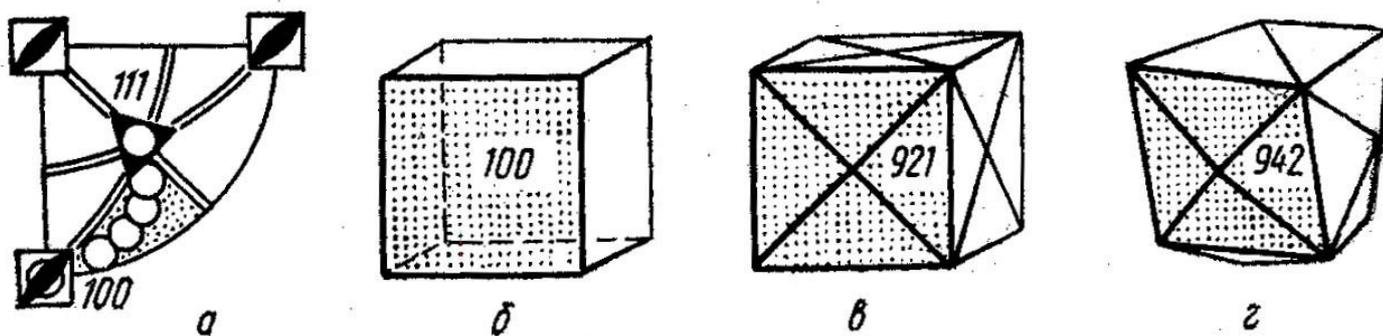
Рис. 28. Простые формы $\{hll\}$, где $h > l$:

А – тетрагон-триоктаэдр и его генезис от октаэдра и куба;

Б – тригон-тритетраэдр и его генезис от тетраэдра и куба.



а)



б)

Рис. 29. Общие простые формы кубической сингонии:

а) общая форма группы $m\bar{3}m$ – 48-гранник = тригон-гексаоктаэдр = тригон – октагексаэдр и его генезис;

б) общая форма группы $43m$ – тригон-гексатетраэдр = тригон-тетрагексаэдр и его генезис.

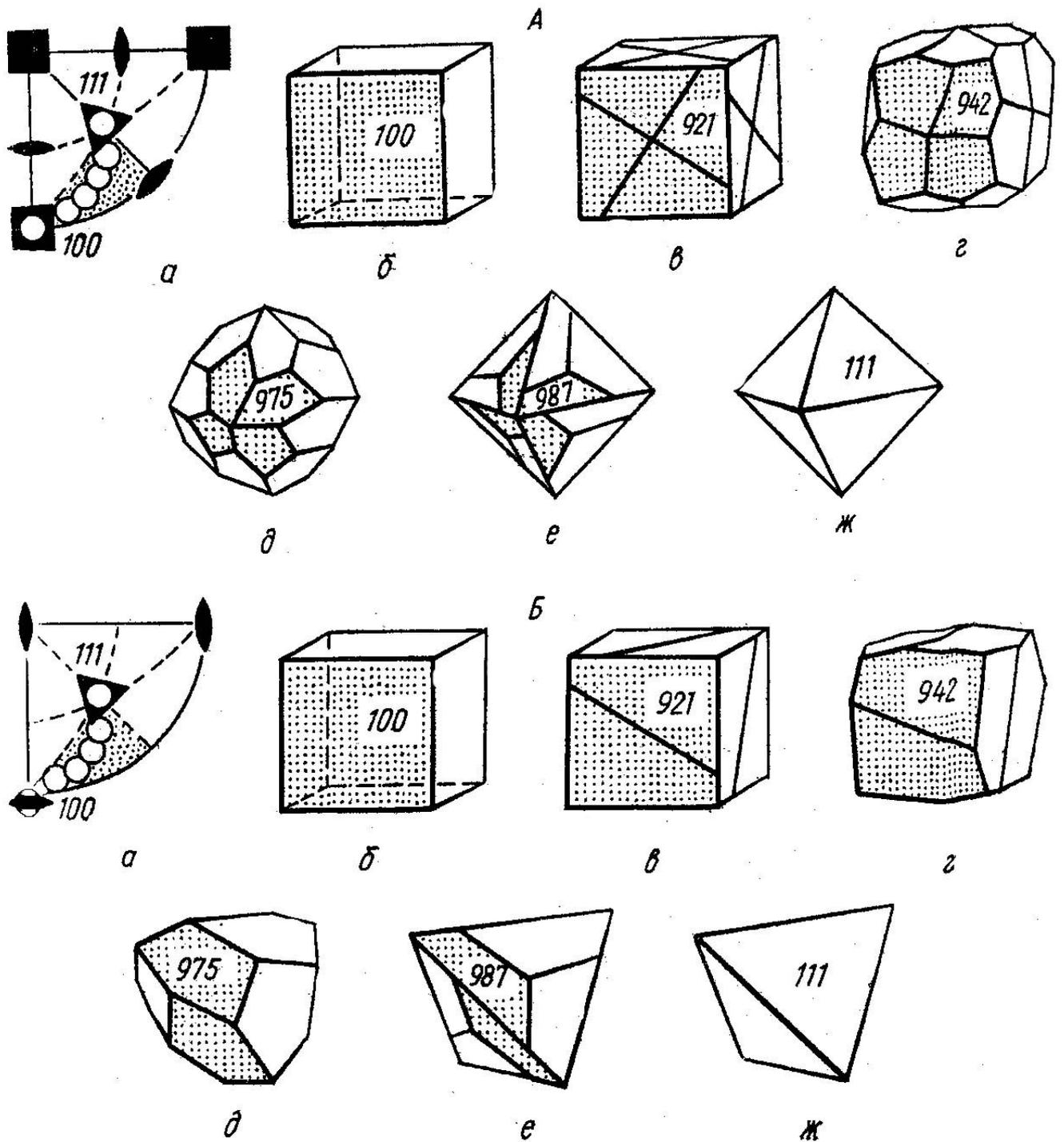


Рис. 30. Общие формы осевых групп и их генезис:

А – пентагон-триоктаэдр = 24-гранный осевик;

Б – пентагон-тритетраэдр = 12-гранный осевик.

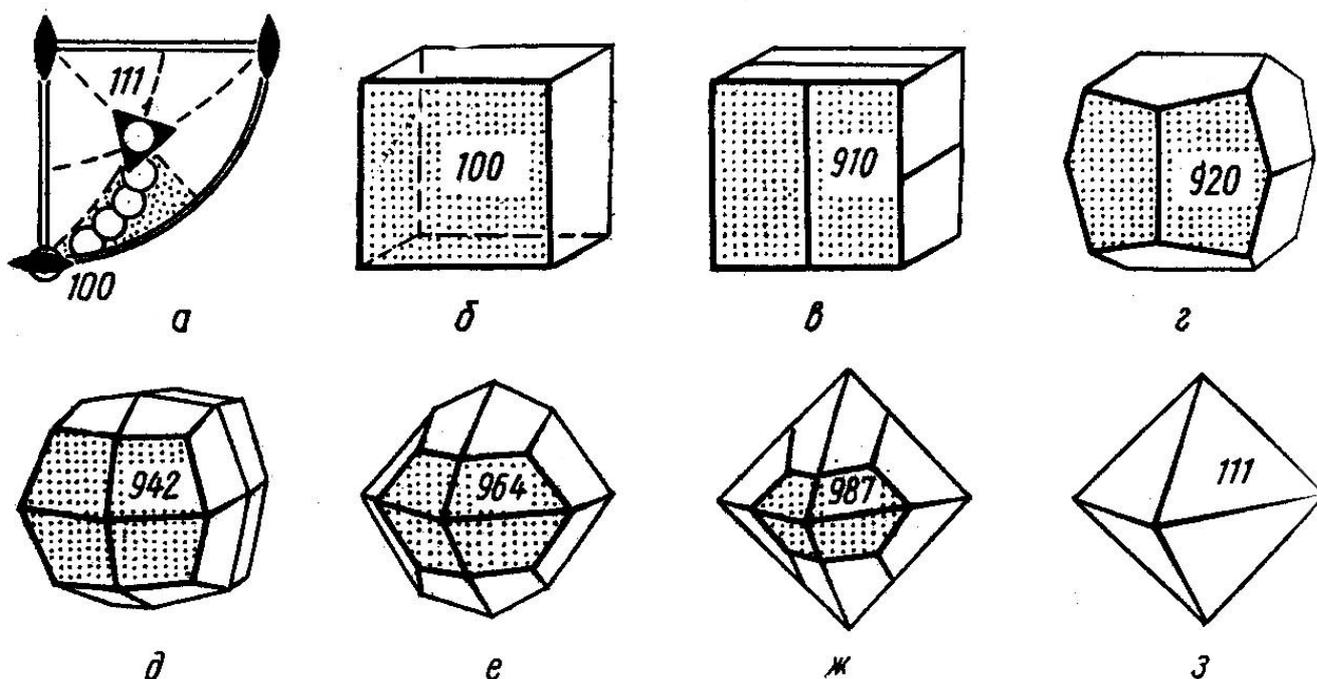


Рис. 31. Общая форма группы $m\bar{3}$ – пентагон-дигексаэдр и его генезис.

при стремлении к октаэдрическому габитусу – *тетрагон-триоктаэдром*, при этом $h \approx k \approx 1$, – например, $\{hkl\} = \{987\}$. Группа $m\bar{3}$ по названию общей простой формы – *дидодекаэдрическая* [1,2].

Контрольные вопросы

1. Определите понятие «простая форма».
2. В каких случаях грань занимает частное положение, в каких – общее?
3. Назовите три способа расположения исходной грани в группах с единственным особым направлением, при которых будут создаваться частные простые формы.
4. Назовите три способа получения частных форм в группах с побочными особыми направлениями.
5. Назовите частные и общие простые формы в группах C_n .
6. При каком расположении исходной грани образуются формы моноэдр и пинакоид в группах C_n ?
7. Охарактеризуйте n-гональные призмы и n-гональные пирамиды в группах C_n . Какие из указанных форм являются частными, какие – общими?
8. В какой группе возможна простая форма – сфеноид? Почему сфеноид называют осевым диэдром?
9. Какие группы называются n-гонально-пирамидальными? Почему?

10. Обозначьте сфеноидальную группу по Шенфлису.
11. Как называют группы C_3 , C_4 , C_6 по общей простой форме?
12. Какие элементы симметрии содержит группа C_1 ? Запишите эту группу в обозначениях Браве, Шенфлиса, Германа-Могена.
13. Какие простые формы могут существовать в кристаллах групп C_{nv} ?
14. При каком расположении граней появятся простые формы в виде ди-п-гональных призм и ди-п-гональных пирамид в группах C_{nv} ?
15. В какой из групп C_{nv} возможны ромбическая призма и ромбическая пирамида?
16. В какой группе существует плоскостной диэдр?
17. В чем сходство и различие плоскостного диэдра (дома) и осевого диэдра (сфеноида)?
18. Какие группы называют ди-п-гонально-пирамидальными?
19. Назовите общие простые формы в группах C_{nv} .
20. В какие простые формы превратятся моноэдры и пирамиды из групп C_n и C_{nv} в группах C_{nh} и D_{nh} ? Почему?
21. Запишите в обозначениях по Шенфлису тетрагонально-бипирамидальную группу.
22. Запишите в обозначениях по Браве ромбопризматическую группу.
23. Запишите в обозначениях по Герману-Могену дитригонально-бипирамидальную группу.
24. Назовите группу D_{2h} по виду общей простой формы.
25. Какие простые формы из групп C_{nh} и D_{nh} переходят в группы D_n ?
26. Какие новые простые формы возникают в группах D_n ?
27. Какие группы называют трапецоэдрическими?
28. Какая группа называется ромботетраэдрической? Почему?
29. Назовите общие простые формы в группах S_2 , S_4 , S_6 .
30. Назовите в обозначениях Шенфлиса тетрагонально-тетраэдрическую группу.
31. Назовите в обозначениях Браве ромбоэдрическую группу.
32. Какая группа называется пинакоидальной?
33. Перечислите частные и общие простые формы в группах D_{nd} .
34. Назовите скаленоэдрические простые формы, которые могут существовать в кристаллах.
35. Как называются группы D_{2d} и D_{3d} по виду общей простой формы?
36. Какими способами можно вывести простые формы кристаллов кубической сингонии?

37. Перечислите основные простые формы кристаллов кубической сингонии.
38. Как расположены грани основных простых форм кубической сингонии по отношению к осям высших порядков?
39. Назовите простые формы $\{hk0\}$ – производные гексаэдра. Как они образуются?
40. Во сколько раз увеличится число граней при смещении грани гексаэдра из положения (100) в положение (hk0) в группах $m\bar{3}m$, 432 , $\bar{4}3m$, 23 , $m\bar{3}$? Какие простые формы при этом образуются?
41. Как зависит угол наклона грани пирамиды от соотношения h:k в группах $m\bar{3}m$, 432 , $\bar{4}3m$, 23 , $m\bar{3}$?
42. Дайте характеристику простым формам: тригон-тетрагексаэдр, пентагон-додекаэдр, ромбододекаэдр. Какая из них является предельной и почему?
43. Как изменится число граней при смещении грани (111) в положение (hhl)? Какие новые простые формы образуются при этом в группах $\bar{4}3m$, 23 , $m\bar{3}m$, 432 , $m\bar{3}$?
44. К какой предельной форме приведет процесс (hhl)→(110) в группах $\bar{4}3m$, 23 , $m\bar{3}m$, 432 , $m\bar{3}$?
45. Какие формы возникнут в группах $m\bar{3}m$, 432 , $m\bar{3}$, $\bar{4}3m$, 23 при переводе грани (111) в положение (hll)?
46. При каких соотношениях h:l простую форму {hll} правильно называть тетрагон-тетрагексаэдр или тетрагон-триоктаэдр в группах $m\bar{3}m$, 432 , $m\bar{3}$?
47. Каким образом изменится число граней простой формы в группе $m\bar{3}m$ при переводе грани октаэдра в общее положение (hkl)?
48. Как называются общие простые формы кристаллов группы $m\bar{3}m$, если $h \approx l \ll k$ и $h \approx k \approx l$?
49. Запишите гексаоктаэдрическую группу в обозначениях Германа-Могена.
50. В каком случае в группе $\bar{4}3m$ возникнет 48-гранная простая форма и как она называется? В каком случае эту форму следует считать производной гексаэдра, в каком – производной тетраэдра?
51. Как по виду общей простой формы называется группа $\bar{4}3m$?
52. Дидодекаэдр в группе $m\bar{3}$ является частной или общей формой? Как образуется простая форма – дидодекаэдр?
53. Как можно назвать дидодекаэдр в группе $m\bar{3}$, если $\{hkl\}=\{942\}$ и если $\{hkl\}=\{987\}$?
54. Как называется группа $m\bar{3}$ по виду общей простой формы?

55. В каких группах могут существовать гироздры?
56. Сколько граней будет иметь осевик в группе 432 , сколько – в группе 23 ?
57. Как называются общие простые формы в группах 432 и 23 ? Назовите эти группы по виду общей простой формы.
58. При каком соотношении индексов Миллера общая простая форма в группе 432 может называться пентагон-тетрагексаэдром?
59. При каком соотношении индексов Миллера общая простая форма в группе 23 может называться пентагон-дигексаэдром?

Библиографический список

1. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П., Загальская Ю. Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ, 1992. 288 с.
2. Шафрановский И. И. Очерки по минералогической кристаллографии. Л.: Недра, 1974. 152 с.
3. Бакуменко И. Т. Методическое пособие к курсу «Кристаллография». Новосибирск: Изд-во НГУ, 1997. 68 с.

10. ЭЛЕМЕНТЫ СИММЕТРИИ И СИММЕТРИЧЕСКИЕ ОПЕРАЦИИ БЕСКОНЕЧНЫХ ЗАКОНОМЕРНЫХ ОБЪЕКТОВ

Основным элементом симметрии бесконечных закономерных объектов является **трансляция** – симметрическая операция первого рода, заключающаяся в параллельном переносе исходной фигуры на одинаковое расстояние в одном направлении и сохраняющая неизменной ее метрику. Соответствующая операция симметрии тоже называется трансляцией. Фигуры T и T'' на рис. 7б связаны трансляционным переносом [1,2].

При описании внутреннего строения кристаллов недостаточно простых поворотных и сложных (зеркальных и инверсионных) осей симметрии. Рассмотрим **винтовые оси симметрии**, применяемые при описании структур кристаллов, и их действие на асимметричную фигуру. На рис. 32 показано действие винтовых осей 2-го, 3-го и 4-го порядков. Винтовые оси обозначаются цифрой, показывающей порядок оси, с нижним индексом, показывающим долю трансляции, на которую происходит скольжение. Симметрическая операция относительно оси 2_1 заключается в повороте исходной фигуры на элементарный угол 180° в плоскости, перпендикулярной оси, и скольжении вдоль оси

на половину трансляции. В случае оси третьего порядка скольжение может происходить либо на $\frac{1}{3}$, либо на $\frac{2}{3}$ трансляции, винтовые оси будут обозначаться соответственно 3_1 или 3_2 . Если порядок оси 4, то элементарный угол поворота равен 90° , а скольжение вдоль оси может происходить на $\frac{1}{4}$, $\frac{2}{4}$ и $\frac{3}{4}$ трансляции, оси обозначаются 4_1 , 4_2 и 4_3 соответственно (рис. 32) [2].

В случае *винтовой оси 6-го порядка* элементарный угол поворота - составляет 60° , скольжение вдоль оси может быть на $\frac{1}{6}$, $\frac{2}{6}$, $\frac{3}{6}$, $\frac{4}{6}$, $\frac{5}{6}$ часть трансляции, оси обозначаются как 6_1 , 6_2 , 6_3 , 6_4 , 6_5 (рис. 33). Следует учесть, что вращение относительно винтовой оси может происходить по часовой стрелке и против, поэтому различают *правые* и *левые винтовые оси*.

При сочетании операций симметрии относительно зеркальной плоскости симметрии и трансляции возникают *плоскости скользящего отражения*. Величина трансляционной компоненты плоскости скользящего отражения всегда равна $\frac{1}{2}$ части трансляции. Плоскости скользящего отражения делят на два типа в зависимости от направления скольжения. К *первому типу* относятся плоскости скользящего отражения со скольжением, направленным вдоль координатных осей. Плоскости скользящего отражения обозначаются *a*, *b*, *c* в зависимости от направления скольжения: вдоль координатной оси X, Y, Z соответственно. Плоскости *второго типа* называют *клиноплоскостями*, они характеризуются направлением скольжения по диагонали грани элементарной ячейки. *Клиноплоскости n* характеризуются трансляционными компонентами, равными половинам координатных трансляций \vec{T}_x , \vec{T}_y , \vec{T}_z . Если клиноплоскость параллельна центрированной грани, то вектор ее скольжения будет в 2 раза меньше истинной трансляции, такая плоскость называется *d-плоскостью*. Действие винтовой оси 3_1 в структуре турмалина показано на рис. 34 [1,2].

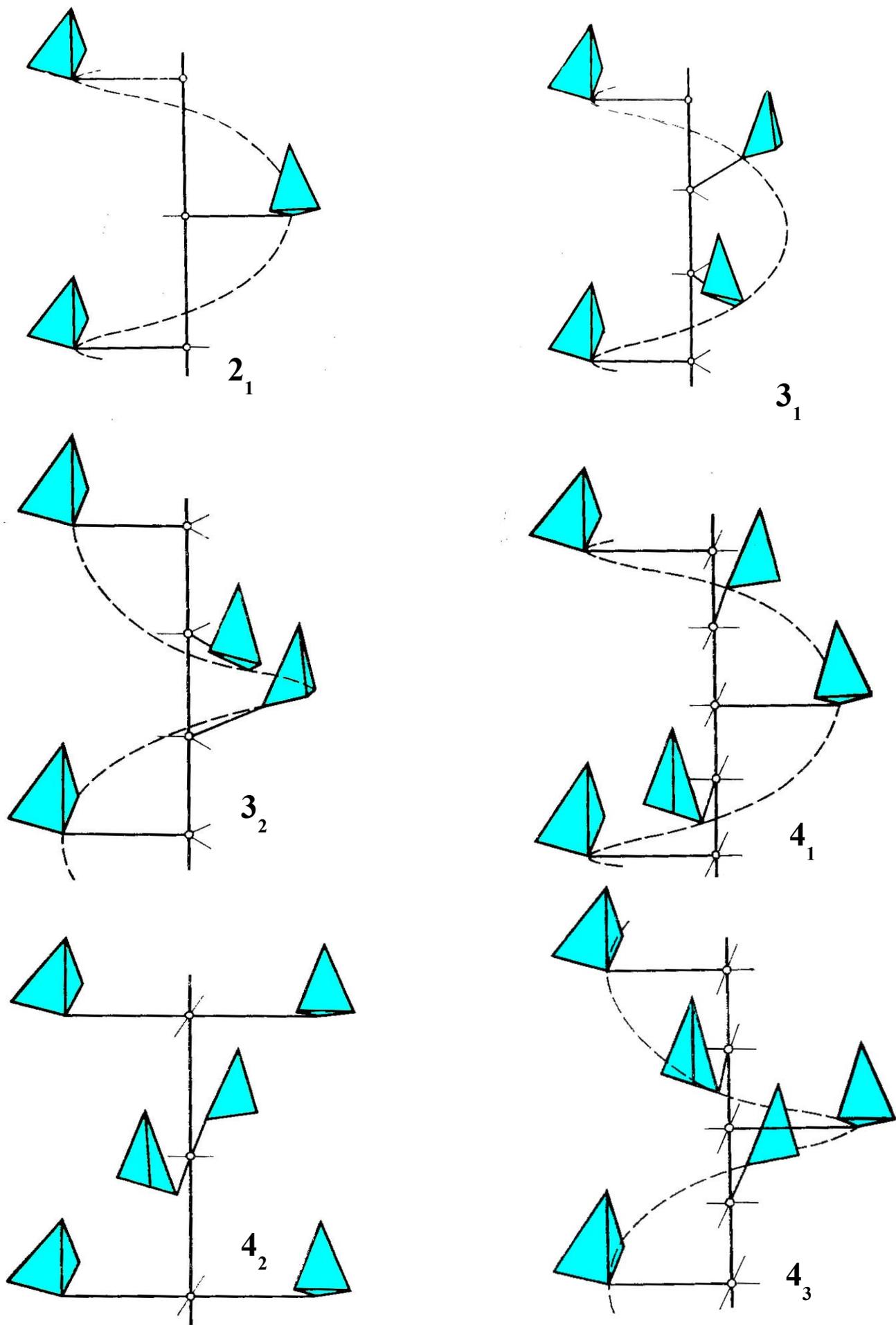


Рис. 32. Кристаллографические винтовые оси и их действие на асимметричный тетраэдр.

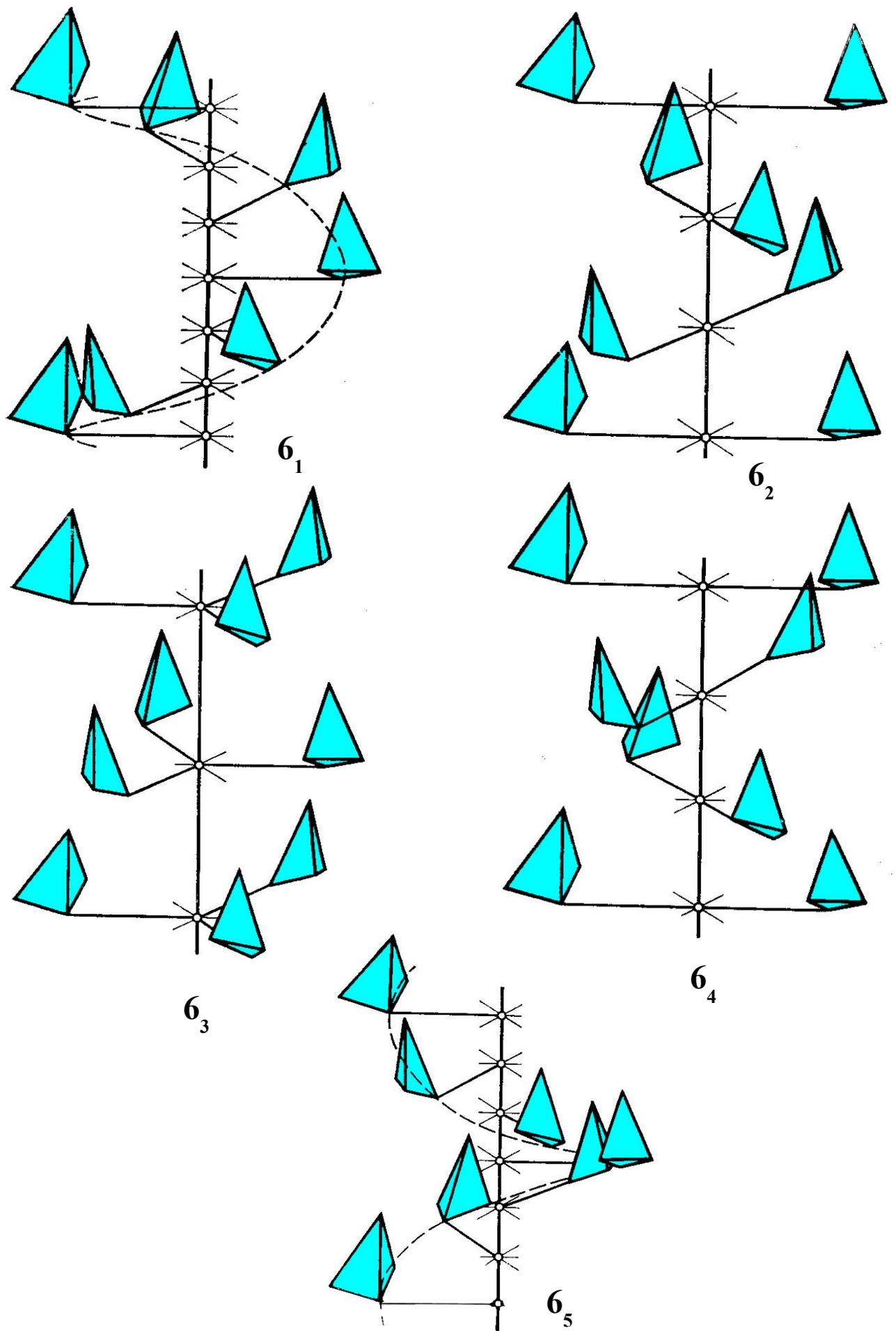


Рис. 33. Кристаллографические винтовые оси и их действие на асимметричный тетраэдр.

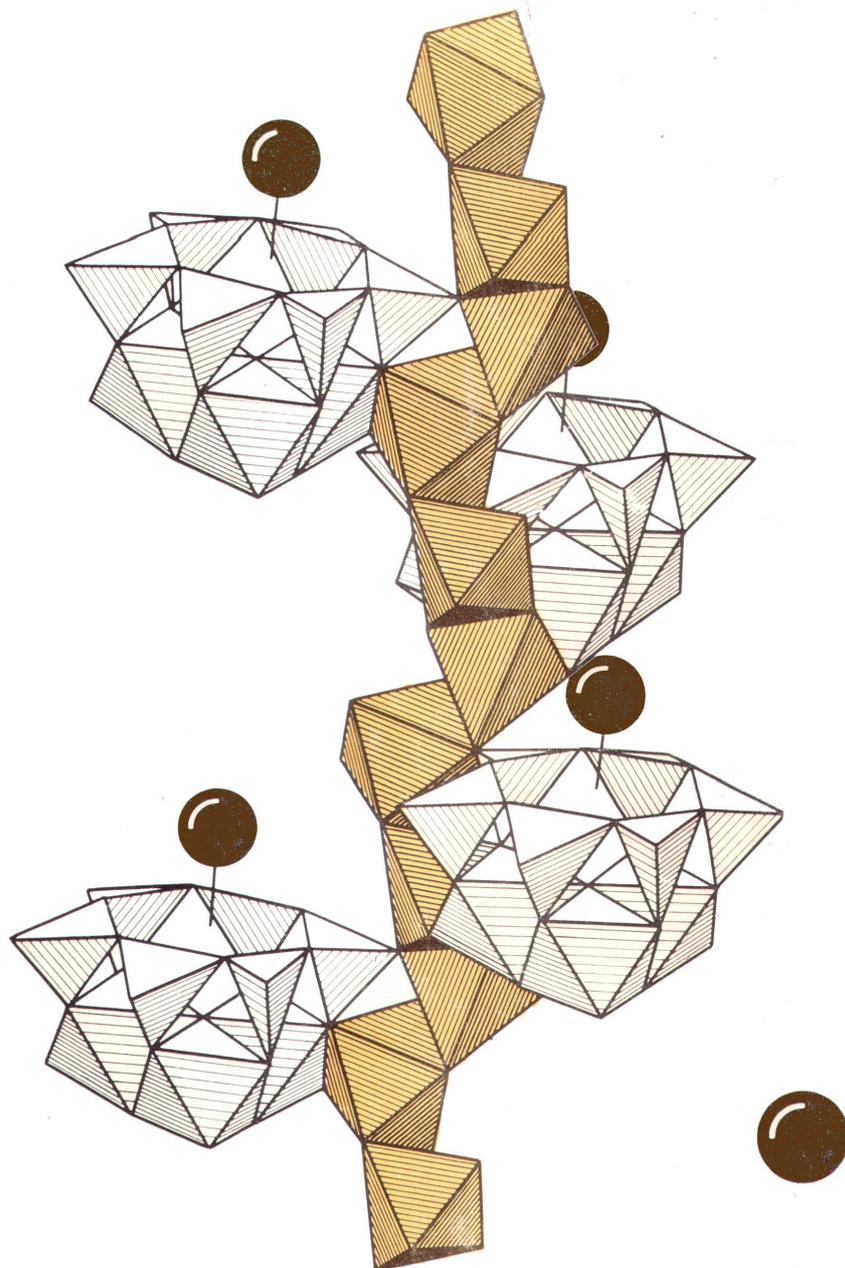


Рис. 34. Структура турмалина.

Основной архитектурный мотив – тройная винтовая ось из Al-октаэдров, распределяющая по трем уровням ромбоэдрической ячейки островки $\text{NaMg}_3\text{Si}_6\text{O}_{18}$ – вырезки из антигоритовых пакетов с дискретными шестерными кремнекислородными кольцами.

Контрольные вопросы

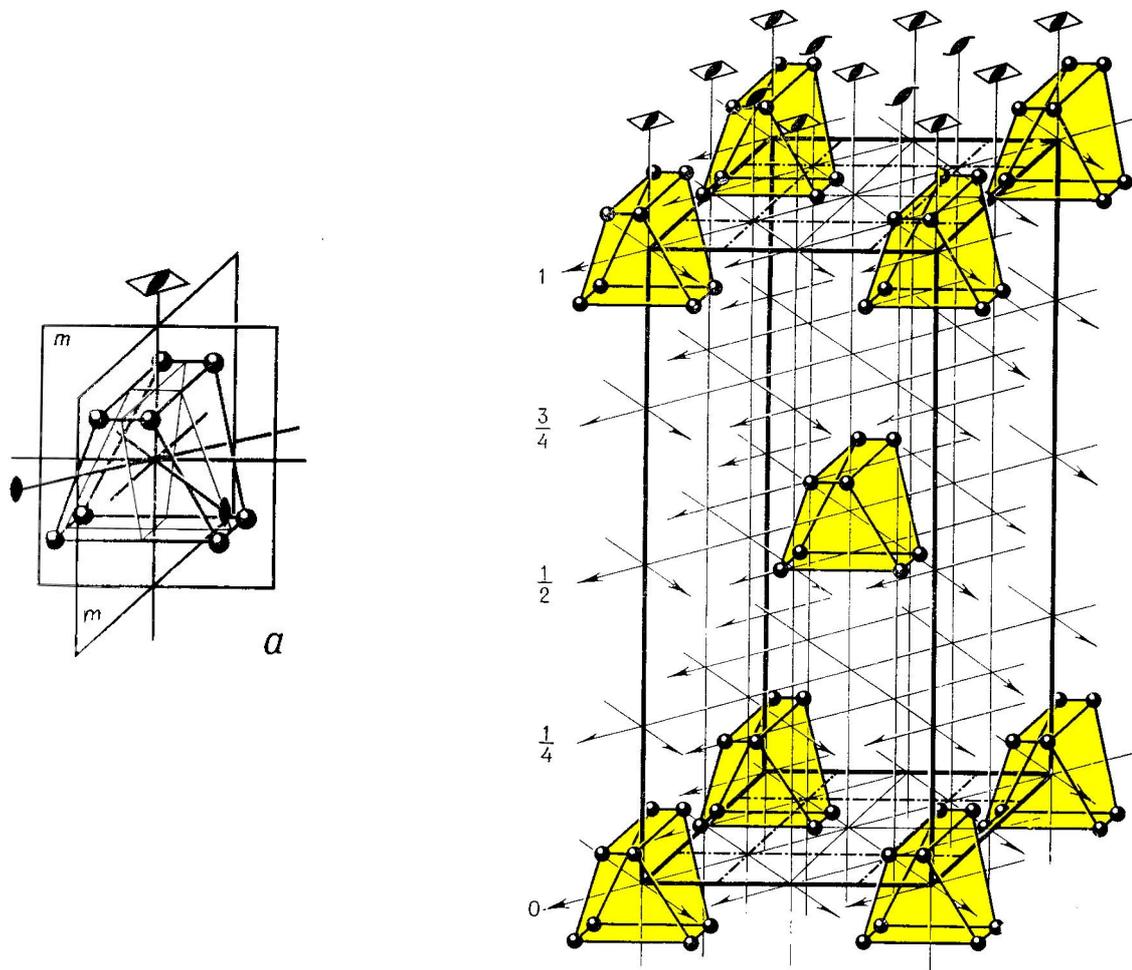
1. Назовите основной элемент симметрии бесконечных закономерных объектов.
2. Дайте характеристику винтовых осей симметрии.
3. Назовите количество винтовых осей 6-го порядка. Охарактеризуйте каждую ось.
4. В чем различие правой и левой винтовой оси?
5. При каком сочетании операций симметрии возникают плоскости скользящего отражения?
6. Чему равна величина трансляционной компоненты плоскости скользящего отражения?
7. Назовите два типа плоскостей скользящего отражения. В чем их сходство и различие?
8. Дайте характеристику осям 4_1 , 4_2 и 4_3 .
9. Дайте характеристику осям 3_1 и 3_2 .
10. Дайте характеристику оси 2_1 .
11. Охарактеризуйте плоскости a , b , c , n , d .
12. Определите понятие «клиноплоскость».
13. При каком сочетании операций симметрии возникают винтовые оси?

Литература

1. Современная кристаллография. В 4 т. Т 2. Структура кристаллов. /Под ред. Б. К. Вайнштейна М.: Наука, 1979. 359 с.
2. Теория симметрии кристаллов. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Под ред Урусова В. С. <http://geo.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=01-2.htm>

11. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ СИММЕТРИИ

Периодическая закономерность расположения атомов и других структурных единиц в кристалле подчинена строгим законам, всевозможные сочетания элементов и операций симметрии бесконечных закономерных построек описываются пространственными группами симметрии. Вывод пространственных групп симметрии выполнили в 1890 г. русский кристаллограф и минералог Е. С. Федоров и немецкий математик Артур Шенфлис. Каждая из 230 групп пространственной симметрии кристаллов может быть получена, если умножить (в соответствии с правилами группового умножения) каждую из 14 типов элементарных ячеек Браве на каждую из 32 групп точечной симметрии. Пример приведен на рисунке 35.



6

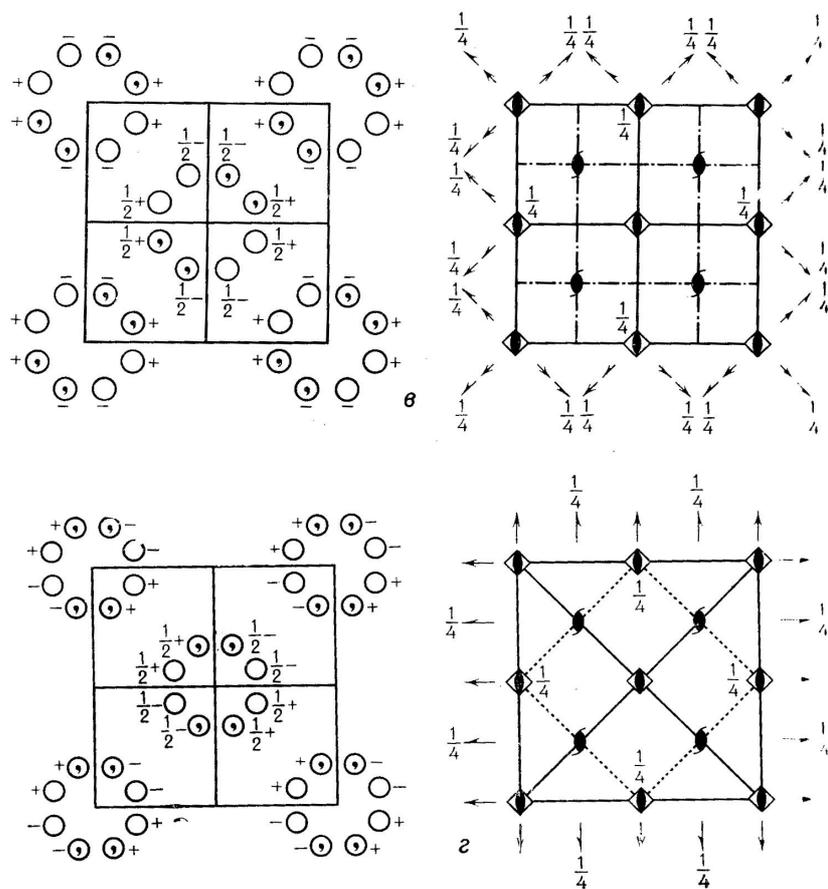


Рис. 35. Образование пространственных групп $I\bar{4}m2$ и $I\bar{4}2m$ как произведения точечной группы $\bar{4}2m$ и тетрагональной объемноцентрированной группы Браве I .

Для получения пространственных групп $I\bar{4}m2$, $I\bar{4}2m$, приведенных на рис. 35, нужно объемноцентрированную ячейку Браве I умножить на точечную группу $\bar{4}2m$. Пространственные группы симметрии приведен в табл. 5 [1-5].

Таблица 5

Федоровские группы Φ
(симорфные Φ_c , гемисиморфные Φ_s , асиморфные Φ_a)

Φ_c	Φ_s	Φ_a
$C_1^1 - P1$		
$C_i^1 - \bar{P}1$		
$C_2^1 - \bar{P}2$		$C_2^2 - P2_1(2)$
$C_2^3 - B2$		
$C_3^1 - Pm$	$C_s^2 - Pb(2)$	
$C_s^3 - Bm$	$C_s^4 - Bb(2)$	
$C_{2h}^1 - P2/m$	$C_{2h}^4 - P2/b(2)$	$C_{2h}^2 - P2_1/m$, $C_{2h}^5 - P2_1/b(4)$
$C_{2h}^3 - B2/m$	$C_{2h}^6 - B2/b(2)$	
$D_2^1 - P222$		$D_2^2 - P222_1(2)$ $D_2^3 - P2_12_12(4)$ $D_2^4 - P2_12_12_1(8)$
		$D_2^5 - P222_1(2)$
$D_2^6 - C222$		
$D_2^7 - F222$		
$D_2^8 - I222$		$D_2^9 - I2_12_12_1(8)$
$C_{2v}^1 - Pmm2$	$C_{2v}^3 - Pcc2(2)$ $C_{2v}^4 - Pma2(2)$ $C_{2v}^6 - Pnc2(4)$ $C_{2v}^8 - Pba2(4)$ $C_{2v}^{10} - Pnn2(8)$	$C_{2v}^2 - Pmc2_1(2)$ $C_{2v}^5 - Pca2_1(4)$ $C_{2v} - Pmn2_1(4)$ $C_{2v}^9 - Pna2_1(8)$
$C_{2v}^{11} - Cmm2(2)$	$C_{2v}^{13} - Ccc2(2)$	$C_{2v}^{12} - Cmc2_1(2)$
$C_{2v}^{14} - Amm2$	$C_{2v}^{15} - Abm2(4)$ $C_{2v}^{16} - Ama2(2)$ $C_{2v}^{17} - Aba2(4)$	
$C_{2v}^{18} - Fmm2$	$C_{2v}^{19} - Fdd2(8)$	
$C_{2v}^{20} - Fmm2$	$C_{2v}^{21} - Iba2(8)$ $C_{2v}^{22} - Ima2(8)$	

Продолжение табл. 5

$D_{2h}^1 - Pmmm$	$D_{2h}^2 - Pnnn(8)$	$D_{2h}^5 - Pmma(2)$
	$D_{2h}^3 - Pccm(2)$	$D_{2h}^6 - Pnna(8)$
	$D_{2h}^4 - Pban(8)$	$D_{2h}^7 - Pmna(4)$ $D_{2h}^8 - Pcca(4)$
		$D_{2h}^9 - Pbam(4)$ $D_{2h}^{10} - Pccn(8)$
		$D_{2h}^{11} - Pbcm(4)$ $D_{2h}^{12} - Pnnm(8)$
		$D_{2h}^{13} - Pmmn(4)$ $D_{2h}^{14} - Pbcn(8)$
		$D_{2h}^{13} - Pmmn(4)$ $D_{2h}^{14} - Pbcn(8)$
		$D_{2h}^{15} - Pbca(8)$ $D_{2h}^{16} - Pmna(8)$
$D_{2h}^{19} - Cmmm$	$D_{2h}^{20} - Cccm(2)$	$D_{2h}^{17} - Cmcm(2)$
	$D_{2h}^{21} - Cmma(4)$	$D_{2h}^{18} - Cmca(8)$
	$D_{2h}^{22} - Ccca(8)$	
$D_{2h}^{23} - Fmmm$	$D_{2h}^{24} - Fddd(8)$	
$C_{3i}^1 - P\bar{3}$		
$C_{3i}^2 - R\bar{3}$		
$D_3^1 - P312$		$D_3^3 - P3_112(3)$ $D_3^5 - P3_212(3)$
$D_3^2 - P321$		$D_3^4 - P3_121(3)$ $D_3^6 - P3_221(3)$
$D_3^7 - R32$		
$C_{3v}^1 - P3m1$	$C_{3v}^3 - P3c1(2)$	
$C_{3v}^2 - P31m$	$C_{3v}^4 - P31c(2)$	
$C_{3v}^5 - R3m$	$C_{3v}^6 - R3c(2)$	
$D_{3d}^1 - P\bar{3}1m$	$D_{3d}^2 - P\bar{3}1c(2)$	
$D_{3d}^3 - P\bar{3}m1$	$D_{3d}^4 - P\bar{3}c1(2)$	
$D_{3d}^5 - R\bar{3}m$	$D_{3d}^6 - R\bar{3}c(2)$	
$C_6^1 - P6$		$C_6^2 - P6_1(6)$ $C_6^3 - P6_5(6)$
		$C_6^5 - P6_2(3)$ $C_6^5 - P6_4(3)$
		$C_6^6 - P6_3(2)$

Продолжение табл. 5

$C_{3h}^1 - P6$		
$C_{6h}^1 - P6/m$		$C_{6h}^2 - P6_3/m(2)$
$D_6^1 - P622$		$D_6^2 - P6_122(6)$ $D_6^3 - P6_522(6)$
		$D_6^4 - P6_222(3)$ $D_6^5 - P6_422(3)$
		$D_6^6 - P6_322(6)$
$C_{6v}^1 - P6mm$	$C_{6v}^2 - P6cc(2)$	$C_{6v}^3 - P6_3cm(2)$
		$C_{6v}^4 - P6_3mc(2)$
$D_{3h}^1 - P\bar{6}m2$	$D_{3h}^2 - P\bar{6}c2(2)$	

$D_{3h}^2 - P\bar{6}2m$	$D_{3h}^4 - P\bar{6}2c(2)$	
$D_{6h}^1 - P6/mmm$	$D_{6h}^2 - P6/mcc(2)$	$D_{6h}^3 - P6_3/mcm(2)$ $D_{6h}^4 - P6_3/mmc(2)$
$T^1 - P23$		$T^4 - P2_13(8)$
$T^2 - F23$		
$T^3 - I23$		$T^5 - I2_13(8)$
$T_h^1 - Pm\bar{3}$	$T_h^2 - Pn\bar{3}(8)$	$T_h^6 - Pa\bar{3}(8)$
$T_h^3 - Fm\bar{3}$	$T_h^4 - Fd\bar{3}(16)$	
$T_h^5 - Im\bar{3}$		$T_h^7 - Ia\bar{3}(8)$
$O^1 - P432$		$O^2 - P4_232(8)$ $O^6 - P4_332(16)$
		$O^7 - P4_132(16)$

Примечание. Цифры в скобках для Φ_c и Φ_a указывают, во сколько раз следует увеличить объем элементарной ячейки Φ_c , чтобы получить указанную подгруппу.

Контрольные вопросы

1. Кто является автором вывода 230 пространственных групп симметрии?
2. Каким образом можно вывести каждую из 230 пространственных групп симметрии?

Литература

1. Васильев Д. М. Физическая кристаллография. М.: Металлургия, 1981. 248 с.
2. Вайнштейн Б. К. Симметрия кристаллов. М.: Наука, 1979. 384 с.
3. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г. П. Теория симметрии кристаллов.

/Под ред Урусова В. С.

<http://geo.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=01-2.htm>

4. Костов И. Кристаллография. М.: Мир, 1965. 528 с.
5. Шубников А. В., Копцик В. А. Симметрия в науке и искусстве. М.: Наука, 1972. 340 с.

12. ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ (на примере кристаллов кварца)

Пьезоэлектрический эффект - возникновение электрической поляризации под действием механического напряжения. Величина и знак поляризации зависят от приложенного напряжения. **Обратный пьезоэлектрический эффект** – возникновение механической деформации кристаллов вследствие приложенного электрического поля,

величина и тип деформации зависят от величины и знака поля. Пьезокристаллы могут использоваться как преобразователи электрической энергии в механическую.

Обозначим: \mathbf{P} – вектор электрической поляризации, \mathbf{D} – вектор электростатической индукции, \mathbf{T}_{ij} – тензор механических напряжений (ϵ_{ij} – тензор деформаций).

$$\text{Вектор (тензор I)} = \text{тензор III} \times \text{тензор II}$$

В общем случае каждая компонента вектора \mathbf{P} связана с каждой компонентой тензора \mathbf{T}_{ij} соотношением

$$P_i = d_{i11}T_{11} + d_{i12}T_{12} + d_{i13}T_{13} + d_{i21}T_{21} + d_{i22}T_{22} + d_{i23}T_{23} + d_{i31}T_{31} + d_{i32}T_{32} + d_{i33}T_{33} \text{ или}$$

$$P_i = d_{ijk}T_{jk}$$

Двадцать семь компонент d_{ijk} образуют тензор пьезоэлектрических модулей. Из-за симметрии тензора механических напряжений $T_{ij} = T_{ji}$ число независимых компонент тензора d_{ijk} сокращается до 18

$$d_{ijk} = d_{ikj}$$

Тензор пьезоэлектрических модулей d_{ijk} в сокращенных матричных обозначениях имеет вид:

$$\begin{aligned} d_{i11} &\rightarrow d_{i1} & d_{i22} &\rightarrow d_{i2} & d_{i33} &= d_{i3} \\ 2d_{i23} &= d_{i4} & 2d_{i31} &= d_{i5} & 2d_{i12} &= d_{i6} \end{aligned}$$

В выражении $P_m d_{mn} T_n$ $m=1,2,3$, $n=1,2,3,4,5,6$.

В таблицах приведены матрица пьезомодулей и типы пьезоэффектов.

Матрица пьезомодулей

	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6
P_1	d_{11}	d_{12}	d_{13}	d_{14}	d_{15}	d_{16}
P_2	D_{21}	d_{22}	d_{23}	d_{24}	d_{25}	d_{26}
P_3	d_{31}	d_{32}	d_{33}	d_{34}	D_{35}	d_{36}

Четыре типа пьезоэффектов

Поляри- зация	Напряжение					
	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6
P_1	$L_{эф}$	$T_{эф}$	$T_{эф}$	L_s	T_s	T_s
P_2	$T_{эф}$	$L_{эф}$	$T_{эф}$	T_s	L_s	T_s
P_3	$T_{эф}$	$T_{эф}$	$L_{эф}$	T_s	T_s	L_s

Коэффициенты $L_{эф}$ и $T_{эф}$ характеризуют электрическую поляризацию, вызванную напряжением сжатия или растяжения; коэффициенты L_s и T_s - поляризацию, вызванную напряжением сдвига.

$L_{эф}$ (пьезомодули d_{11} , d_{22} , d_{33}) характеризуют связь между растягивающим (или сжимающим) напряжением и поляризацией в том же направлении.

$T_{эф}$ (поперечные эффекты): поляризация, перпендикулярная вызывающей ее деформации растяжения (сжатия) определяется пьезомодулями d_{12} , d_{13} , d_{23} , d_{32} , d_{31} , d_{21} .

L_s (эффекты продольного сдвига): поляризация параллельна оси сдвига и перпендикулярна к плоскости сдвига (пьезомодули d_{14} , d_{25} , d_{36}).

T_s (эффекты поперечного сдвига): сдвиговое напряжение вызывает поляризацию в плоскости сдвига, поперечную к оси сдвига. Связь между вектором поляризации и сдвиговым напряжением определяется пьезомодулями d_{15} , d_{16} .

Контрольные вопросы

1. Определите понятия «пьезоэлектрический эффект», «обратный пьезоэлектрический эффект».
2. Сколько компонент в тензоре пьезоэлектрических модулей d_{ijk} ?
3. Запишите уравнение, связывающее компоненты вектора электрической поляризации P компонентами тензора механических напряжений T_{ij} .
4. Укажите причину сокращения числа независимых компонент тензора пьезоэлектрических модулей d_{ijk} .
5. Охарактеризуйте матрицу пьезомодулей.
6. Какие типы пьезоэффектов Вы знаете?
7. Какое явление характеризуют коэффициенты $L_{эф}$ и $T_{эф}$?
8. Какое явление характеризуют коэффициенты L_s и T_s ?

13. ПРЕДМЕТ МИНЕРАЛОГИИ

1. СТРУКТУРА И ФАЗОВЫЕ ОТНОШЕНИЯ В ПОЛЕВЫХ ШПАТАХ

1.1. Химический и фазовый состав

Химический состав полевых шпатов (ПШ) выражается формулой: AB_4O_8 , где А – крупные катионы K^+ , Na^+ , Ca^{2+} иногда Ba^{2+} , в небольшой мере Rb^+ , Cs^+ , Li^+ , Sr^{2+} , Pb^{2+} , Mg^{2+} ,

а В – катионы малого размера составляющие непосредственно сам каркас (Al^{3+} , Si^{4+} , в небольшой мере Fe^{2+} , Fe^{3+} , Ti^{4+} , B^{3+}) [9,10]. Наиболее распространенные ПШ в природе входят в тройную систему: $KAlSi_3O_8$ (Or) – $NaAlSi_3O_8$ (Ab) – $CaAl_2Si_2O_8$ (An) (рис.1.1), в которой намечается две изоморфных серии: 1) калиевые и бариевые ПШ (щелочные полевые шпаты - ЩПШ), моноклинные или очень близкой к моноклинной симметрией и 2) натриевые и кальциевые ПШ (плаггиоклазы), строго триклинные [6,12]. Два очень редких ПШ – бариевый банальсит и стронциевый стрональсит – имеют ромбическую сингонию [13].

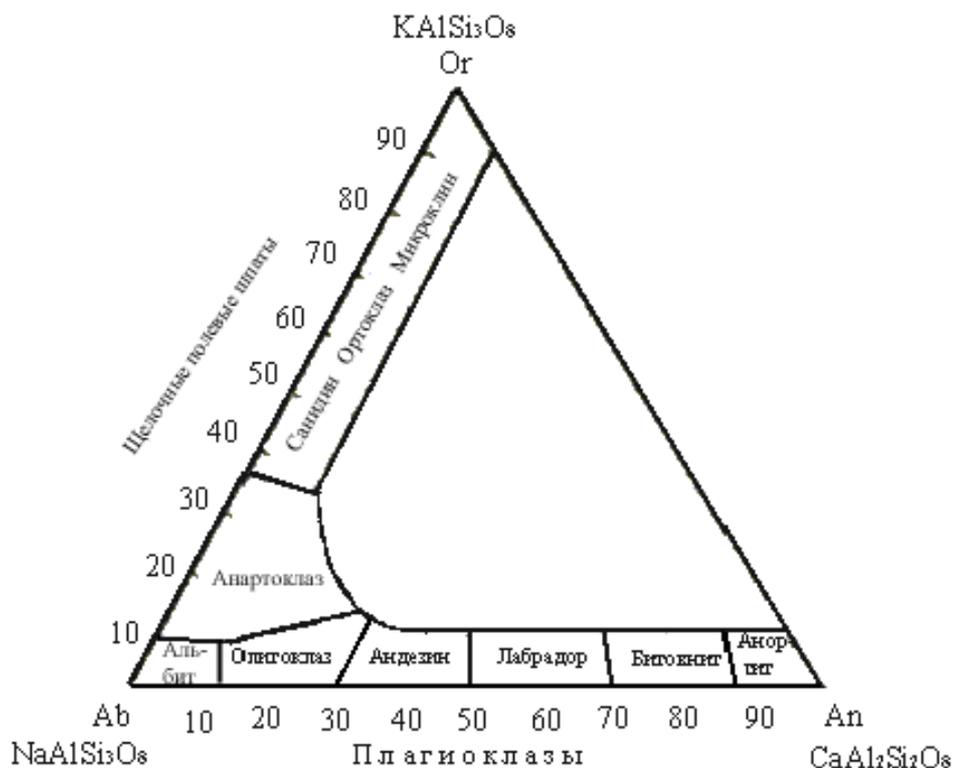


Рис. 1.1. Состав и номенклатура высокотемпературных ПШ [21]

1.2. Структура полевых шпатов

Для понимания взаимосвязи между отдельными членами полевошпатовой системы необходимо учитывать не только их химический состав, но и структурное состояние, зависящее как от температуры кристаллизации, так и от последующей температурной истории минерала.

ПШ, которые после охлаждения сохраняют структуру, присущую им при высоких температурах, называются высокотемпературными. Низкотемпературные шпаты либо кристаллизовались при низкой температуре, либо медленно охлаждались [1].

Калиевый конечный член системы KAlSi_3O_8 имеет несколько наименований для различных структурных разновидностей. Высокотемпературные разновидности носят название санидин; более низкотемпературные – ортоклаз [12]; наиболее низкотемпературные – микроклин [1]. Полевые шпаты бария весьма незначительны и состоят из цельзиана ($\text{BaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$) и гиалофана ($(\text{K}, \text{Na}, \text{Ba})(\text{Al}, \text{Si})_4\text{O}_8$) [118,119].

Калиевый ПШ может существовать в различных структурных состояниях. Структуру высокотемпературного санидина и характер распределения Si и Al по тетраэдрическим позициям в нем исследовали Коль с сотрудниками. Определение структуры ортоклаза Джонсоном и Тейлором показало, что в нем имеет место частичное упорядочение атомов кремния и алюминия; симметрия моноклиная, или наблюдается незначительное отклонение от моноклиной. По Лавесу, ортоклаз представляет собой субмикроскопически сдвойникованные триклинные домены. Микроклин – наиболее низкотемпературная форма калиевого ПШ. Гольдшмит и Лавес показали, что решетка микроклина меняется в широких пределах, от моноклиной до триклинной [4].

Чисто натриевый ПШ $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ называется альбит. В зависимости от его структурного состояния выделяют высокотемпературные (неупорядоченные), низкотемпературные (упорядоченные) и промежуточные разновидности [1]. Установлено, что альбит при температуре $700 \pm 25^\circ$ переходит в высокотемпературную модификацию, которую Лавес называет анальбитом [4].

Высокотемпературные разновидности K-Na ПШ образуют непрерывный изоморфный ряд между санидином и высоким альбитом. Приблизительно при 40 % Or в серии высокотемпературных K-Na ПШ происходит переход из моноклиной сингонии в триклинную [1]. Так например, температура структурного перехода ортоклаз → микроклин по данным разных авторов варьирует от 375°C до 450°C . По данным катионообменных равновесий, температуры перехода ортоклаз → микроклин лежат ниже 400°C . На основе имеющихся данных можно сделать вывод о том, что триклинные ПШ в природных условиях образуются при температуре ниже 400°C [16].

Эти разновидности K - Na подгруппы представляют непрерывную серию твердых растворов, но при охлаждении наблюдается распад смесимости [17]. Поэтому низкотемпературные разновидности не гомогенны и представляют смесь калиевой и натриевой фаз с размерами выделений от субмикроскопических до видимых невооруженным глазом [1].

1.2.1. Структура K-Na ПШ

Главная структурная особенность ПШ – размещение атомов Si, Al внутри тетраэдров из атомов O, чему благоприятствует отношение ионных радиусов [7]. В структуре ПШ намечаются цепочки из четверных колец SiO_4^- и AlO_4^- тетраэдров (рис.1.2) [18], вытянутые вдоль оси с (рис.1.3), и положительно заряженных ионов Na^+ , K^+ , Ca^{2+} и Ba^{2+} , расположенных в промежутках отрицательно заряженного каркаса [12]. Эти цепочки, соединяясь друг с другом (рис.1.4) образуют каркас, в пустотах которого располагаются атомы А (рис.1.5), имеющие координационные числа, равные 8(Ca), 9(Ba) и 10(K). Элементы В могут располагаться в двух неэквивалентных положениях (рис.1.6): B_1 - с атомами O, имеющими в ближайшем окружении два атома А; и B_2 - с атомами O, имеющими по соседству лишь один атом А [19].

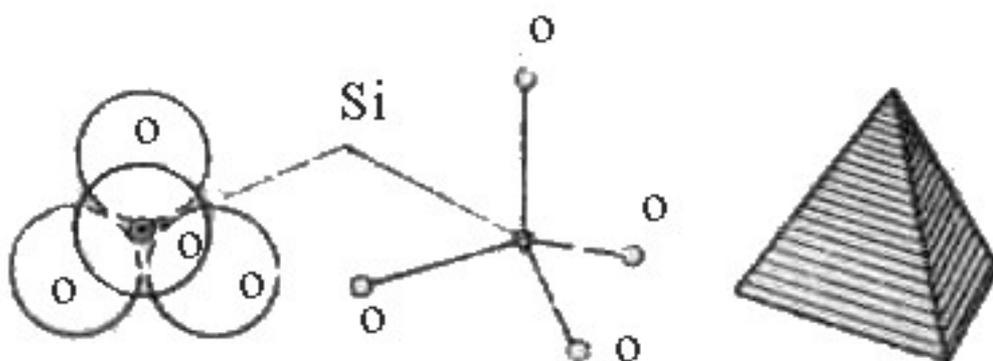


Рис. 1.2. Схематическое изображение кремнекислородного тетраэдра [12]

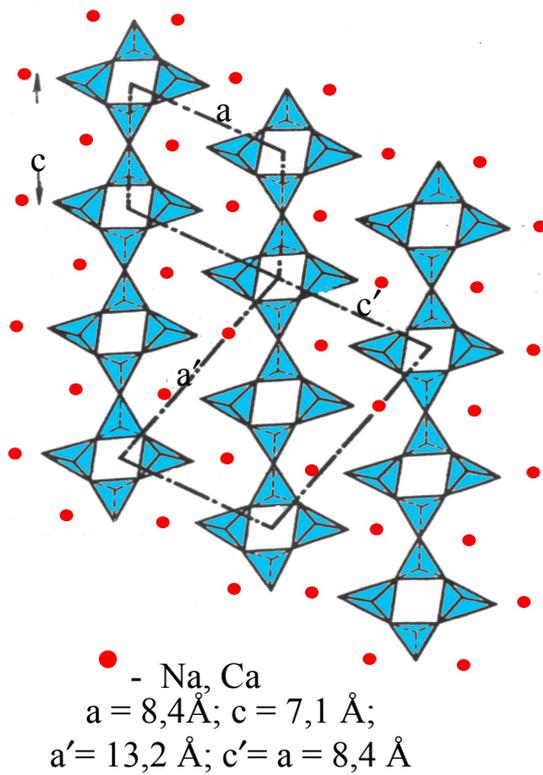


Рис. 1.3. Цепочки из четверных колец SiO_4 - и AlO_4 - тетраэдров
(черные кружки—катионы K^+) [9]

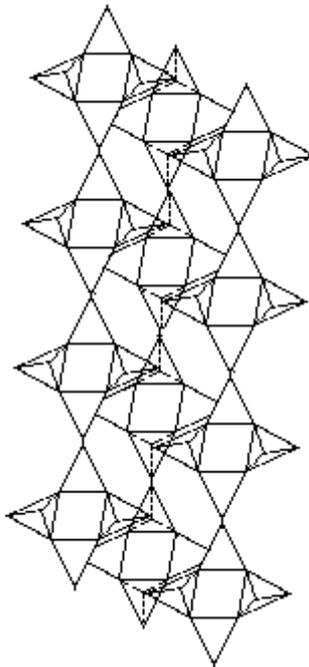


Рис. 1.4. Способ соединения отдельных цепочек друг с другом [9]

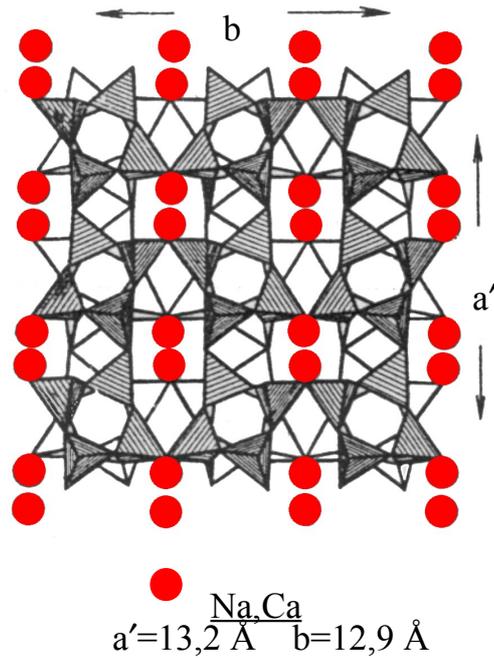


Рис.1.5. Структура полевых шпатов [9]

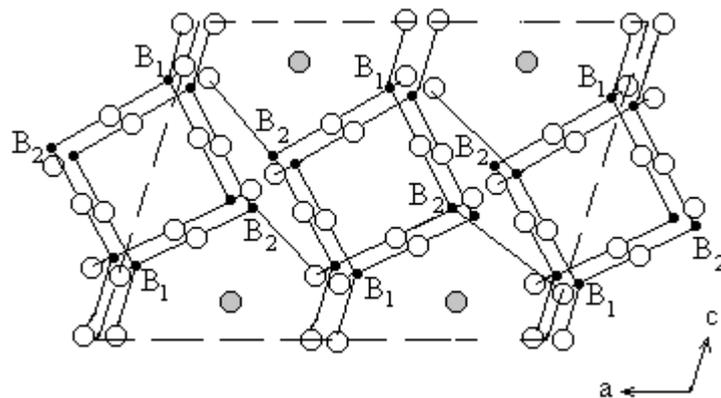


Рис.1.6. Шариковая модель структуры в проекции на (010) [9].

Серые кружки – атомы B_1 и B_2 , не залитые кружки – атомы O,
 черные – атомы A.

В структуре ПШ можно выделить единую основу – элементарный параллелепипед с параметрами: $a \approx 8,6$; $b \approx 13,0$; $c \approx 7,1 \text{ \AA}$; $\alpha \approx 90^\circ$; $\beta \approx 116^\circ$; $\gamma \approx 90^\circ$. У части ПШ – микролина, ортоклаза, санидина, альбита подобный параллелепипед отвечает элементарной ячейке. Это так называемые семиангстремные ПШ. У других

элементарная ячейка отвечает удвоенному по c параллелепипеду. Это наблюдается у кальциевых и бариевых ПШ – анортита, цельзиана и поэтому они называются четырнадцатиа́нгстремными [19]. В ПШ с одновалентными катионом Al:Si составляет 1:3; эти ПШ имеют ячейку с ребром $c=7\text{Å}$. ПШ, имеющие Al:Si около 2:2 (1:1), характеризуются 14Å по c ячейкой [20].

1.2.2. Структура плагиоклазов

Согласно последним данным, анортит существует в трех модификациях: обычной триклинной и недавно открытых ромбической и гексагональной, не являющихся аналогами соответствующих модификаций $\text{BaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$. Получение двух последних модификаций описывают Дэвис и Таттл. При высоких температурах гексагональный и ромбический анортит переходит в обычный триклинный, но в присутствии воды для такого перехода достаточно 700° . Последнее обстоятельство заставляет считать новые модификации анортита метастабильными [4].

Основной мотив структуры плагиоклазов аналогичен K-Na ПШ. Но замещение натрия на кальций и увеличение содержания алюминия приводит к ряду особенностей [28]. Промежуточные химические члены серии альбит-анортит обладают сложной структурой, что связано не только с невозможностью топологической совместимости структурных схем Al:Si=1:3 и Al:Si=1:1, но и с расширением каркаса при вхождении Al и его сжатия при замене Na на Ca. Структурные вариации также усложняются наличием высоких и низких плагиоклазов серий и широкой промежуточной по температурному режиму области [20].

Структурные разновидности отличаются по степени упорядоченности и симметрии кристаллической решетки [1].

1.3. Упорядоченность

В связи с описанными особенностями структуры в ПШ могут проявляться три типа беспорядка: 1) беспорядочное распределение катионов A в положениях с КЧ 8,9,10; 2) беспорядочное расположение катионов в позициях B_1 и B_2 ; 3) беспорядочное чередование семиангстремных параллелепипедов, что обуславливает появление среди ПШ высокотемпературных модификаций с неупорядоченной структурой [19].

Распределение алюминия и кремния может быть беспорядочным и упорядоченным. Благодаря тому, что каркас имеет крупные пустоты, плотность каркасных алюмосиликатов является низкой. Из-за наличия таких пустот в структуре во многих минералах этого подкласса широко проявляются вариации состава, не затрагивающие каркаса [11].

Согласно В.Х. Тейлору каркас ПШ (рис.1.5) построен из кремнекислородных тетраэдров (рис.1.2), в котором, в зависимости от химического состава, от одной четверти до половины тетраэдрических катионов Si замещены Al. Основным строительным блоком в таком каркасе, по Тейлору, являются кольца из четырех алюмокремнекислородных тетраэдров, центры которых (занятые катионами Si и Al) в общем случае имеют структурно различные позиции (A_1 , A_2 , B_1 , B_2 , см. рис.1.7). Размеры каждого из этих тетраэдров, заселенных Si и Al, и их взаимное расположение в основном и определяют симметрию и параметры кристаллической решетки ПШ. А величина индивидуальных тетраэдров определяется расстоянием катион-кислород, которое для Si-O составляет $1,54 \div 1,61 \text{ \AA}$, а для Al-O - $1,72 \div 1,75 \text{ \AA}$ [21,22].

При этом следует отметить, что алюмокислородный тетраэдр по сравнению с кремнекислородным имеет отрицательный некомпенсированный заряд. Для образования электрически нейтральной системы в решетку входят катионы K^+ , Na^+ и Ca^+ [1].

В подгруппе К - Na ПШ на элементарное кольцо из четырех тетраэдров статистически приходится один катион алюминия, что отличает соединения этой подгруппы в отношении возможных вариаций симметрии анионного каркаса от плагиоклазов, характеризующихся переменным соотношением Si^{4+} и Al^{3+} . Тем не менее, и в подгруппе К - Na ПШ установлены как моноклинные, так и триклинные разновидности, сближающие соединения этой подгруппы с плагиоклазами [21].

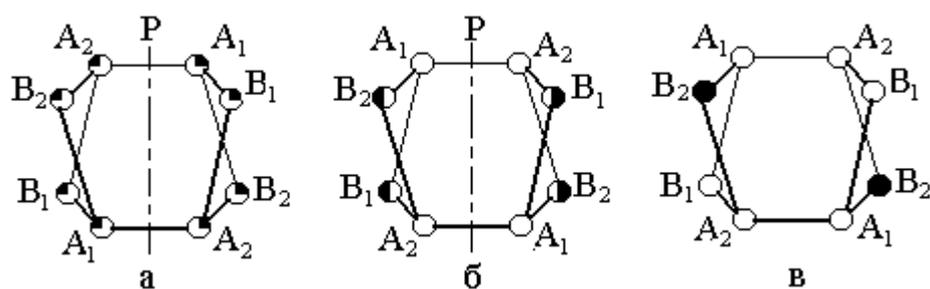


Рис. 1.7. Схема распределения алюминия по структурно различным тетраэдрическим позициям в санидине (а), ортоклазе (б) и микроклине (в). [21]

На рисунке 1.7 изображена проекция на плоскость (001). Степень зачернения кружков соответствует степени концентрации Al^{3+} в каждой позиции. P – плоскость симметрии. Номенклатура тетраэдрических позиций по Ф. Лавесу [21].

Установлено, что в санидинах имеет место статистически полностью не упорядоченное распределение алюминия в четырех структурно неэквивалентных позициях (но как правило наблюдается незначительный избыток Al^{3+} в положении T_1 (Т-катион)), в связи с чем решетка санидина приобретает моноклинную симметрию (рис. 1.7, а). Для ортоклаза характерно частично упорядоченное распределение атомов алюминия, которые в равной мере размещаются в двух из четырех тетраэдрических позиций элементарного блока структуры [67]. Такое распределение алюминия отвечает 50%-ной степени упорядоченности структуры при сохранении моноклинной симметрии кристаллической решетки (рис. 1.7, б). При переходе от ортоклаза к микроклину осуществляется дальнейшее упорядочение в распределении атомов алюминия, которые все более концентрируются в одной позиции – в тетраэдрах типа V_2 . Симметрия соединения снижается до триклинной (рис. 1.7, в) [21].

В образце типичного микроклина, по данным рентгеноструктурного анализа, доля атомов алюминия, располагающихся в позициях A_1 , A_2 , V_1 и V_2 , оказалась равной соответственно 7, 8, 26 и 59 % [66], что не отвечает предположению о полностью упорядоченном распределении Al в решетке микроклина. Последнее, согласно Т. Барту, должно приближаться к соотношениям 0:0:0:100%. В связи с этим и отклонение симметрии изученного образца от моноклинной ($\gamma=89^\circ 7'$) оказалось далеко не достигающим максимального значения для микроклина – $\gamma=87^\circ 30'$ [12].

Вариации угла γ в природных микроклинах позволили И.Гольдсмит и Ф. Лавесу рассматривать минерал как триклинную модификацию КПШ с переменной степенью упорядоченности структуры в пределе достигающей 100%. И они же высказали предположение о наличии линейной зависимости между углом γ (показатель триклинной деформации решетки микроклинов) и степенью упорядоченности распределения в ней атомов алюминия и кремния. Микроклины с углами γ , близкими к 90° , было предложено называть «промежуточными» в противоположность «максимальным» микроклинам. Установленные межатомные расстояния (Al,Si)-O для максимальных микроклинов полностью подтвердили справедливость этой концепции [21].

В связи с трудностями определения угла γ ПШ И. Гольдсмитом и Ф. Лавесом, в качестве меры упорядоченности структуры КПШ, было предложено использовать угловые расстояния между отражениями от сеток $1\bar{3}1$ и 131 триклинной решетки ПШ. Это расстояние является линейной функцией углов γ и α и увеличивается с возрастанием степени косоугольности (триклинности) решетки. Для моноклинных ПШ

оба рефлекса на рентгенограммах сливаются (линия 131), у триклинных же они индивидуализированы, причем наибольшее для микроклинов расстояние между рефлексами $(1\bar{3}1)$ и (131) составляет $0,08 \text{ \AA}$. Максимально возможная в этом диапазоне величина была принята за единицу и явилась мерой триклинности решетки ЩПШ. Переходный коэффициент, связывающий величину максимальной триклинной деформации решетки микроклина с межплоскостными расстояниями $d_{1\bar{3}1} - d_{131}$, равен $1:0,08=12,5$ [21]. Отсюда степень триклинности индивидуальных образцов ЩПШ определяется по формуле (1.1):

$$\Delta p = 12,5(d_{1\bar{3}1} - d_{131}) \quad (1.1),$$

где Δp - степень триклинности, меняющаяся от 0 до 1; $d_{1\bar{3}1}$ и d_{131} – межплоскостные расстояния линий $(1\bar{3}1)$ и (131) .

Простота и относительно высокая точность измерения степени триклинности ($\pm 0,05\Delta p$), которая очень мало зависит от состава ЩПШ, открывали широкие возможности для количественной оценки их структурного состояния. Но чувствительность этого метода сильно ограничена двойникованием, распространенным в ПШ, особенно в триклинных. В случае субрентгеновского двойникования триклинного ПШ, когда размеры двойниковых индивидов соизмеримы с длиной волны рентгеновского излучения, расщепления рефлекса может и не происходить. В таком случае дифракционная картина будет полностью отвечать рентгенограмме моноклинной фазы [21].

В 1966-1968 гг. была опубликована серия работ, посвященных методам изучения структурного состояния ЩПШ в широком интервале химического состава. Ф. Лавес и др. попытались увязать оптические свойства и параметры a^* , b^* , c^* обратной решетки натриево-калиевых шпатов с их составом и структурным состоянием [21].

П. Оривиллю удалось связать метрику решетки и состав ПШ в двойных сериях санидин – «высокий» альбит и микроклин – «низкий» альбит. Он также внес уточнения в диаграмму Н. Боуэна и О. Таттла [65] для определения состава ЩПШ по отражению $(\bar{2}01)$ и показал зависимость степени триклинности решетки ЩПШ как от их структурного состояния, так и от химического состава [21].

Используя методику Орвиля, Т. Райт и Д. Стьюарт исследовали метрику решетки тройной серии: санидин – «высокий» альбит, ортоклаз – «промежуточный» альбит, микроклин – «низкий» альбит [21].

Характерной особенностью твердых растворов является их структурные превращения, связанные с упорядочением при заполнении разными атомами кристаллохимических позиций решетки. Это явление, обусловлено, в частности, перераспределением Al^{3+} и Si^{4+} , Mg^{2+} и Fe^{2+} , Ca^{2+} и Mg^{2+} и других пар атомов [24].

Современная номенклатура ЦПШ может быть рассмотрена лишь на основе данных по распределению Al^{3+} , Si^{4+} в их каркасе и с учетом их фазовых отношений.

В 1960 г. Ф.Лавес [64] проанализировал варианты распределения Al^{3+} и Si^{4+} по тетраэдрическим позициям, схемы упорядочения и вопросы номенклатуры ЦПШ [24].

Обратимся (рис. 1.8) к идеализированной проекции, по Лавесу, полевошпатового каркаса на плоскость (001) – проекции «собачья морда». В узлах изображенной на рис. 1.8, а сетки располагаются тетраэдрические атомы (т.е. центральные атомы $(Al, Si)O_4$ тетраэдров), позиции которых обозначены T_{10} , T_{1m} , T_{20} , T_{2m} . Атомы кислорода (на ребрах, соединяющих вершины сетки) и катионы (в больших полостях, которые видны на рисунке) не показаны [24, 25].

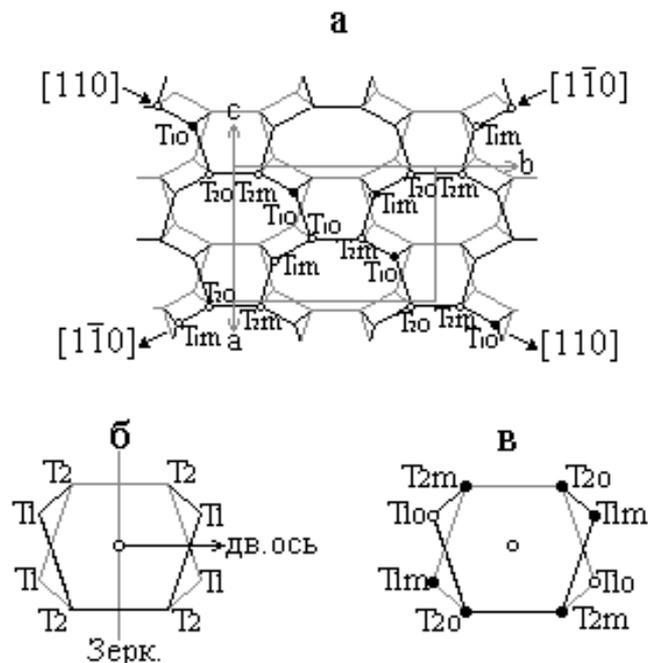


Рис. 1.8. Алюмокремнекислородный каркас ПШ [24]

В моноклинных ПШ симметрия отвечает $C2/m$. Наличие центра симметрии, зеркальной плоскости и двойной оси (см. рис. 1.8, б) обеспечивает тождественность

исходных (o – original) и отраженных (m – mirror) позиций [24]. В триклинной $C\bar{1}$ симметрии зеркальная плоскость и двойная ось пропадают [2], и идентичные ранее узлы распадаются на положения o и m (рис. 1.8, в):

$$2T_1 \rightarrow T_1o + T_1m; 2T_2 \rightarrow T_2o + T_2m. \quad (1.2)$$

Одинаковые положения связаны только центром симметрии.

В предельно неупорядоченных модификациях – максимально высоком санидине и мональбите (моноклинный NaПШ) – атомы Al, Si распределены практически поровну между T_1 и T_2 [114]. Доля атомов Al в общем его количестве, сосредоточенная в какой-либо позиции, обозначается буквой t с индексом этой позиции [56] и составляет в указанных модификациях $t_1 = t_2 = 0,25$ или $2t_1 (t_1o + t_1m) = 2t_2 (t_2o + t_2m) = 0,5$ [20]. Эти атомные доли Al в кристаллохимических позициях могут использоваться в качестве параметров, характеризующих порядок ПШ. При упорядочении наблюдается возрастание Al в T_1 . До каких значений атомной доли Al в позициях T_1 может упорядочиваться КПШ, оставаясь моноклинным, остается предметом дискуссии. Максимально упорядоченный моноклинный КПШ будем называть максимальным ортоклазом под которым, согласно Ф. Лавесу, понимается фаза, образующаяся метастабильно в поле триклинного КПШ – микроклина. В нем $t_1 = 0,5$ ($2t_1 = 1$); $t_2 = 0$ ($2t_2 = 0$). К санидинам относим моноклинные K, Na – ПШ, способные образовываться стабильно при температурах выше температур стабильности микроклина [24,25].

В триклинной решетке микроклинов и альбитов позиции T_1 и T_2 распадаются по схеме, данной на рис. 1.8, б, в. возрастание упорядоченности в этих решетках означает увеличение концентрации Al в T_1o . По мере увеличения разницы в содержаниях Al между T_1o и T_1m растет степень отклонения структуры от моноклинной симметрии. Предельный случай полной упорядоченности – концентрирование всего Al в T_1o – показан на рис. 1.8, а [24,25].

Разграничения разновидностей структурных форм показаны в таблице 1.1. Понятия «низкий санидин» и «высокий ортоклаз» частично совпадают в области $2t_1 \approx 0,70 - 0,75$ [24].

Термин «ортоклаз» используется также для обозначения компонента $KAlSi_3O_8$ в твердом растворе ПШ. Состав твердого раствора определяется через мольную долю ортоклазового ($X_{Or}(X)$) и альбитового ($X_{Ab} = 1 - X$) компонентов. Мольный процент соответствующего компонента выражается в индексе при символе компонента: например, $Or_{50}Ab_{50}$ означает $X = 0,5$ [24].

Номенклатура структурных разновидностей ПШ строится с учетом соотношений главных компонентов и структурного состояния, под которым понимается конкретный способ распределения Al по тетраэдрическим позициям [24].

Таблица 1.1

Разграничения структурных форм альбита и КПШ

ПШ	Уточненное обозначение	Концентрация Al в позициях T_1O или $2T_1$
Альбит	Максимально высокий = анальбит	$t_1O = 0,25$
	Высокий	$0,25 < t_1O \leq 0,43$
	Промежуточный	$0,43 < t_1O < 0,90$
	Низкий	$0,90 < t_1O \leq 1,00$
	Максимально низкий	$t_1O = 1,00$
Санидин	Максимально высокий	$2t_1 = 0,50$
	Высокий	$0,50 < 2t_1 < 0,60$
	Промежуточный	$0,60 \leq 2t_1 \leq 0,67$
	Низкий	$0,67 < 2t_1 < 0,75$
Микрклин, Ортоклаз	Высокий	$2t_1 = 0,75 \pm 0,05$
	Обычный	
	Промежуточный	$0,80 < 2t_1 < 0,95$
	Низкий	$0,95 \leq 2t_1 \leq 1,00$
	Максимальный	$2t_1 = 1,00$

14. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ

1. Подготовка теоретических вопросов к лабораторным работам.
2. Самостоятельная работа студента с коллекционным материалом кафедры.
3. Подготовка к каждой лекции по теоретическим вопросам, получаемым в конце предыдущей лекции (2-3 вопроса).
4. Подготовка к зачету, экзамену.
5. Выполнение курсовой работы в третьем семестре.

15. ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

Вопросы к зачету по кристаллографии (3 семестр)

1. Предмет кристаллографии. Основные понятия. Макроскопические признаки кристаллических веществ.
2. Исторические сведения. Периоды зарождения и развития кристаллографии: предыстория (до конца XVII в.), становление кристаллографии как науки (конец XVII в. – начало XIX в.), развитие классической кристаллографии (начало XIX в. – начало XX в.), современный период (с начала XX в.).

3. Операции и элементы симметрии конечных фигур. Элементы симметрии I и II рода, конгруэнтно равные и энантиоморфные фигуры.
4. Основной закон симметрии.
5. Правила взаимодействия операций симметрии и их использование при выводе 32 кристаллографических точечных групп. Осевая теорема Эйлера.
6. Математическая справка из теории групп. Понятие группы. Групповые аксиомы. Взаимодействие элементов симметрии – групповое умножение. Точечная группа симметрии – совокупность операций симметрии (на примере группы L_33L_2).
7. Методы проектирования кристаллов: сферические, стереографические, гномонические, гномостереографические проекции.
8. Закон постоянства углов (закон Н.Стенона) – основа гониометрии.
9. Символика точечных групп симметрии Бравэ, Шенфлиса, Германа-Могена.
10. Вывод 32 точечных групп симметрии в обозначениях по Шенфлису.
11. Группы с единичными направлениями.
12. Группы без единичных направлений.
13. Группы с единственной поворотной осью C_n, C_{nv}, C_{nh} .
14. Группа с плоскостью безразличной ориентации C_s .
15. Группы с побочными осями D_n, D_{nh}, D_{nd} , обоснование невозможности существования групп D_{nv} .
16. Группы со сложными (зеркальными, инверсионными) осями симметрии S_n .
17. Вывод точечных групп симметрии без единичных направлений. Группы T, O, T_d, T_h, O_h . Два способа вывода групп без единичных направлений.
18. Понятие категории, сингонии в кристаллографии.
19. Обозначения групп в различных номенклатурах: примитивные, центральные, планальные, аксиальные, планаксиальные, инверсионно-примитивные, инверсионно-планальные группы.
20. Элементарная ячейка (ячейка Бравэ). 14 типов ячеек Бравэ.
21. Символы граней и ребер кристаллов. Основные законы геометрической кристаллографии.
22. Индексы Вейса и Миллера. Индицирование. Четвертая ось в гексагональной кристаллографической системе координат.
23. Закон Гаюи – закон рациональности отношений параметров.
24. Понятие «единичная грань», ее выбор в кристаллах разных сингоний.
25. Символы ребер кристалла. Уравнение плоскости в кристаллографическом варианте. Связь между символами граней и ребер.

26. Закон Вейса – закон зон. Метод развития зон.
27. Морфология кристаллов. Понятие «простая форма кристаллов».
28. Вывод простых форм кристаллов в группах разных сингоний.
29. Классификация точечных групп симметрии по виду простых форм. Простые формы в группах с единичными направлениями. N-гонально-пирамидальные, ди-n-гонально-пирамидальные, n-гонально-бипирамидальные, трапецоэдрические, скаленоэдрические группы.
30. Простые формы в группах без единичных направлений. Два способа вывода.
31. 230 пространственных групп.
32. Трансляционные элементы симметрии.
33. Специфические для бесконечной кристаллической структуры элементы симметрии: плоскость скользящего отражения g и винтовые оси n_s .
34. Плоскости скользящего отражения $g: a, b, c$.
35. Клиноплоскости n и d .
36. Винтовые оси n_s .
37. Взаимодействие элементов микросимметрии.
38. Симморфные и несимморфные группы.
39. Гемисимморфные и асимморфные группы.
40. Переход от пространственной группы к точечной.
41. Физические свойства минералов.

16. ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

Вопросы к экзамену по минералогии (4 семестр)

1. Предмет минералогии. Основные понятия. Основы минералогической систематики.
2. Принципы описания минералов: химический состав, структура, формы выделения, физические свойства, генетические признаки минералов, генезис и парагенезис, парагенетические ассоциации минералов и их генетические признаки при разных условиях образования.
3. Тип I. Простые вещества. Класс самородных металлов и полуметаллов. Группа меди (Cu, Ag, Au). Группа платины-осьмия. Группа железа-никеля. Группа мышьяка (мышьяк, висмут, сурьма).
4. Класс неметаллов. Группа серы. Группа графита-алмаза.
5. Тип II: сульфиды (с селенидами, теллуридами, арсенидами). Класс 1: собственно сульфиды (с селенидами). Подкласс 1: Низшие сульфиды (моносulfиды). Отдел А: отдел минералов с координационной структурой. Группа акантита. Группа халькозина.

- Группа борнита. Группа сфалерита-вюрцита. Группа халькопирита (халькопирит, станин).
6. Группа галенита. Группа киновари-метациннабарита. Группа пирротина (троилит, пирротин). Группа пентландита.
 7. Отдел Б: низшие сульфиды с цепочечной структурой. Группа антимонита (антимонит, висмутин, хоробетсуит, селенистый висмутин).
 8. Отдел В: сульфиды со структурой иного типа. Группа реальгара (реальгар As_4S_4). Группа аурипигмента (аурипигмент As_2S_3). Группа ковеллина (ковеллин CuS). Группа молибденита (MoS_2). Подкласс 2: высшие сульфиды (персульфиды). Группа пирита-марказита (пирит FeS_2 кубич., марказит FeS_2 ромбич.). Группа кобальтина – арсенопирита. Кобальтин $CoAsS$. Арсенопирит $FeAsS$.
 9. Подкласс 3: Сульфосоли. Отдел А: островные сульфосоли. Группа прустита Прустит Ag_3AsS_3 . Пираргирит Ag_3SbS_3 . Группа энаргита. Энаргит Cu_3AsS_4 .
 10. Отдел Б: цепочечные и ленточные сульфосоли. Группа буланжерита – джемсонита. Буланжерит $Pb_5Sb_4S_{11}$. Джемсонит $FePb_4Sb_6S_{14}$.
 11. Отдел В: каркасные сульфосоли. Группа блеклых руд. Теннантит $Cu_{12}As_4S_{13}$. Тетраэдрит $Cu_{12}Sb_4S_{13}$.
 12. Класс 2: теллуриды. Группа алтаита. Алтаит $PbTe$. Группа тетрадимита. Тетрадимит Bi_2Te_2S . Группа сильванита. Сильванит $AuAgTe_4$.
 13. Класс 3: арсениды. Подкласс 1: низшие арсениды (моноарсениды). Группа никелина. Никелин $NiAs$.
 14. Подкласс 2: высшие арсениды (перарсениды). Группа леллинита. Леллингит $FeAs_2$. Саффлорит $(Co,Fe)As_2$. Раммельсбергит $NiAs_2$. Группа скуттерудита. Скуттерудит $CoAs_3$. Шмальтин $(Co,Ni,Fe)As_{3\pm x}$. Хлоантит $NiAs_3$.
 15. Тип III. Оксиды и гидроксиды. Класс 1: Оксиды. Подкласс 1: простые оксиды.
 16. Отдел А: минералы с координационной структурой. Подотдел 1: изометрические минералы. Группа уранинита. Уранинит, настуран $U_m^{4+} U_n^{6+} O_{2m \cdot 3n}$.
 17. Подотдел 2. Субцепочечные минералы. Группа рутила. Рутил TiO_2 . Касситерит SnO_2 . Пирролюзит MnO_2 .
 18. Подотдел 3. Субслоистые минералы. Группа корунда. Корунд Al_2O_3 . Гематит Fe_2O_3 .
 19. Отдел Б: минералы с каркасной структурой. Группа куприта. Куприт Cu_2O .
 20. Семейство кремнезема: полиморфные модификации, высоко- и низкотемпературные модификации. Кварц. Тридимит. Крестобалит. Лешательерит. Опал. Халцедон. Законы двойникования кварца, дофинейские двойники, бразильские двойники, японские

- двойники. Изоморфные примеси в кварце, горный хрусталь, морион, цитрин, аметист, празем.
21. Подкласс 2: сложные оксиды. Надотдел 1: алюминаты. Группа шпинели. Шпинель $MgAl_2O_4$. Магнетит $FeFe_2O_4$. Хромит $FeCr_2O_4$.
 22. Надотдел 2: титанаты с координационной структурой. Группа ильменита. Ильменит $FeTiO_3$.
 23. Отдел Б: титанаты с каркасной структурой. Группа перовскита. Перовскит $CaTiO_3$. Лопарит $(Ce,Na,Ca)(Nb,Ti)O_3$.
 24. Надотдел 3: Тантало-ниобаты. Отдел А: тантало-ниобаты с субслоистой структурой. Группа колумбита. Колумбит $(Fe,Mn)(Nb,Ta)_2O_6$. Танталит $(Fe,Mn)(Ta,Nb)_2O_6$.
 25. Группа самарскита. Самарскит $(Y,U)(Nb,Fe^{3+})_2O_6$. Группа эвксенита. Эвксенит $YTiNbO_6$. Ферсмит $CaNb_2O_6$.
 26. Отдел Б: Тантало-ниобаты с субкаркасной структурой. Группа эшинита. Эшинит $CeTiNbO_6$. Группа пироклора $NaCaNb_2O_6F$. **(2 часа)**.
 27. Класс 2: гидроксиды. Семейство гидроксидов Fe, Al, Mn. Группа манганита. Манганит $MnOOH$. Группа псиломелана. Псиломелан $(Ba,Mn^{2+},\dots)_3(O,OH)_6Mn_8^{4+}O_{16}$.
 28. Группа гетита-лепидокрокита. Гетит $\alpha-FeOOH$. Диаспор $\alpha-AlOOH$. Лепидокрокит $\gamma-FeOOH$. Бемит $\gamma-AlOOH$. Группа гиббсита. Гиббсит $\alpha-Al(OH)_3$.
 29. Группа брусита. Брусит $Mg(OH)_2$. Группа сассолина. Сассолин $B(OH)_3$.
 30. Тип IV. Соли кислородных кислот. Класс 1: Силикаты. Кристаллохимические особенности силикатов. Типы структурных мотивов.
 31. Подкласс 1. Собственно силикаты. Отдел А: Ортосиликаты (с изолированными SiO_4 -тетраэдрами). Подотдел 1. Субслоистые ортосиликаты. Группа кианита-силиманита. Кианит $Al_2^{VI}[SiO_4]O$. Андалузит $Al^{VI}Al^V[SiO_4]O$. Силлиманит $Al^{VI}[AlSiO_5]$.
 32. Группа ставролита. Ставролит $2Al_2[SiO_4]O \cdot Fe(OH)_2$.
 33. Группа хлоритоида. Хлоритоид $(Fe^{2+},Mg)_2(Al,Fe^{3+})Al_3[SiO_4]_2O_2(OH)_4$.
 34. Группа оливина. Форстерит $Mg_2[SiO_4]$. Оливин $(Mg,Fe)_2[SiO_4]$. Фаялит $Fe_2[SiO_4]$. Кнебелит $(Mn,Fe)_2[SiO_4]$. Тефроит $Mn_2[SiO_4]$.
 35. Группа монтичеллита. Монтичеллит $CaMg[SiO_4]$. Группа гумита. Хондродит $2Mg_2[SiO_4] \cdot Mg(F,OH)_2$. Гумит $3Mg_2[SiO_4] \cdot Mg(F,OH)_2$. Клиногумит $4Mg_2[SiO_4] \cdot Mg(OH,F)_2$.

36. Подотдел 2: субкаркасные ортосиликаты. Группа гранатов. Пироп $Mg_3Al_2[SiO_4]_3$.
Альмандин $Fe_3Al_2[SiO_4]_3$. Спессартин $Mn_3Al_2[SiO_4]_3$. Гроссуляр $Ca_3Al_2[SiO_4]_3$.
Андрадит $Ca_3Fe_2[SiO_4]_3$. Уваровит $Ca_3Cr_2[SiO_4]_3$.
37. Отдел Б: орто-диортосиликаты (с изолированными тетраэдрами SiO_4 и Si_2O_7 -
группами). Группа эпидота-цоизита. Цоизит $Ca_2Al_3[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$.
Клиноцоизит $Ca_2Al_3[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$. Эпидот $Ca_2FeAl_2[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$.
Ортит $Ca_2Fe_2Al[SiO_4][Si_2O_7]O(OH)$. Группа везувиана. Везувиан
 $Ca_{10}(Mg, Fe^{2+})_2Al_4[SiO_4]_5[Si_2O_7]_2(OH, F)_4$.
38. Отдел Г: цепочечные силикаты (метасиликаты). Семейство пироксенов. Группа
ромбических пироксенов (ортопироксены). Энстатит $Mg_2[Si_2O_6]$. Ферросилит
 $Fe_2[Si_2O_6]$.
39. Группа моноклинных пироксенов (клинопироксены). Кальциевые клинопироксены:
диопсид $CaMg[Si_2O_6]$, геденбергит $CaFe[Si_2O_6]$, авгит
 $(Ca, Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Ti, Al)_2[(Si, Al)_2O_6]$.
40. Натриевые клинопироксены: эгирин $NaFe[Si_2O_6]$, жадеит $NaAl[Si_2O_6]$. Литиевые
клинопироксены: сподумен $LiAl[Si_2O_6]$.
41. Семейство пироксеноидов. Группа волластонита. Волластонит $Ca_3[Si_3O_9]$. Группа
родонита. Родонит $CaMn_4[Si_5O_{15}]$.
42. Отдел Д: ленточные силикаты. Семейство амфиболов. Группа антофиллита-
куммингтонита (Mg, Fe^{2+} - амфиболы). Подгруппа антофиллита. Антофиллит
 $(Mg, Fe^{2+})_7[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$.
43. Группа тремолита (Ca -амфиболы). Тремолит $Ca_2Mg_5[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$. Актинолит
 $Ca_2(Mg, Fe^{2+})_5[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$.
44. Группа роговой обманки ($Ca - Na$ -амфиболы). Роговая обманка
 $(Ca, Na, K)_{2-3}(Mg, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Al)_5[Si_3(Al, Si)O_{11}]_2(OH, F, Cl)_2$. Арфведсонит
 $NaCa_{0,5}Na_{1,5}(Fe^{2+}, Mg, Fe^{3+}, Al)_5[Al_{0,5}Si_{7,5}O_{22}]\times(OH, F)_2$.
45. Группа глаукофана (Na -амфиболы). Глаукофан $Na_2Mg_3Al_2[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$.
Рибекит $Na_2Fe_3^{2+}Fe_2^{3+}[Si_4O_{11}]_2(OH, F)_2$.

46. Отдел Е: слоистые силикаты. Подотдел 1: минералы со слоями из амфиболовых лент SiO_4 - тетраэдров. Группа талька. Тальк $Mg_3[Si_4O_{10}](OH)_2$. Пирофиллит $Al_2[Si_4O_{10}](OH)_2$.
47. Группа серпентинов. Антигорит $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Лизардит $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$. Хризотил $Mg_3[Si_2O_5](OH)_4$.
48. Семейство хлоритов.
49. Семейство монтмориллонита-каолинита. Группа монтмориллонита. Группа каолинита. Группа галлуазита. Группа аллофана. Группа сапонита.
50. Подкласс 2: алюмосиликаты. Отдел А: слоистые алюмосиликаты. Подотдел 1. минералы со слоями из амфиболовых лент SiO_4 и AlO_4 - тетраэдров. Семейство слюд. Диоктаэдрические и триоктаэдрические слюды.
51. Группа мусковита. Подгруппа мусковита. Мусковит $KAl_2[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Парагонит $NaAl_2[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$.
52. Подгруппа флогопита. Флогопит $KMg_3[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Биотит $K(Mg, Fe)_3[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$.
53. Подгруппа лепидолита. Лепидолит $KLi_{1,5}Al_{1,5}[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$. Циннвальдит $KLi_{1,5}(Al, Fe)_{1,5}[AlSi_3O_{10}](OH, F)_2$.
54. Группа Маргарита. Маргарит $CaAl_2[Al_2Si_2O_{10}](OH, F)_2$.
55. Группа глауконита. Глауконит $K(Fe^{3+}, Al, Fe^{2+}, Mg)_2[AlSi_3O_{10}](OH)_2$.
56. Группа гидрослюд. Гидромусковит $K_{1-x}(H_2O)_x\{Al_2[AlSi_3O_{10}](OH)_{2-x}(H_2O)_x\}$.
Группа вермикулита. Вермикулит $Mg_x(H_2O)_4\{Mg_{3-x}[AlSi_3O_{10}](OH)_2\}$.
57. Подотдел 2: алюмосиликаты со слоями иного типа. Группа пренита. Пренит $Ca_2Al[AlSi_3O_{10}](OH)_2$.
58. Отдел Б: каркасные алюмосиликаты. Группа петалита. Петалит $Li[AlSi_4O_{10}]$. Группа кордиерита. Кордиерит $(Mg, Fe)_2[Al_4Si_5O_{18}]$.
59. Семейство полевых шпатов. Группа калиевых полевых шпатов. Микроклин $K[AlSi_3O_8]$. Ортоклаз $K[AlSi_3O_8]$. Санидин $(K, Na)[AlSi_3O_8]$.
60. Группа натрий – кальциевых полевых шпатов (плагиоклазов). Альбит $Na[AlSi_3O_8]$ (Ab). Олигоклаз An_{10-30} . Андезин An_{30-50} . Лабрадор An_{50-70} . Битовнит An_{70-90} . Анортит $Ca[Al_2Si_2O_8]$ (An).

61. Группа бариевых полевых шпатов. Цельзиан $Ba[Al_2Si_2O_8]$. Гиалофан $K_{1-x}Ba_{x/2}[Al_{1+x}Si_{3-x}O_8]$.
62. Семейство фельдшпатов. Группа скаполита. Мариалит $3Na[AlSi_3O_8] \cdot NaCl$ (Me₀₋₂₅). Дипир Me₂₅₋₅₀. Мицзонит Me₅₀₋₇₅. Мейонит $3Ca[Al_2Si_2O_8] \cdot CaCO_3$ (Me₇₅₋₁₀₀).
63. Группа нефелина. Нефелин $KNa_3[AlSiO_4]_4$. Кальсилит $K[AlSiO_4]$. Карнегиит $Na[AlSiO_4]$.
64. Группа содалита. Содалит $6Na[AlSiO_4] \cdot 2NaCl$. Нозеан $6Na[AlSiO_4] \cdot 2Na_2SO_4$. Гаюин $6\left(Na, \frac{1}{2}Ca\right)[AlSiO_4] \cdot 2 - 1(Na_2, Ca)SO_4$. Лазурит $6Na[AlSiO_4] \cdot 2Ca(SO_4, S, Cl_2)$.
65. Группа канкринита. Канкринит $6Na[AlSiO_4] \cdot CaCO_3 \cdot 2H_2O$. Вишневит $6(Na, K)[AlSiO_4] \cdot CaSO_4 \cdot 1 - 5H_2O$.
66. Группа лейцита. Лейцит $K[AlSi_2O_6]$.
67. Семейство цеолитов. Особенности основного структурного мотива.
68. Группа натролита. Натролит $Na_2[Al_2Si_3O_{10}] \cdot 2H_2O$. Томсонит $NaCa_2[Al_2Si_2O_8]_{2,5} \cdot 6H_2O$.
69. Группа ломонтита. Ломонтит $Ca[AlSi_2O_6]_2 \cdot 4H_2O$.
70. Группа анальцима. Анальцим $Na[AlSi_2O_6] \cdot H_2O$. Поллуцит $(Ca_{1-x}, Na_x)[AlSi_2O_6] \cdot xH_2O$. Вайкарит $Ca[AlSi_2O_6]_2 \cdot 2H_2O$.
71. Группа филлипсита. Филлипсит $KCa[AlSi_2O_6]_3 \cdot 6,75H_2O$. Гармотом $Ba_2(K, Na)[AlSi_2O_6]_5 \cdot 11,25H_2O$.
72. Группа хабазита. Хабазит $(Na_2, Ca)[AlSi_2O_6]_2 \cdot 6H_2O$.
73. Группа стильбита. Стильбит $Ca[AlSi_3O_8]_2 \cdot 6,25H_2O$. Гейландит $Ca[AlSi_3O_8]_2 \cdot 5,35H_2O$.
74. Группа морденита. Морденит $(Ca, Na_2, K_2)[AlSi_5O_{12}]_2 \cdot 7H_2O$.
75. Подкласс 3: боро- и боратосиликаты. Отдел А: минералы с кольцевой структурой. Группа турмалина. Дравит $NaMg_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Шерлит (шерл) $(Na, Ca)Fe_3Al_6[Si_6O_{18}][BO_3]_3(OH, F)_{3+1}$. Эльбаит



Тсилаизит



76. Отдел Б: минералы со слоистой структурой. Группа датолита. Датолит



77. Отдел В: минералы с каркасной структурой. Группа данбурита. Данбурит



78. Подкласс 4: бериллосиликаты. Подотдел 1: субцепочечные бериллосиликаты. Группа



79. Подотдел 2: субкольцевые бериллосиликаты. Группа берилла. Берилл



80. Подотдел 3: изометрические бериллосиликаты. Группа гельвина. Гельвин



81. Подкласс 5: титано- и цирконосиликаты. Отдел А. Субцепочечные минералы. Группа



82. Группа титанита. Титанит $Ca\{Ti[SiO_4]O\}$.

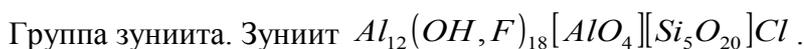
83. Отдел Б: субслоистые титано- и цирконосиликаты.

84. Группа эвдиалита. Эвдиалит $(Na, Ca)_9 (Zr, Fe)_3 [Si_3O_9] [Si_9O_{24}(OH)_3]$.

85. Группа лампрофиллита. Лампрофиллит $Sr\langle Na_3Ti\{Ti_2[Si_2O_7]_2O_2F\}\rangle$.

86. Группа астрофиллита. Астрофиллит $(K, Na)_3 \langle (Mn, Fe)_7 \{Ti_2[Si_4O_{12}]_2(OH)_5\}\rangle$.

87. Подкласс 6: галогенидосиликаты. Отдел Ф: субкоординационные галогенидосиликаты.



88. Отдел Б: субслоистые галогенидосиликаты. Группа топаза. Топаз $Al_2[SiO_4](F, OH)_2$.

89. Группа апофиллита. Апофиллит $KCa_4[Si_4O_{10}]_2F \cdot 8H_2O$.

90. Класс 2: бораты. Отдел А: островные бораты. Группа людвигита. Людвигит



91. Группа ашарита. Ашарит $Mg_2[B_2O_4OH]OH$. Группа буры. Бура



92. Группа иньюита. Иньюит $Ca[B_3O_3(OH)_5] \cdot 4H_2O$.

93. Отдел Б: бораты с цепочечной структурой. Группа гидробората. Гидроборатит $CaMg[B_3O_4(OH)_3]_2 \cdot 3H_2O$.
94. Группа колеманита. Колеманит $Ca[B_3O_4(OH)_3] \cdot H_2O$.
95. Отдел В: слоистые бораты. Группа пандермита. Пандермит $Ca_2[B_5O_8(OH)_3] \cdot 2H_2O$.
96. Отдел Г: каркасные бораты. Борацит $Mg_3[B_7O_{13}]Cl$.
97. Класс 3: фосфаты, арсенаты, ванадаты. Подкласс 1: безводные фосфаты без дополнительных анионов. Отдел А: субцепочечные фосфаты и их аналоги. Группа ксенотима. Ксенотим $Y[PO_4]$. Группа монацита. Монацит $Ce[PO_4]$.
98. Подкласс 2. Безводные фосфаты с дополнительными анионами. Отдел А: субцепочечные фосфаты и их аналоги. Группа апатита. Апатит $Ca_2^{IX}Ca_3^{VIII}[PO_4]_3(F,OH)_2$.
99. Группа пироморфита. Пироморфит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VIII}[PO_4]_3Cl$. Миметезит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VIII}[AsO_4]_3Cl$. Ванадинит $Pb_2^{IX}Pb_3^{VIII}[VO_4]_3Cl$.
100. Подкласс 3: водные фосфаты и их аналоги. Отдел Б: субслоистые фосфаты и их аналоги. Группа вивианита. Вивианит $Fe_3[PO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Эритрин $Co_3[AsO_4]_2 \cdot 8H_2O$. Аннабергит $Ni_3[AsO_4]_2 \cdot 8H_2O$.
101. Семейство урановых слюдок (50 минералов). Группа торбернита. Торбернит $Cu(UO_2)_2[PO_4]_2 \cdot 10H_2O$. Отенит $Ca(UO_2)_2[PO_4]_2 \cdot 10H_2O$.
102. Группа карнотита. Карнотит $K_2(UO_2)_2[V_2O_8] \cdot 3H_2O$. Тюямунит $Ca(UO_2)_2[V_2O_8] \cdot 5-8H_2O$.
103. Отдел В: субкаркасные фосфаты, арсенаты, ванадаты. Скородит $Fe[AsO_4] \cdot 2H_2O$.
Класс 4: карбонаты. Подкласс 1: безводные карбонаты без дополнительных катионов.
Группа доломита. Доломит $CaMg[CO_3]_2$. Анкерит $Ca(Mg, Fe^{2+})[CO_3]_2$.
104. Группа кальцита – арагонита. Кальцит $Ca[CO_3]$. Родохрозит $Mn[CO_3]$. Сидерит $Fe[CO_3]$. Смитсонит $Zn[CO_3]$. Арагонит $Ca[CO_3]$. Стронцианит $Sr[CO_3]$. Витерит $Ba[CO_3]$. Церуссит $Pb[CO_3]$.
105. Подкласс 2: безводные карбонаты с дополнительными анионами. Группа бастнезита. Бастнезит $Ce[CO_3]F$. Паризит $CaCe_2[CO_3]_3F_2$.
106. Группа малахита. Малахит $Cu_2[CO_3](OH)_2$.
107. Группа азурита. Азурит $Cu_3[CO_3]_2(OH)_2$.

108. Подкласс 3: карбонаты с кристаллизационной водой. Семейство содовых минералов. Термонатрит $Na_2[CO_3] \cdot H_2O$. Сода $Na_2[CO_3] \cdot 10H_2O$
109. Класс 5: вольфраматы и молибдаты. Группа вольфрамита. Ферберит $FeWO_4$. Вольфрамит $(Fe, Mn)WO_4$. Гюбнерит $MnWO_4$.
110. Группа шеелита. Шеелит $Ca[WO_4]$. Повеллит $Ca[MoO_4]$. Вульфенит $Pb[MoO_4]$.
111. Класс 6: сульфаты. Подкласс 1: безводные сульфаты без дополнительных анионов. Группа барита. Барит $Ba[SO_4]$. Целестин $Sr[SO_4]$. Англезит $Pb[SO_4]$.
112. Группа ангидрита. Ангидрит $Ca[SO_4]$. Группа тенардита. Тенардит $Na_2[SO_4]$.
113. Подкласс 2: безводные сульфаты с дополнительными анионами. Группа алунита. Алунит $KAl_3[SO_4]_2(OH)_6$. Ярозит $KFe_3[SO_4]_2(OH)_6$.
114. Подкласс 3: водные сульфаты без дополнительных анионов. Группа гипса. Гипс $Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$. $Ca[SO_4] \cdot 2H_2O$.
115. Группа мирабилита. Мирабилит $Na_2[SO_4] \cdot 10H_2O$. Группа полигалита. Полигалит $K_2Ca_2Mg[SO_4]_4 \cdot 2H_2O$.
116. Класс 7. Нитраты. Группа селитры. Натриевая селитра $Na[NO_3]$. Калиевая селитра $K[NO_3]$.
117. Тип V: галогениды. Класс 1: хлориды, бромиды, иодиды.
118. Подкласс 1: безводные хлориды. Отдел А: минералы с координационной структурой. Группа галита. Галит $NaCl$. Сильвин KCl . Группа нашатыря. Нашатырь NH_4Cl .
119. Группа хлораргирита. Хлораргирит $AgCl$. Бромаргирит $AgBr$.
120. Группа иодаргирита. Иодаргирит AgI .
121. Подкласс 2: водные хлориды. Группа бишофита. Бишофит $MgCl_2 \cdot 6H_2O$.
122. Группа карналлита. Карналлит $KMgCl_3 \cdot 6H_2O$.
123. Класс 2: фториды. Группа флюорита. Флюорит CaF_2

17. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ

17.1. ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Основы кристаллофизики. Ю.И.Сиротин, М.П.Шаскольская. Наука, М., 2000.
2. Основы кристаллографии. Е. С. Астапова. Учебное пособие. Благовещенск. 2005. 91 с.

3. Теория симметрии кристаллов. Егоров-Тисменко Ю. К., Литвинская Г.П. http://geo.web.ru/db/section_page
4. Минералогия. А. А. Годовиков. М. Недра. 1999 г. 521 с.
5. Учебно-методический комплекс дисциплины «Кристаллография, минералогия». Астапова Е.С. Благовещенск. 2007. 124 с.

17.2. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. Кристаллография. М.:Изд-во МГУ, 1992. 288 с.
2. Уманский Я.С, Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия.М.: Металлургия, 1982. 632 с.
3. Физическая кристаллография. М.: Наука. 1992. 365 с.
4. Кристаллография. М.П.Шаскольская. М. Высшая школа. 1976. 391 с.
5. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. Геометрическая кристаллография. М.:Изд-во МГУ, 1986. 166 с.
6. Современная кристаллография. Под редакцией Б.К.Вайнштейна. Т.1 – 4. Наука, М., 1979.
7. Non-mathematical introduction to X-ray diffraction. С. Taylor. University College, Cardiff, U.K. 1980.
8. International union of crystallography, Newsletter, vol. 2, № 4, 1994.
9. Определение структуры кристаллов. Г.Липсон, В.Кокрен. М., 1976.
10. А.В. Шубников, В.А. Копчик. Симметрия в науке и искусстве. - М.: Наука, 1972.
11. Вернадский В. И. Кристаллография. Избранные труды. М. Наука. 1988. 342 с.
12. Кристаллографическая геометрия. Галиулин Р. В. М.: Наука. 1984. 136 с.
13. Нардов В. В. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Л.: ЛГУ. 1974. 143 с.

17.3. ПЕРЕЧЕНЬ НАГЛЯДНЫХ И ДРУГИХ ПОСОБИЙ

1. WWW-MINCRYST Crystallographic and Crystallochemical Database for Mineral and their Structural Analogues. database.iem.ac.ru/mincryst
2. Международная рентгенометрическая картотека JPCDS-ASTM.
3. Структурные модели неорганических соединений.
4. База структурных данных для неорганических соединений.. ICSD (Inorganic Crystal Structure) Database,<http://193.49.43.4/dif/icsd/>

17.4. ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ.

1. Рентгеновский дифрактометр общего назначения ДРОН-3М.
2. Банк рентгенометрических данных.
3. Персональные компьютеры.
4. Программы расчета структурных характеристик.
5. Коллекции минералов всех основных типов, классов, групп.

Содержание

<i>ВВЕДЕНИЕ</i>	3
Цели и задачи дисциплины	3
Критерии оценки при сдаче зачета	4
Критерии оценки при сдаче экзамена	4
Содержание дисциплины. Лекционный курс (3 семестр)	5
Лабораторные работы (3 семестр)	7
Лекционный курс (4 семестр)	9
Лабораторные работы (4 семестр)	15
Краткое содержание лекционного курса	22
1. Предмет кристаллографии	22
1.1. Исторические сведения	22
1.2. Основные макроскопические признаки кристаллических тел	27
2. Симметрия	32
2.1. Операции и элементы симметрии конечных фигур	32
2.1.1. Элементы симметрии I и II рода	32
2.1.2. Сложные оси симметрии	35
3. Кристаллографические категории и сингонии	38
4. Символика в теории симметрии	39
4.1. Обозначения Браве	39
4.2. Обозначения Германа-Могена	39
4.3. Обозначения Шенфлиса	40
5. Методы проектирования кристаллов	42
5.1. Сферическая проекция	43
5.2. Стереографическая проекция	43
5.3. Гномостереографическая проекция	45
6. Точечные группы симметрии	46
6.1. Групповые аксиомы	47
6.2. Вывод точечных групп симметрии с единичными направлениями в обозначениях по Шенфлису	48
6.3. Вывод точечных групп симметрии без единичных направлений в обозначениях по Шенфлису	50
6.4. Матричное представление симметрических операций и групп симметрии	51

7. Элементарная ячейка	56
8. Символы граней кристаллов	61
8.1. Индицирование. Закон Гаюи	62
8.2. Выбор единичной грани в кристаллах разных сингоний	64
9. Морфология кристаллов	65
9.1. Простые формы в группах различных сингоний	66
9.1.1. Простые формы кристаллов в группах низшей и средней категории	66
9.1.1.1. Простые формы кристаллов в группах C_n	66
9.1.1.2. Простые формы кристаллов в группах C_{nv}	66
9.1.1.3. Простые формы кристаллов в группах C_{nh} и D_{nh}	68
9.1.1.4. Простые формы кристаллов в группах D_n	68
9.1.1.5. Простые формы кристаллов в группах S_{2n}	68
9.1.1.6. Простые формы кристаллов в группах D_{nd}	72
9.1.2. Простые формы кристаллов в группах высшей категории	72
9.1.2.1. Основные простые формы	72
9.1.2.2. Производные от гексаэдра простые формы $\{hk0\}$	75
9.1.2.3. Производные от октаэдра и тетраэдра простые формы $\{hhl\}$	75
9.1.2.4. Простые формы $\{hll\}$ – производные октаэдра (тетраэдра) и гексаэдра	75
9.1.2.5. Общие простые формы кристаллов кубической сингонии	78
10. Элементы симметрии и симметрические операции бесконечных закономерных объектов	85
11. Пространственные группы симметрии	90
12. Пьезоэлектрический эффект	95
13. Предмет минералогии	97
14. Самостоятельная работа студентов	111
15. Вопросы к зачету	111
16. Вопросы к экзамену	113
17. Учебно-методические материалы	119
17.1. Основная литература	121
17.2. Дополнительная литература	121
17.3. Перечень наглядных и других пособий	122
17.4. Технические средства обучения дисциплины	122
Содержание	123