

Запорізький національний університет



# Кристалохімія.

## Лекція 2.



Запоріжжя 2024.

# Симетрія зовнішніх форм кристалів.

- Огранка кристалів.
- Закон постійності двогранних кутів.
- Гоніометр Федорова.
- Гномостереографічні проекції кристалів.
- Сітка Вульфа.
- Елементи симетрії кристалів (дисконтініум).
- Поняття одиничного напрямку.
- Взаємне розташування одиничного напрямку і елементів симетрії кристалів в просторі.



## Історична довідка.

79 р. н.е. – Пліній Старший - встановив плоскогранність та прямореберність кристалів.

1615 р. - Кеплер –  $60^\circ$  у всіх сніжинок.

1695 р. – Левенгук – у великих і мікроскопічних кристалів кути між гранями однакові.

1749 р. – Ломоносов – селітри, пірит, алмаз. Продовжив Ловіц.

## Огранка кристалів.

Накопичення даних призвело до необхідності створення універсальних методів.

На даний час відомо і досліджено близько 15000 кристалів, які мають найрізноманітнішу огранку – від 4 до декількох десятків граней. Вже на початку 18 ст. кристалографи прийшли до висновку про необхідність створення універсального методу який би дозволяв розраховувати кристали – схематично правильно відображати взаємне розташування граней, а також визначати величини двогранних кутів між ними. Під розрахунками кристалів мається на увазі система математичної обробки результатів вимірювання кристалів на гоніометрі.

# Огранка кристалів.

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/>.

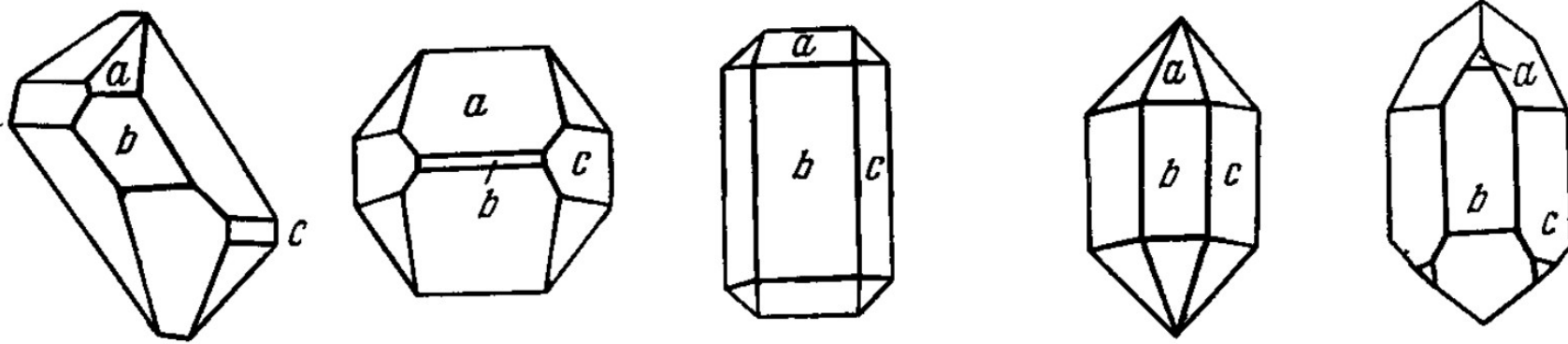


## Greater than the sum of its parts

The data from a collection of 1.25M+ structures can be compared, analysed and grouped to show common themes, trends and guides for further analysis and experimentation. Almost infinitely more valuable than the individual structures in isolation.

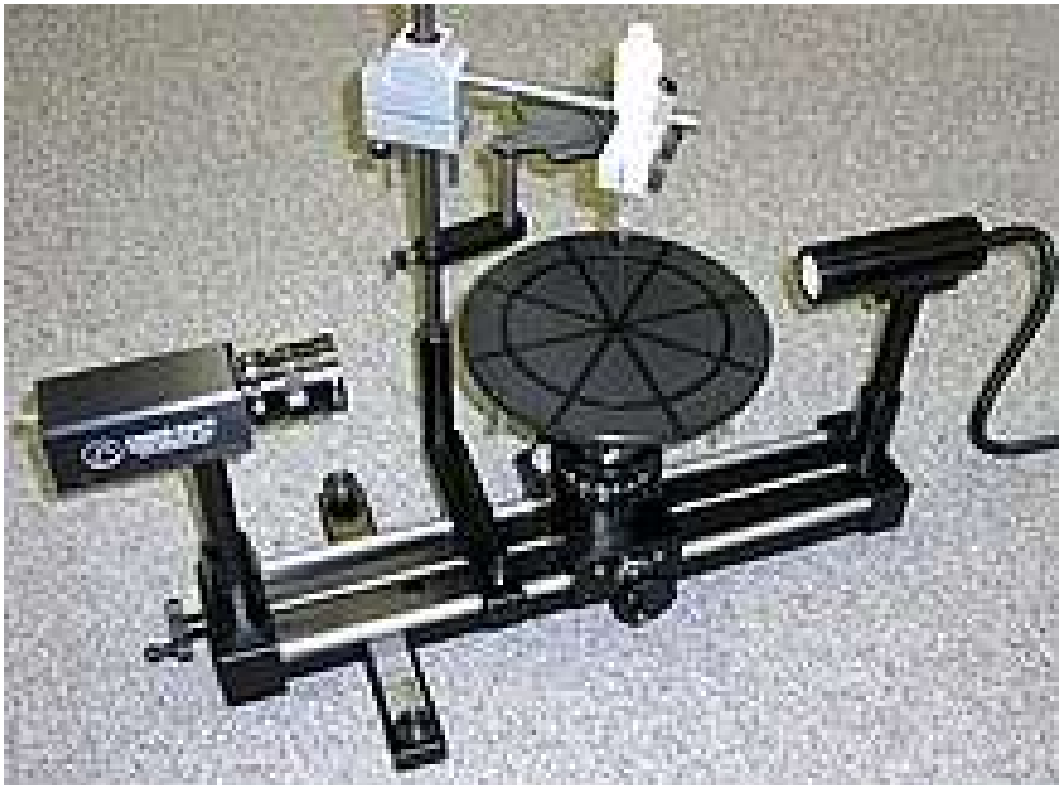
## Закон постійності двогранних кутів.

*В усіх кристалах речовини у одній і тій же алотропній формі кути між відповідними гранями однакові, незалежно від їх огранки. (Роме де Л'Іль, 1783 р.)*



# Методи вимірювання кристалів.

**Гоніометр** ([рос.](#) *гониометр*, [англ.](#) *goniometer*, [нім.](#) *Honiometer n*) — прилад для вимірювання кутів між плоскими гранями твердих тіл, наприклад, [кристалів](#).

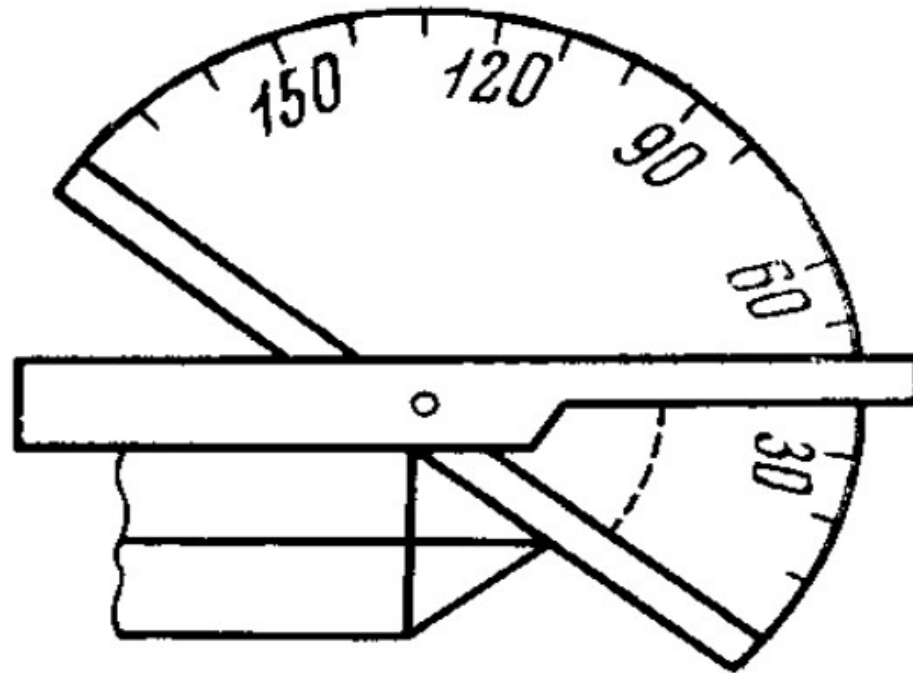


**Гоніометрія** ([рос.](#) *гониометрия*, [англ.](#) *goniometry*, [нім.](#) *Honiometrie f*) — розділ [тригонометрії](#), де вивчаються способи вимірювання [кутів](#), властивості тригонометричних функцій та співвідношення між ними.



## Методи вимірювання кристалів.

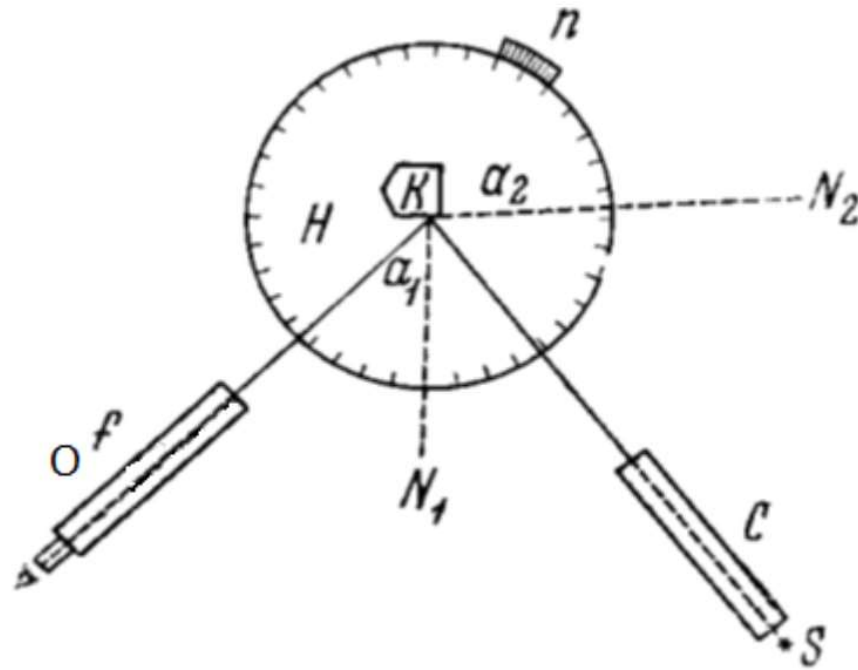
1. Прикладний гоніометр (Каранжо, близько 1770 р.) – похибка  $0,5^\circ$ .





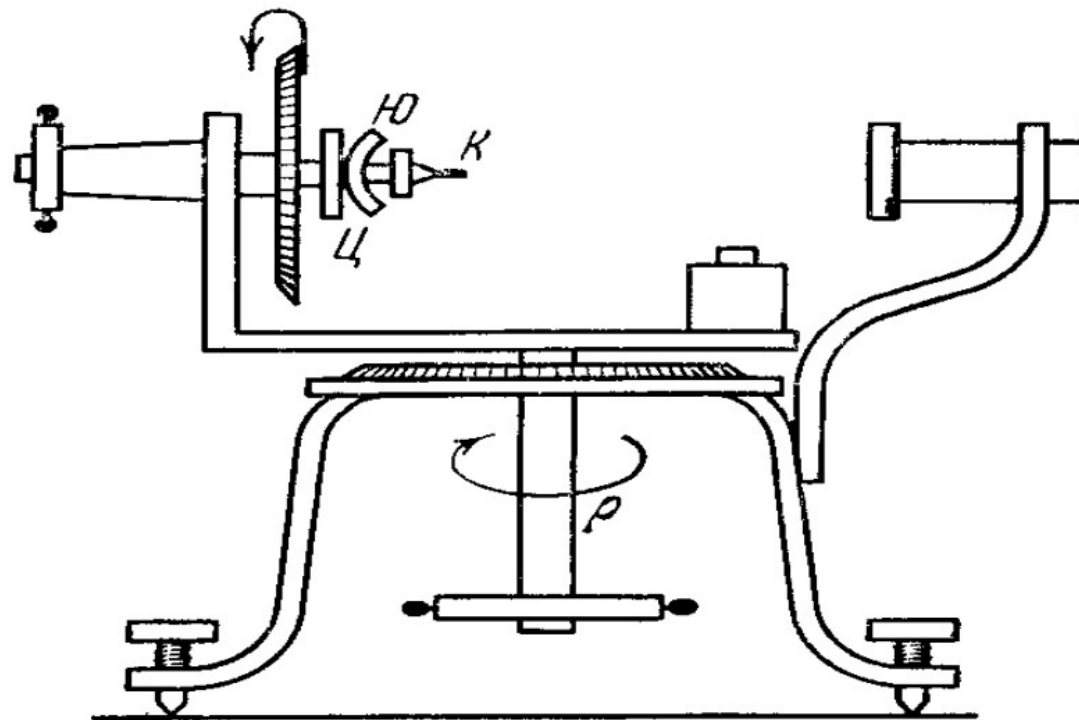
## Методи вимірювання кристалів.

2. Відбивальний гоніометр (Волластон, 1809 р.) – похибка  $0,05^\circ$ . Недоліком була необхідність перевстановлення кристалу для вимірювання кожної кристалографічної зони.

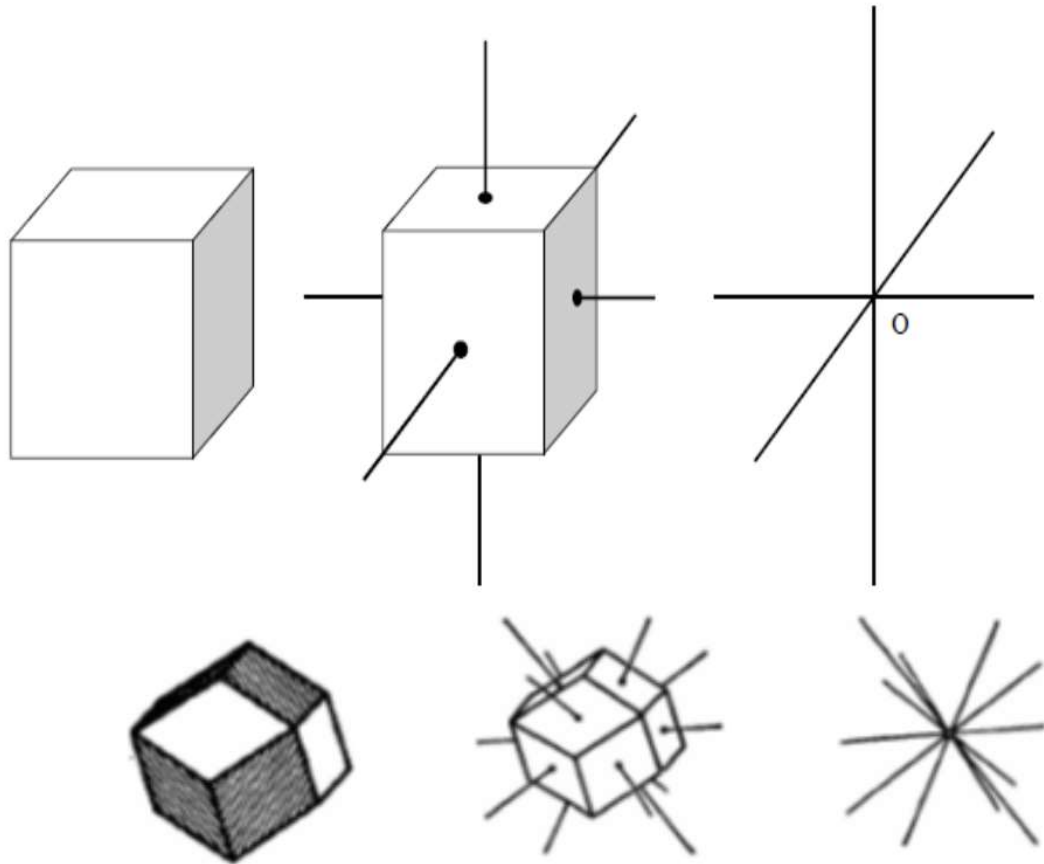


## Методи вимірювання кристалів. Гоніометр Федорова.

3. Двоколовий-теодолітний гоніометр (Федоров, 1889 р.) – похибка  $0,01^\circ$  оскільки була потрібна тільки одна установка кристала на гоніометр.



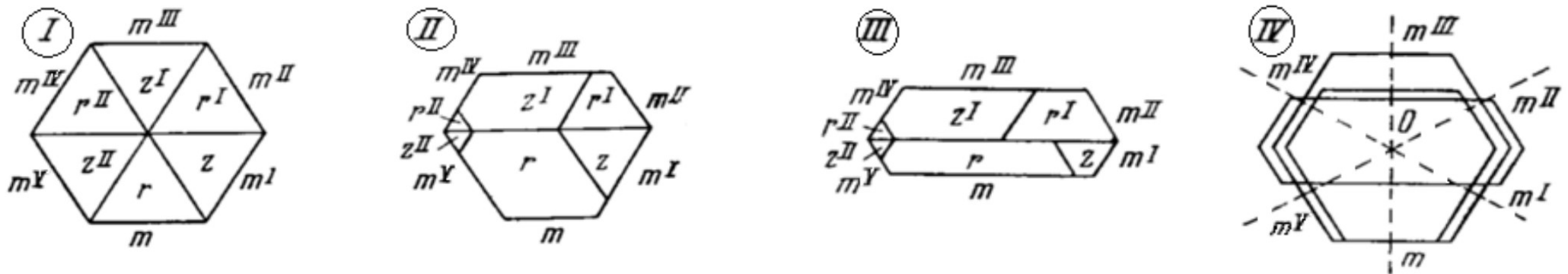
# Гномостереографічні проекції кристалів.



Утворення полярного комплексу для прямокутного паралелепіпеду та ромбододекаедру.

# Гномостереографічні проекції кристалів.

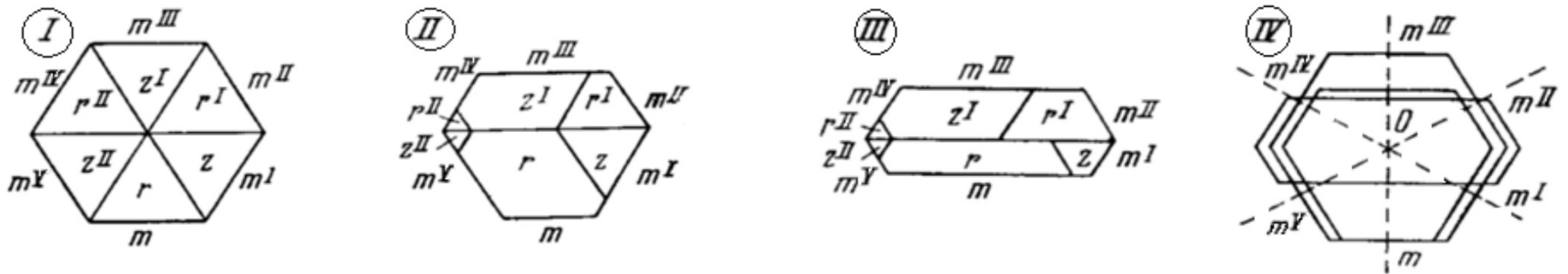
Якщо грань розташована так, що нормаль, проведена до неї, не проходить через центр комплексу, то нормаль (або грань) треба перенести паралельно самій собі, що не порушує кутових співвідношень.



Ілюстрація паралельності відповідних граней кристалів кварцу з різною зовнішньою огранкою: I-III – вид зверху; IV – всі три проекції накладені одна на одну.

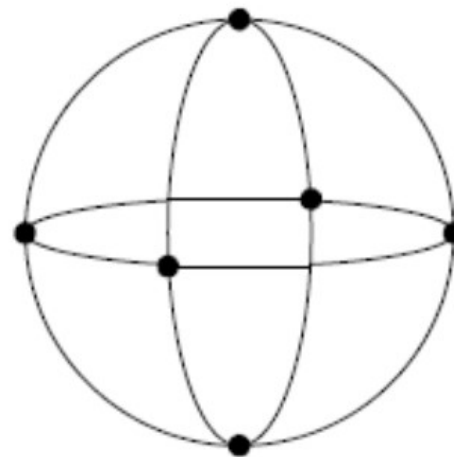
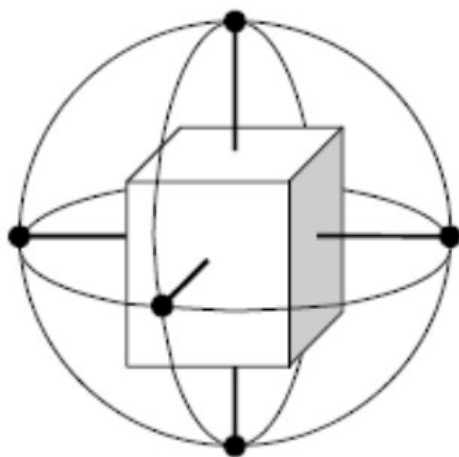
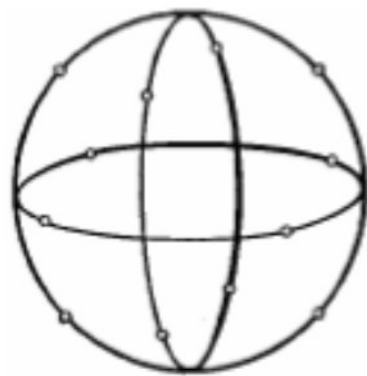
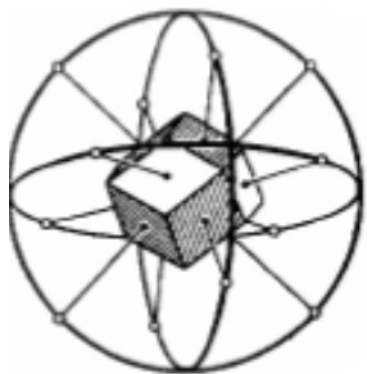
# Гномостереографічні проекції кристалів.

Якщо грань розташована так, що нормаль, проведена до неї, не проходить через центр комплексу, то нормаль (або грань) треба перенести паралельно самій собі, що не порушує кутових співвідношень.

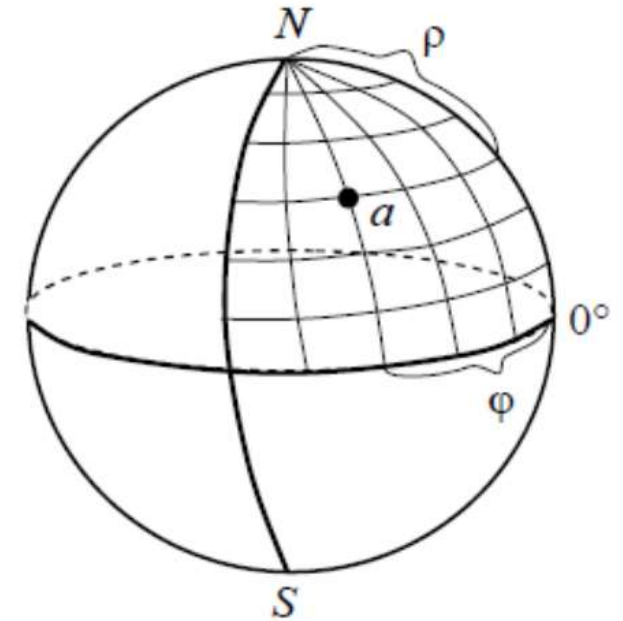


Ілюстрація паралельності відповідних граней кристалів кварцу з різною зовнішньою огранкою: I-III – вид зверху; IV – всі три проекції накладені одна на одну.

## Гномостереографічні проєкції кристалів.



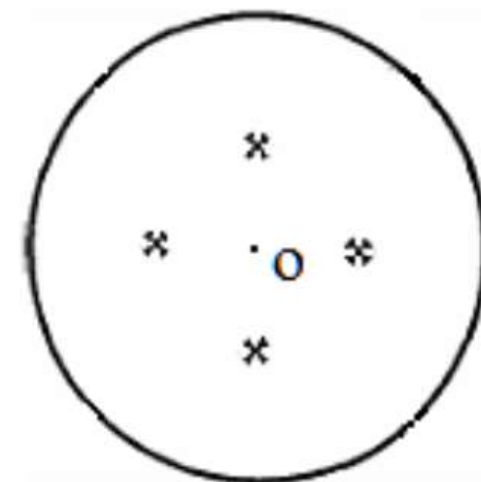
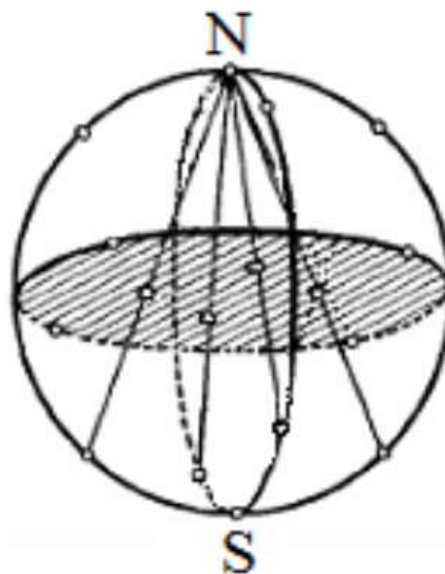
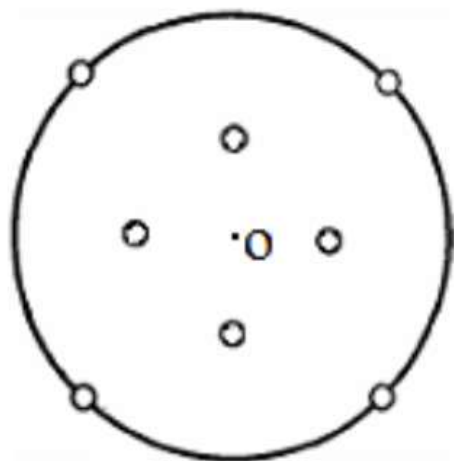
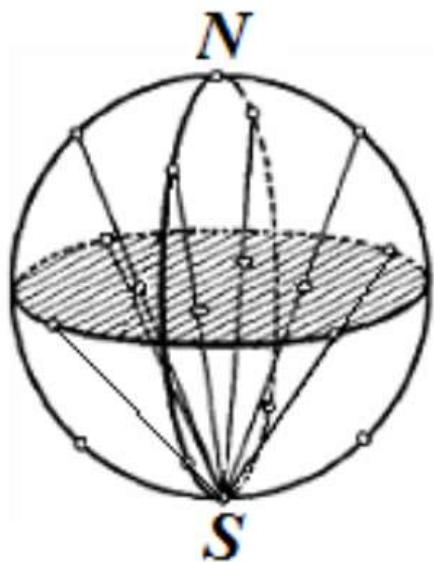
## Гномостереографічні проєкції кристалів.



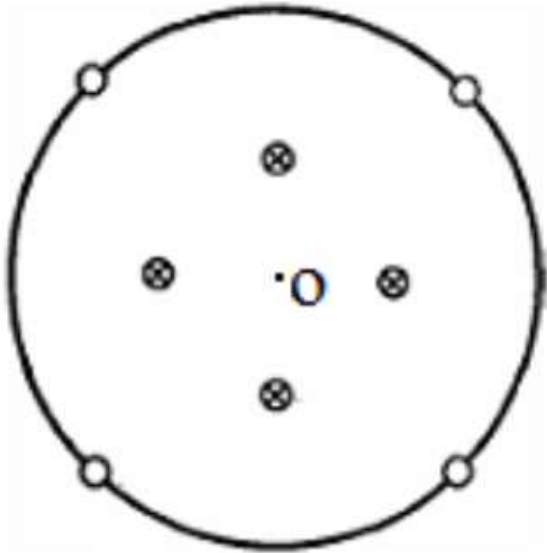
Сферична проєкція кристала наочна, але для практичного застосування її зручніше спроектувати на площину і користуватись плоскою проєкцією – *гномостереографічною проєкцією*, яка зберігає найбільш важливу характеристику кристала, яка відповідає закону постійності кутів між відповідними гранями.



## Гномостереографічні проєкції кристалів.



## Гномостереографічні проекції кристалів.

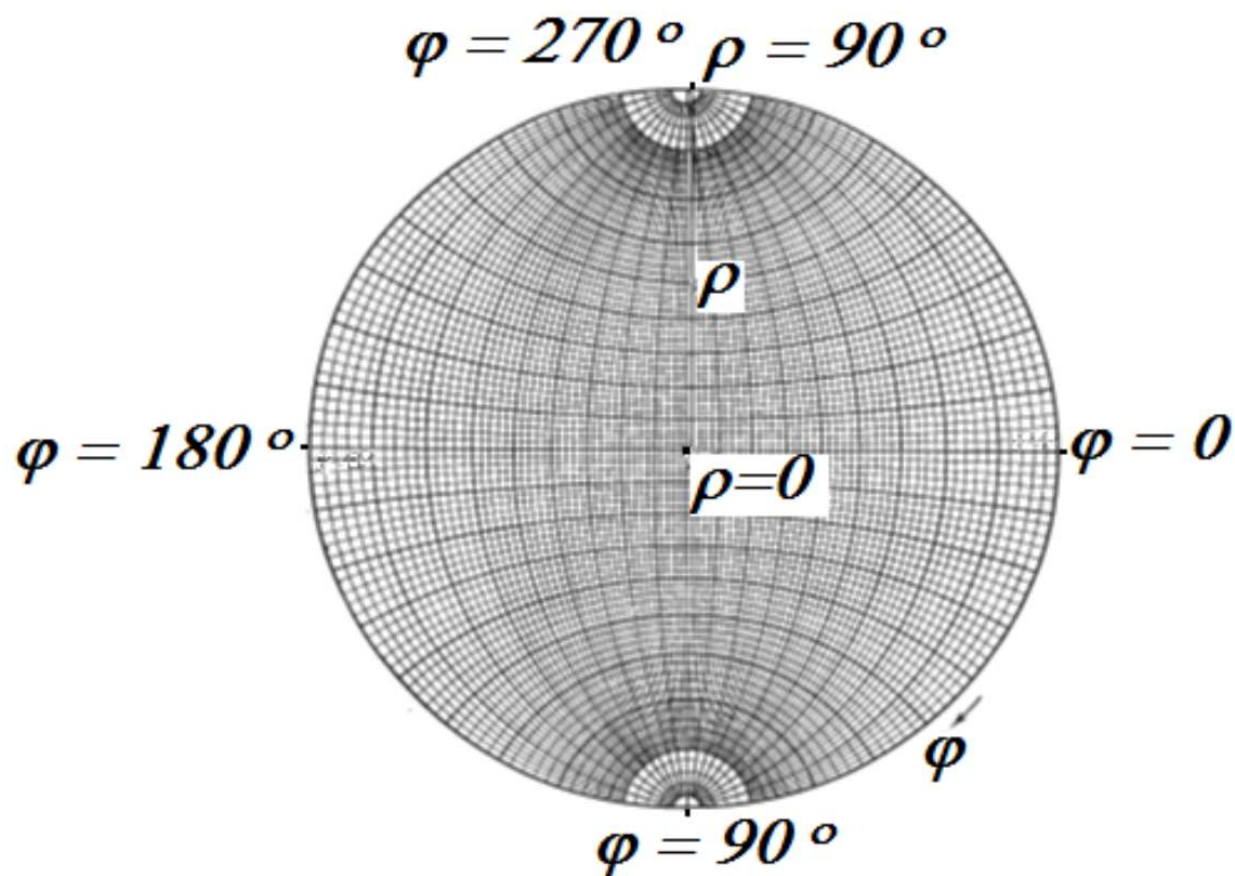


Комплекс граней, нормалі яких лежать в одній площині, утворюють *зону*, тобто сукупність граней, паралельних одному ребру – так званої *осі зони*. Проекції граней, що належать одній зоні (таутозональні грані), розташовуються на одній дузі великого кола.

*Горизонтальні грані проектується в центрі кола проекцій, вертикальні грані – на самому колі проекцій, а похилі грані – у середині кола.*

## Сітка Вульфа.

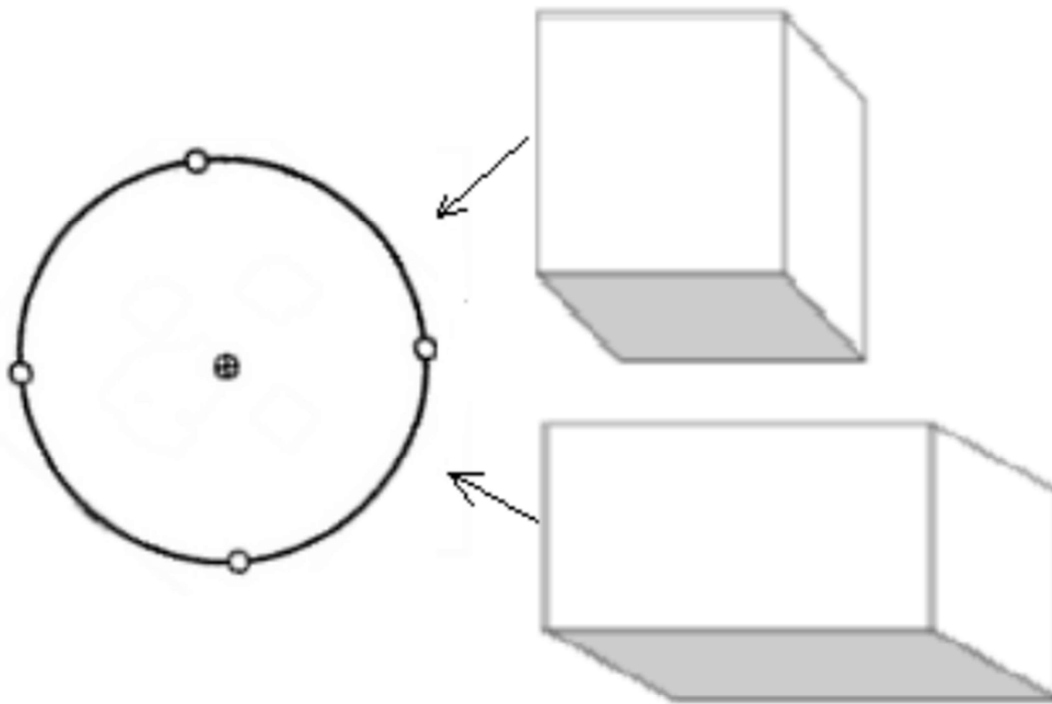
Для того щоб визначити по гномостереографічній проекції кути між гра-  
нями, потрібно скористатися спеціальною сіткою – **сіткою Вульфа**.



## Елементи симетрії кристалів (дисконтініум).

**Важлива особливість гномостереографічної проєкції.**

Гномостереографічна проєкція відображає лише взаємне розташування граней кристала і, ні яким чином, не вказує на його форму та розміри.



## Елементи симетрії кристалів (дисконтініум).

Елементи симетрії обумовлюють наявність напрямків, які повторюються у кристалі – симетрично рівних напрямків, - пов'язаних між собою елементами симетрії.

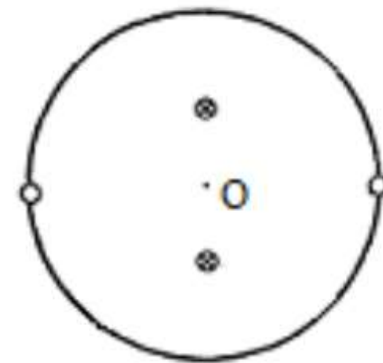
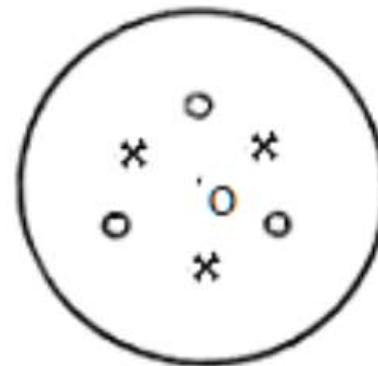
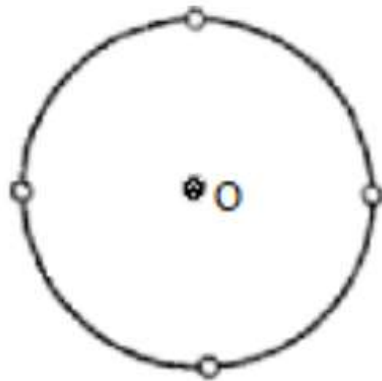
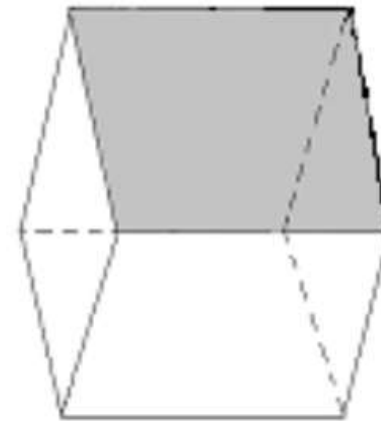
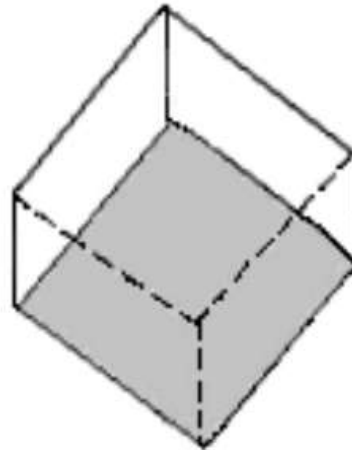
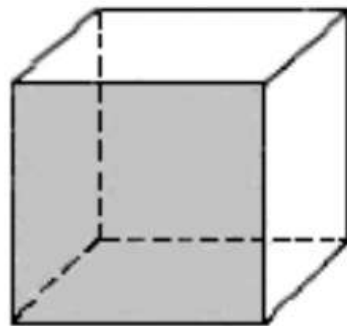
## Поняття одиничного напрямку.

*Одиничним напрямком* називається напрямок кінці якого геометрично і фізично не є еквівалентними, їх не можна сумістити один з одним ніякими перетвореннями симетрії. Тобто, одиничним називається напрямок, який не повторюється в кристалі.

Одиничних напрямків може бути декілька. Наприклад, у прямокутного паралелепіпеда є три взаємно-перпендикулярних одиничні напрямки, які співпадають із  $3L_2$ .

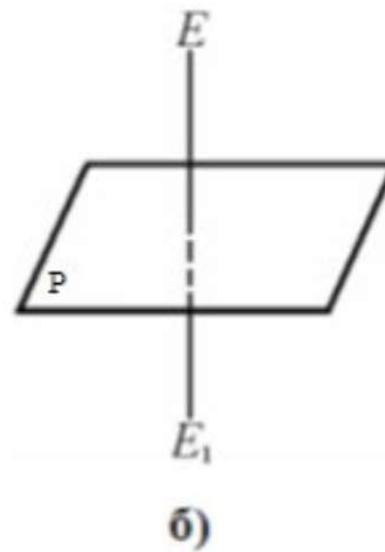
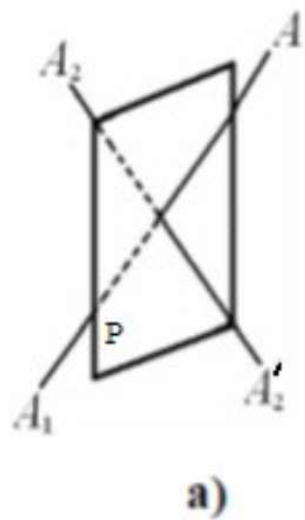
Отже, кристали можуть мати одиничний напрямок і не мати його.

## Поняття одиничного наряду.

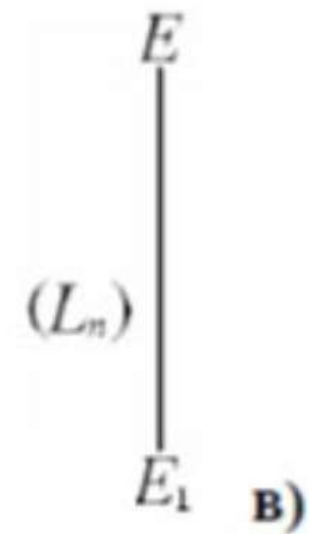
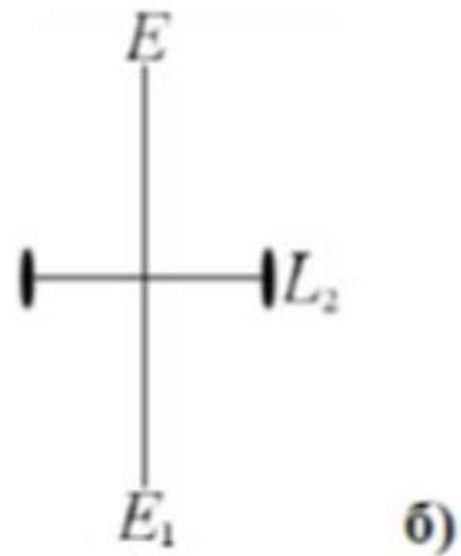
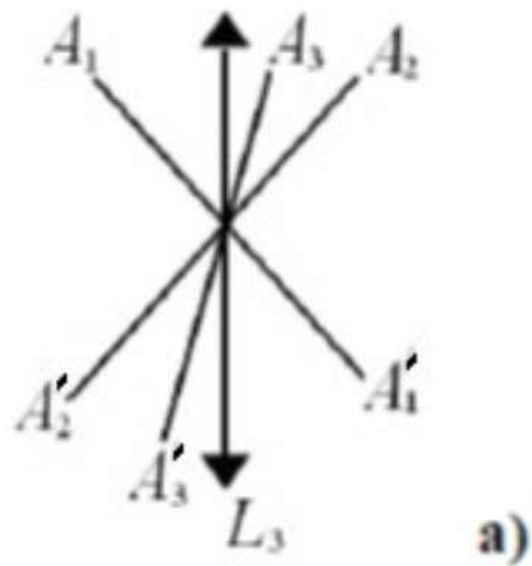




# Поняття одиничного напрямку.



# Поняття одиничного напрямку.



## Взаємне розташування одиничного напрямку і елементів симетрії кристалів в просторі.

$\uparrow^E$ , якщо він є в кристалі, завжди співпадає з віссю  $Z$ .

1. Якщо в кристалі є  $C$ , то він завжди лежить на  $\uparrow^E$ .

2. Якщо в кристалі є  $P$ :

а).  $\uparrow^E$  може бути  $\perp$  до  $P$  (ортогональний напрямок);

б).  $\uparrow^E$  може лежати на  $P$  (планальний напрямок).

3. Якщо в кристалі є  $L_n$  то вона може проходити тільки вздовж  $\uparrow^E$ .

4. Якщо в кристалі є  $L_2$  то вона може бути  $\perp$  до  $\uparrow^E$ .

5.  $\uparrow^E$  може одночасно бути  $\perp$   $L_2$  і  $P$  ( $L_2$  лежить на  $P$ ).

6. Якщо кристал має лише  $L_1$  або  $C$ , то вісь  $Z$  повинна розташовуватися таким чином, щоб в вертикальну кристалографічну зону попадала максимальна кількість його граней.

7. Для кристалів *кубічної сингонії*, які не мають одиничних напрямків, за вісь  $Z$  вибирається одна із трьох взаємно ортогональних осей  $L_4$ ,  $L_{\bar{4}}$  або  $L_2$ .