

Составитель:
Арнольд Аркадьевич Пермяков

Федеральное агентство по образованию
Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Сибирский государственный индустриальный университет»
Кафедра геологии и геодезии

Установка кристаллов Кристаллографические символы

Лабораторный практикум по курсу
«Основы кристаллографии и минералогии».

Специальности «Металлургия чёрных металлов» (110100),
«Литейное производство черных и цветных металлов» (110400),
«Металлургия цветных металлов» (110700),
«Химическая технология неорганических веществ» (250200)

Редактор Н.П. Лавренюк

Изд.лиц. №01439 от 05.04.2000 г. Подписано в печать
Формат бумаги 60x84 1/16. Бумага писчая. Печать офсетная.
Усл. печ. л 1,00. Уч.-изд. л. 1,00. Тираж 100 экз. Заказ

Сибирский государственный индустриальный университет
654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, 42.
Издательский центр СибГИУ

УСТАНОВКА КРИСТАЛЛОВ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИМВОЛЫ

Лабораторный практикум по курсу «Основы кристаллографии и минералогии». Специальности «Металлургия чёрных металлов» (110100), «Литейное производство черных и цветных металлов» (110400), «Металлургия цветных металлов» (110200), «Химическая технология неорганических веществ» (250200)

Новокузнецк
2007

Установка кристаллов. Кристаллографические символы. Лаб. практикум/ Сост.: А.А. Пермяков: СибГИУ. - Новокузнецк, 2007. - 16с., табл.2, ил.6

Изложены теоретические основы, методы, правила и последовательность установки и определения кристаллографических символов граней, ребер и вершин кристаллов.

Описаны используемая терминология, порядок выполнения лабораторной работы, а также приведены в табличной форме правила установки кристаллов по сингониям.

Практикум предназначен для студентов специальностей «Металлургия чёрных металлов» (110100), «Литейное производство черных и цветных металлов» (110400), «Металлургия цветных металлов» (110200), «Химическая технология неорганических веществ» (250200)

Рецензент - зав. кафедрой металлургии чугуна СибГИУ доц. В.А. Долинский

Печатается по решению редакционно-издательского совета университета.

кристаллографических символов лабораторной работы)

Простые реберные формы	Символы //rst//	Простые вершинные формы	Символы :mnp:
1(24) - тетрагон-триокта-кристогонэдр	//211// /121/ /112/	1(12) - ромбододека-акрогонэдр	:110: .011. .101.
1(12) - гексагональный дипирамидальный кристогонэдр	//2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2// / $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2 2/ /2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ $\bar{2}$ /	1(2) - параллело-акрогонэдр	:0 0 0 1: .0 0 0 $\bar{1}$.
2(6) - гексагональный призматический кристогонэдр	//1 0 $\bar{1}$ 0// / 0 1 $\bar{1}$ 0/ /1 $\bar{1}$ 0 0/	2(6) - гексагональный призматический акрогонэдр	: 2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0: . $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2 0. . $\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 0.
1(2) - параллело-кристогонэдр	//101// / $\bar{1}$ 0 1/	1 (4) - ромбический призматический акрогонэдр	:211: ·2 $\bar{1}$ 1·
2(2) - параллело-кристогонэдр	// $\bar{1}$ 01 // /1 0 $\bar{1}$ /	2 (4) -/-/-.	: $\bar{2}$ 11 : ·2 $\bar{1}$ 1·
3(4) - ромбический призматический кристогонэдр	//210// /2 $\bar{1}$ 0/	3 (4) -/-/-.....	:021: ·0 $\bar{2}$ 1·
4(4) -/-/-	//111// /1 $\bar{1}$ 1/		

Таблица 2. Установка кристаллов и определение
(пример оформления)

Формула и вид симметрии, сингония, категория	Установка кристалла (выбор осей и единичной грани)	Простые гранные формы	Символы ((hkl))
$3L_4L_36L_29PC - m\bar{3}m$, планаксиальный вид симметрии, кубическая сингония, высшая категория	$\alpha=\beta=\gamma=90^0$ x по L_4 , y по L_4 , z по L_4 $a_0=b_0=c_0$ – октаэдр	1(8) - октаэдр 2(6) - гексаэдр	((111)) (1 $\bar{1}$ 1) (1 1 $\bar{1}$) ((100)) (010) (001)
$L_66L_27PC - 6/mmm$, планаксиальный вид симметрии, гексагональная сингония, средняя категория	$\alpha=\beta=90^0, \gamma=120^0$, x по L_2 , y по L_2 , u по L_2 z по L_6 $a_0=b_0 \neq c_0$ - дипирамида гексагональная	1(12) - дипирамида гексагональная	((1 0 $\bar{1}$ 1)) (1 $\bar{1}$ 0 1) (0 $\bar{1}$ 1 1)
$L_2PC - 2/m$ планаксиальный вид симметрии, моноклинная сингония, низшая категория	$\alpha=\gamma=90^0 \neq \beta$ x // ребрам y по L_2 , z// ребрам $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ -в кристалле единичной грани нет	1(2)-пинакоид 2(2)-пинакоид 3(4)-призма ромбическая	((100)) ($\bar{1}$ 00) ((001)) (0 0 $\bar{1}$) ((110)) ($\bar{1}$ 10) (1 $\bar{1}$ 0)

ВВЕДЕНИЕ

Форму кристаллов можно описать не только описательными терминами, но и методом координат. Если установить кристалл в систему координат, то любая грань, ребро и вершина кристалла будут иметь строго определенные пространственные координаты.

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Научиться устанавливать кристаллы в стандартную систему кристаллографических (координатных) осей и определять кристаллографические символы граней, ребер и вершин кристаллов.

ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ И ТЕРМИНОЛОГИЯ

Установка кристаллов - это выбор системы координатных осей и единичной или масштабной грани.

Установка кристаллов может быть произвольная и стандартная. В стандартной установке соблюдают единые (международные) правила выбора системы координат и единичной грани с учетом симметрии и сингонии кристалла.

Системы координатных осей в кристаллографии могут быть трехосные и четырехосные в зависимости от симметрии кристалла. В реальных кристаллах кристаллографические оси проходят по рядам пространственных кристаллических решеток

Трехосная система координат

Угловые параметры трехосной системы координат и символы (координаты) осей изображены на рисунке 1 и представлены в таблице 1.

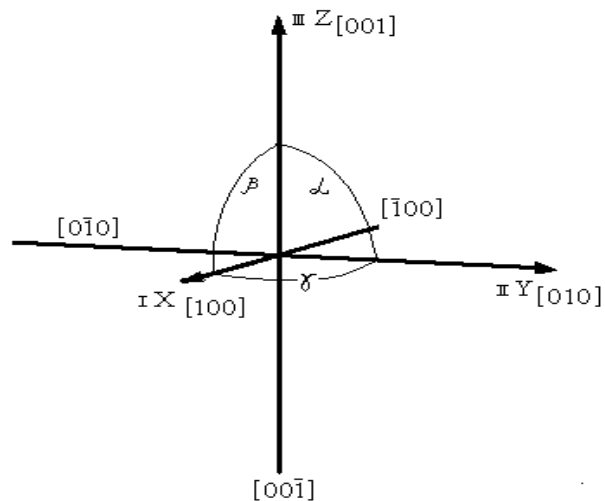


Рисунок 1 - Трехосная система кристаллографических осей

В зависимости от симметрии кристалла углы между осями могут иметь разные значения:

- $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ - для кубических, тетрагональных и ромбических кристаллов.
- $\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$ - для моноклинных кристаллов.
- $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ - для триклинных кристаллов.

Четырехосная система координат

Эта система координат используется для установки кристаллов гексагональной и тригональной сингоний. Первые три оси лежат в горизонтальной плоскости и пересекаются под углом 120° , четвертая ось расположена вертикально.

Угловые параметры четырехосной системы координат и символы (координаты) осей изображены на рисунке 2 и представлены в таблице 1. Углы между осями: $\alpha=\beta=90^\circ$, $\gamma=120^\circ$.

Таблица 1 - Правила установки кристаллов по сингониям

Установка	Сингония	Выбор координатных осей	Выбор единичной грани
3-х осная 1 - X 2 - Y 3 - Z	Кубическая	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ X, Y, Z по: L_4 , L_{i4} , L_2	$a_0=b_0=c_0$ Октаэдр, тетраэдр
	Тетрагональная	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ Z по L_4 , L_{i4} X, Y по L_2 , $\perp P$, // ребрам	$a_0=b_0 \neq c_0$ пирамида, дипирамида, тетраэдр
	Ромбическая	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ Z по L_2 X, Y по L_2 , $\perp P$, // ребрам	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$ пирамида, дипирамида, тетраэдр
	Моноклинная	$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$ Y по L_2 , $\perp P$: X, Z // ребрам	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$ призма ромбическая
	Триклинная	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ X, Y, Z // ребрам	$a_0 \neq b_0 \neq c_0$ моноэдр, пинакоид
4-х осная 1 - X 2 - Y 3 - U 4 - Z	Гексагональная	$\alpha=\beta=90^\circ$; $\gamma=120^\circ$ Z по L_6 , L_{i6} X, Y, U по L_2 , $\perp P$, // ребрам	$a_0=b_0 \neq c_0$ пирамида, дипирамида
	Тригональная	$\alpha=\beta=90^\circ$; $\gamma=120^\circ$ Z по L_3 , L_{i3} X, Y, U по L_2 , $\perp P$, // ребрам	$a_0=b_0 \neq c_0$ пирамида, дипирамида, ромбоэдр

4. Единичная грань и ее параметры в кристаллах разных категорий симметрии
5. Сформулируйте закон Гаюи.
6. Что такое параметры и индексы грани?
7. Как определяется символ простой формы?
8. Правила установки кристаллов кубической сингонии.
9. В чем особенность установки тригональных и гексагональных кристаллов?
10. Как определяются символы ребер и простых реберных форм?
11. Как определяются символы вершин и простых вершинных форм?
12. Что такое зона и как определяется ее символ?
13. Как определить правильность символа в тригональных и гексагональных кристаллах?

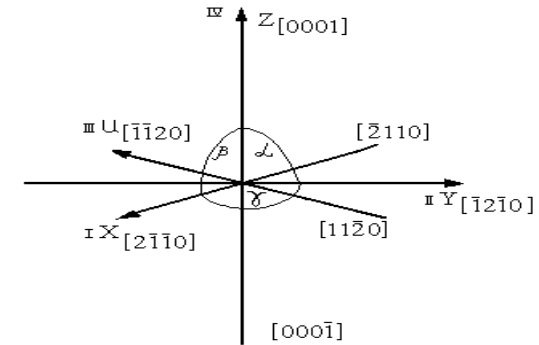


Рисунок 2 - Четырехосная система кристаллографических осей

Правила выбора осей координат в кристаллах

1. Оси координат следует совмещать с осями симметрии, отдавая предпочтение осям симметрии высшего порядка. Единственную ось симметрии высшего порядка следует совмещать с осью Z. В кристаллах моноклинной сингонии единственную ось L_2 следует совмещать с осью Y.
2. Координатные оси следует располагать перпендикулярно плоскостям симметрии кристалла при отсутствии осей симметрии.
3. Координатные оси следует проводить параллельно наиболее развитым ребрам кристалла при отсутствии осей и плоскостей симметрии.
4. Оси координат должны пересекаться в геометрическом центре кристалла.

Правила выбора кристаллографических осей по сингониям представлены в таблице 1.

Единичная грань

Единичная грань отсекает на координатных осях отрезки (линейные параметры), принятые за единичные измерения. Грань общего положения отсекает на осях отрезки разной длины непропорциональные единичным (рисунок 3).

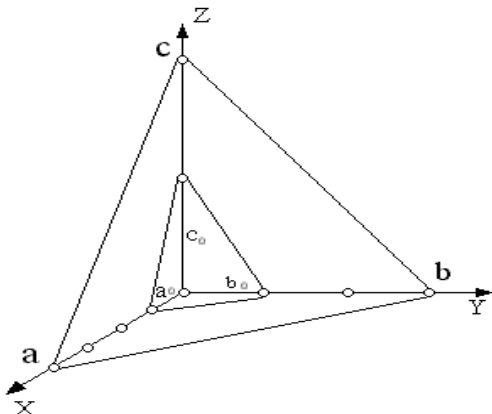


Рисунок 3 - Единичная грань $a_0b_0c_0$ и грань общего положения abc .

Правила выбора единичной грани кристалла:

- $a_0=b_0=c_0$. Для кубических кристаллов высшей категории единичная грань по всем осям имеет равные линейные параметры.
- $a_0=b_0 \neq c_0$. Для кристаллов средней категории (тригональные, тетрагональные, гексагональные сингонии) единичная грань должна отсекают по горизонтальным осям одинаковые отрезки, а по оси Z - неравный (по оси Z свой масштаб измерения).
- $(a_0 \neq b_0 \neq c_0)$. Для кристаллов низшей категории (ромбических, моноклинных и триклинных) линейные параметры единичной грани по всем осям имеют свой масштаб измерения.

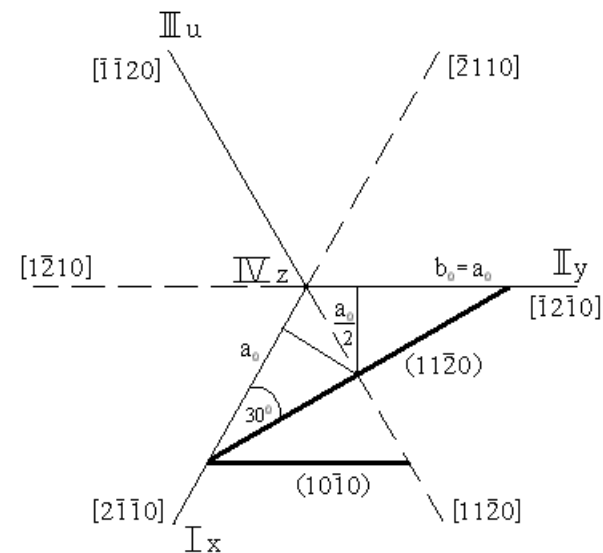


Рисунок 5 - Определение параметров и символов граней в четырехосной установке.

После полного определения символов всех гранных, реберных и вершинных форм кристалла результаты **следует для проверки представить** преподавателю. Если эти определения правильны, можно приступить к работе над следующими кристаллами в вашем задании.

После завершения всех определений **табличный отчет о работе представляется для проверки и последующей защиты**.

При защите работы студент должен показать знание теории и умение использовать ее практически.

Предполагаемые вопросы на защите

1. Что называется установкой кристалла?
2. Когда используется трехосная или четырехосная установки?
3. Назовите правила выбора координатных осей.

Методика выполнения работы

Работа оформляется в табличной форме (таблица 2). Кристалл, в котором уже определены вид симметрии и все простые формы, устанавливается по выше приведенным стандартным правилам и правилам в таблице 1. Вначале определяете символы простых граничных форм, начиная с единичной, затем граничных форм, занимающих частное положение, и заканчиваете граничными формами общего положения. В последнем случае полезно изобразить ортогонально горизонтальные оси, параметры единичной и искомой грани (рисунки 4, 5). По полученным параметрам определите символы граней.

Символ грани, симметрично притупляющей две соседние, можно вычислить методом сложения соответственных индексов в символах этих граней.

Символы реберных и вершинных форм определяете по тем же правилам: либо непосредственно по координатным осям, либо вычисляете методом сложения соответственных индексов граней, образующих это ребро или вершину.

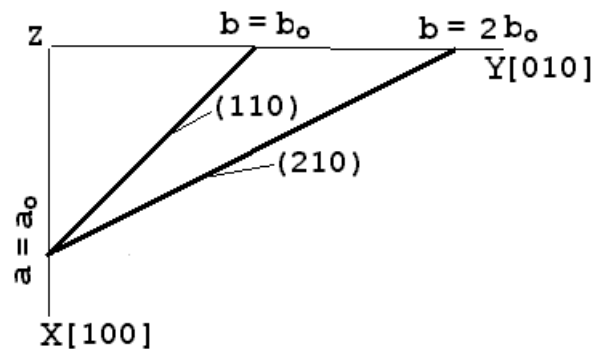


Рисунок 4 - Определение параметров и символов граней в трехосной установке.

Для определения линейных параметров граней общего положения используют **Закон рациональности отношений параметра, или Закон целых чисел (Закон Гаюи)**.

a_0, b_0, c_0 - линейные параметры единичной грани всегда равны 1, т.е. $a_0=1, b_0=1, c_0=1$.

a, b, c - линейные параметры грани общего положения могут быть равны любому сравнительно небольшому числу, т.к. равны количеству единичных отрезков, укладываемых в отрезке оси, отсекаемом гранью общего положения abc .

Выразим параметры грани общего положения через параметры единичной грани.

$$a/a_0 = 4a_0 = 4$$

$$b/b_0 = 3b_0 = 3$$

$$c/c_0 = 2c_0 = 2$$

Отношения линейных параметров грани общего положения abc к параметрам единичной грани будет равно отношению целых чисел (это и есть закон Гаюи):

$$a/a_0 : b/b_0 : c/c_0 = 4 : 3 : 2$$

Двойные отношения отрезков, отсекаемые двумя гранями кристалла на координатных осях, относятся между собой как небольшие целые или рациональные числа.

Кристаллографический символ грани

Кристаллографический символ любого элемента формы кристалла – это координата нормального к нему направления, т.е. направления из центра кристалла перпендикулярного к этому элементу формы. Символ грани состоит из индексов.

Индексы граней h, k, l – это величины, обратные линейным параметрам, т.е.

$$h = \frac{a_0}{a} = \frac{1}{4} = \frac{1}{4};$$

$$k = \frac{b_0}{b} = \frac{1}{3} = \frac{1}{3};$$

$$l = \frac{c_0}{c} = \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

$$h:k:l = \frac{1}{4} : \frac{1}{3} : \frac{1}{2} = 3:4:6$$

Совокупность всех индексов, взятая в круглые скобки, является символом грани общего положения.

Следовательно (346) - это кристаллографический символ грани *abc*.

Таким образом, **символом грани называется совокупность трех (или четырех) наименьших чисел, обратно пропорциональных числовым параметрам данной грани.**

Например. Для передней грани гексаэдра линейные параметры равны: $a=1$, $b=\infty$, $c=\infty$. Индексы грани: $h=1/a=1/1=1$; $k=1/b=1/\infty=0$; $l=1/c=1/\infty=0$. Символ передней грани равен (100).

Шесть граней куба (гексаэдра) имеют символы: (100), ($\bar{1}00$), (010), (0 $\bar{1}0$), (001) и (00 $\bar{1}$). Все они однообразны, т. к. состоят из одинаковых индексов, меняющих своё положение и знак в зависимости от ориентации к осям координат. Список символов граней одной простой гранной формы (гексоктаэдр) может достигать 48. Чтобы избежать этой рутинной работы, можно один из символов принять за символ простой формы. В этом случае гексаэдр как простая форма имеет символ ((100)).

Условимся. **Символ простой гранной формы соответствует символу грани этой формы, лежащей в первом октанте наиболее близко к оси X и наиболее удаленно от оси Z.**

Символ простой гранной формы следует брать в двойные круглые скобки ((*hkl*)).

При описании кристаллов следует определить символы всех простых форм, входящих в комбинационный кристалл.

Символы ребер и простых реберных форм

Каждое ребро кристалла образовано двумя пересекающимися гранями, т.е. является вершиной двухгранного угла и занимает в пространстве промежуточное

положение между этими гранями. Следовательно, координата или кристаллографический символ ребра также должны иметь промежуточное значение.

Одиночное ребро общего положения имеет символ $|rst|$. Простая реберная форма - $\parallel rst \parallel$

Символ ребра равен символу направления, нормального ребру, и определяются точно также как и символы грани, либо непосредственно на кристалле, особенно, если они занимают частное положение, либо вычисляются путем сложения соответственных индексов символов граней кристалла, образующих это ребро.

Ребро $|rst|$, образованное гранями ($h_1k_1l_1$) и ($h_2k_2l_2$) имеет индексы: $r = (h_1 + h_2)$; $s = (k_1 + k_2)$ и $t = (l_1 + l_2)$.

Символ простой реберной формы соответствует символу ребра этой формы, лежащего наиболее близко к наблюдателю.

Символы вершины $\cdot mpr$

и простой вершинной формы $:mpr$

Каждая вершина кристалла является точкой пересечения образующих ее граней и занимает промежуточное между ними положение. **Символ вершины можно определить либо непосредственно на кристалле, либо методом сложения соответственных индексов всех граней, образующих эту вершину.**

Минимальное число граней, образующих вершину, равно трем: ($h_1k_1l_1$), ($h_2k_2l_2$), ($h_3k_3l_3$); символ этой вершины $\cdot mpr$ определяется вычислением $m = (h_1 + h_2 + h_3)$, $n = (k_1 + k_2 + k_3)$, $p = (l_1 + l_2 + l_3)$. Если индексы получаются большие, их следует сократить на общий делитель.

Символ простой вершинной формы соответствует символу вершины этой формы, лежащей наиболее близко к наблюдателю.