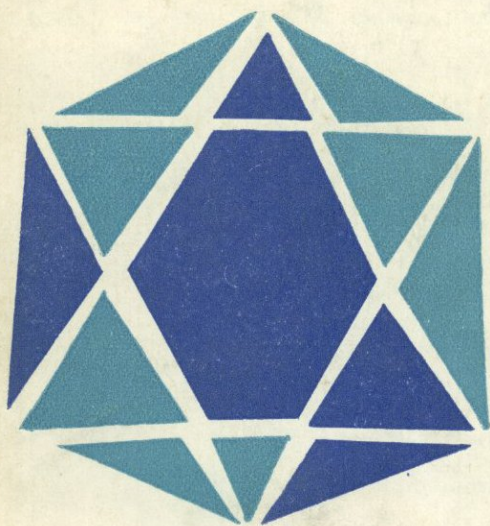


# ГРАФИКА КРИСТАЛЛОВ

А. Г. БУЛАХ

---



А. Г. БУЛАХ

548.  
Б 90

# ГРАФИКА КРИСТАЛЛОВ

*(Измерение, вычисление и вычерчивание)*

30



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НЕ ДРА»  
МОСКВА · 1971



**Графика кристаллов** (измерение, вычисление и вычерчивание). Булах А. Г., изд-во «Недра», 1971, стр. 112.

Приводятся сведения по технике измерения кристаллов на гониометрах и обработке результатов измерений. На конкретных примерах рассматривается последовательность изучения кристаллов, описываются приемы получения координат сводного кристалла, расчета символов граней и геометрических констант кристаллов, правила и приемы их вычерчивания. Дается краткий обзор методов определения ориентации неограниченных и плохо ограниченных кристаллов.

Таблиц 27, иллюстраций 18, библиография — 66 названий.

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Гониометрия — измерение углов на кристаллах — долгое время была одним из основных методов изучения кристаллов, особенно наиболее совершенных их представителей — минералов.

Главным образом данные гониометрического изучения кристаллов привели в XVII—XIX в. к раскрытию основных законов геометрической макрокристаллографии — постоянства граничных углов (Стенон), рациональности параметров (Аюи), зон (Вейсс), симметрии (Гессель — Гадолин). Еще более примечательно, что эти же данные привели к концу XIX в. Браве и Зонке и в наиболее совершенном виде нашего гениального соотечественника Е. С. Федорова к теории решетчатого атомно-молекулярного строения кристаллов, выводу 230 законов такого строения, разработке теории параллелоэдров. Это был триумф гониометрии; казалось, что только по данным изучения формы кристаллов и могут быть познаны их структурные характеристики. Именно это обстоятельство и связано с созданием Е. С. Федоровым двукружного теодолитного гониометра, с разработкой им и его учениками методов гониометрических измерений и вычислений, методов кристаллохимического анализа, который по данным гониометрии давал возможность определять строение кристаллов и идентифицировать их. Если до этого времени измерение и вычисление кристаллов на однокружном гониометре Волластона составляло исключительно трудоемкую задачу, то прибор Е. С. Федорова упростил технику измерения, а развитые его учеником О. М. Аншелесом методы вычисления (метод непосредственной подстановки, графические методы и др.) сделали эту методику широко распространенной не только в СССР, но и за рубежом.

Федоровский двукружный гониометр был сразу по достоинству оценен и воспринят в разных странах и по его идее были созданы технически более удобные приборы (В. Гольдшмидт, Чапский, Флинт и др.).

В начале XX в. гониометрия получила бурное развитие, особенно в минералогии, давая возможность устанавливать не только морфологические характеристики минералов, но и связывать их морфологию с генезисом (типоморфизм), структурой, свойствами. Однако открытие дифракции рентгеновских лучей на кристаллах (Лауэ, 1912), развитие методов рентгеноструктурного анализа и рентгеновской идентификации вещества значительно затормозили развитие гониометрических исследований. Многие задачи гониометрии стали глубже, проще, точнее и быстрее решаться рентгеновскими методами (определение элементов кристалла, симметрии, ориентации). Микрорентгенография отвлекла внимание значительной части исследователей кристаллов и привела к значительным успехам кристаллохимии и структурной минералогии. Стали высказываться неоправданные взгляды на гониометрию как на устаревший метод исследования кристаллов. Но за последнее время все с большей отчетливостью выявляется сохранившееся значение гониометрических методов исследования в кристаллографии вообще и в минералогической кристаллографии в особенности.

Новые аспекты морфологии кристаллов, ее связь с дефектами и реальным кристаллом, условиями генезиса, свойствами и т. д. привели к оживлению интереса к морфологическим исследованиям как искусственно выращенных кристаллов, так и минералов (Донней, Харкер, И. И. Шафрановский и др.).

Имеющиеся руководства по гониометрии (Бонштедт-Куплетская, 1934; Аншелес, 1939) стали библиографической редкостью. В отдельных же вопросах они просто устарели.

В связи с этим общедоступное руководство А. Г. Булаха по измерению кристаллов на гониометре и их черчению появляется весьма своевременно и восполняет существенный пробел не только в отечественной, но и в зарубежной литературе.

Будучи минералогом и имея достаточный опыт измерения минералов на гониометре, А. Г. Булах, не касаясь

сложных теоретических вопросов гониометрии кристаллов (теория проектирования, графические и аналитические вычисления) и технических проблем гониометрии (теория юстировки, точность прибора), рассматривает в популярном виде практические приемы подготовки гониометра к работе, методику измерения, вычисления и черчения кристаллов, которые могут потребоваться не специалисту в данной области, когда перед ним возникнет необходимость осуществить для каких-либо специальных целей (будь то задача описания морфологии искусственного соединения или минерала, идентификация минерала по форме и пр.) гониометрическое измерение кристаллов.

Имея общую кристаллографическую подготовку и используя данную работу А. Г. Булаха, читатель справится с задачей — измерит кристалл на двукружном гониометре любой конструкции, обработает результаты измерения, даст квалифицированное гониометрическое описание и чертеж изучаемого кристалла. Имеющиеся в работе ссылки на специальную литературу при необходимости ознакомят читателя с более специальными разделами гониометрии и кристалломорфологии.

Приходится отметить некоторые вопросы, в которых редактор не может полностью согласиться с автором в подходе к некоторым вопросам гониометрии кристаллов. Сюда относятся идея о необходимости для кристаллов обязательно структурной установки, недостаточно строгое рассмотрение проблемы перемены установки и трансформации символов, определения ориентации неограниченных кристаллов.

Несколько усложняет процесс обработки гониометрических данных проводимая автором идея о целесообразности после использования стереопроекции вычерчивать кристалл по гномонической проекции; по стереографической проекции это делается быстрее и также просто.

Как известно, федоровская гониометрическая школа, которая завоевала признание во всем мире, в отличие от школы немецкого ученого В. Гольдшмидта, использует в основном стереографическую проекцию, применяя только иногда в упрощенном виде гномоническую проекцию для решения частных графических задач (индексирование и пр.). Что касается структурной установки, то

действительно у нее имеется неопценное преимущество — она однозначна и согласована с структурой. Но при морфологических исследованиях кристаллов часто значительно глубже позволяет проникнуть в природу морфологических проявлений морфологическая установка. Кроме того, структурная единичная плоскость может отсутствовать на кристалле, а во многих случаях гониометрическое измерение осуществляется для кристаллов, структура которых неизвестна, и предшествует структурному исследованию.

Все это, конечно, не лишает книгу А. Г. Булаха большой ценности. Следует надеяться, что появление этой просто написанной работы оживит интерес к гониометрическому изучению как природных, так и синтезируемых кристаллов, повысит уровень этих исследований.

*Профессор В. А. Франк-Каменский*

## ВВЕДЕНИЕ

Исследование формы кристаллов и эволюции их облика является одним из методов изучения процессов минералообразования. Неотъемлемую и необходимую часть такого исследования составляет измерение кристаллов, позволяющее при помощи точных методов гониометрии определить морфогенетические особенности кристаллов из разных генераций и зарождений минерала. Проблемы технического использования кристаллов также постоянно рождают необходимость изучения их морфологии. Настоящая работа задумана как краткое методическое пособие по измерению, вычислению и черчению кристаллов. В ней приведен также обзор методов определения ориентации неограниченных или плохо ограниченных кристаллов. Работа иллюстрирована минералогическими примерами, но в равной мере относится к кристаллам любых веществ.

Все изложение материала в работе подчинено идее предпочтительности придания кристаллам структурной установки. В соответствии с этим излагаются приемы вычисления кристаллов, даются формулы для расчетов сферических координат, геометрических констант и символов. Поскольку морфологическая установка, отличная от структурной, иногда бывает удобной для описания морфологии кристаллов и в тех случаях, когда их структура неизвестна, она оказывается единственно возможной, в работе даны также правила морфологической установки. В ее специальном разделе рассмотрены приемы смены установки кристаллов и соответствующих этой смене перерасчетов.

Пособие рассчитано на лиц, знакомых с основами кристаллографии. Оно начинается с вводной главы, в которой излагаются некоторые элементы кристаллогра-

фии. Затем следуют главы, посвященные технике измерения кристаллов на двукружном гониометре. Далее описывается обработка результатов измерения, вычисление и черчение кристаллов.

В работе рекомендован следующий поэтапный путь выполнения операций:

визуальное изучение кристаллов; измерение кристаллов (см. стр. 32);

нанесение на сетку Вульфа результатов измерения, определение сингонии и вида симметрии кристаллов (см. стр. 44); расчет координат сводного кристалла (см. стр. 47); вычисление кристаллов (оно может выполняться отчасти аналитическим путем — по формулам, отчасти графически — с использованием как стереографической, так и гномонической проекции) (см. стр. 58); черчение кристаллов (см. стр. 84).

В работе используются международные обозначения видов симметрии кристалла, для обозначения осей симметрии разного порядка — цифры 2, 3, 4, 6, для инверсионных осей —  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$ .

В подготовке книги автору оказали большую помощь советами и замечаниями В. А. Франк-Каменецкий, О. М. Римская-Корсакова, В. Бресковска, Е. И. Нефедов, А. Н. Кулаков, Н. Н. Смольянинова, Т. А. Яковлевская и особенно В. Г. Кривовичев и Э. М. Бонштедт-Куплетская, а в ее графическом оформлении — И. М. Пискижов, В. В. Балаганский и Ц. Самбаллхундэв. Всем им автор глубоко благодарен.

## ЭЛЕМЕНТЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

## Установка кристаллов

Сравнение облика кристаллов, особенностей развитых на них граней, сопоставление результатов различных морфологических исследований было бы невозможно без унификации формы представления результатов исследований и введения стандарта в установку кристаллов относительно наблюдателя. Установкой кристалла называют выбор кристаллографических осей и единичной грани.

*Кристаллографические оси* служат координатными осями при определении символов граней и их сферических координат. Обычно избираются три кристаллографические оси подобно системе координат в геометрии. Но углы между осями не обязательно прямые. Кроме того, в гексагональной и тригональной сингонии в дополнение к обычным трем осям используется еще одна — вспомогательная. Очевидно, что только стандартизированный выбор кристаллографических осей и унифицированный их разворот относительно наблюдателя делает допустимым сравнение морфологических особенностей разных кристаллов.

*Единичная грань* — это грань, отсекающая на координатных осях отрезки, которые являются единицами масштаба для определения символа любой грани кристалла. Для всех кристаллов одного и того же вещества выбор единичной грани производится однозначно.

Для выработки правил установки кристаллов могут быть использованы разные принципы. Наиболее рациональная структурная установка показана на рис. 1.

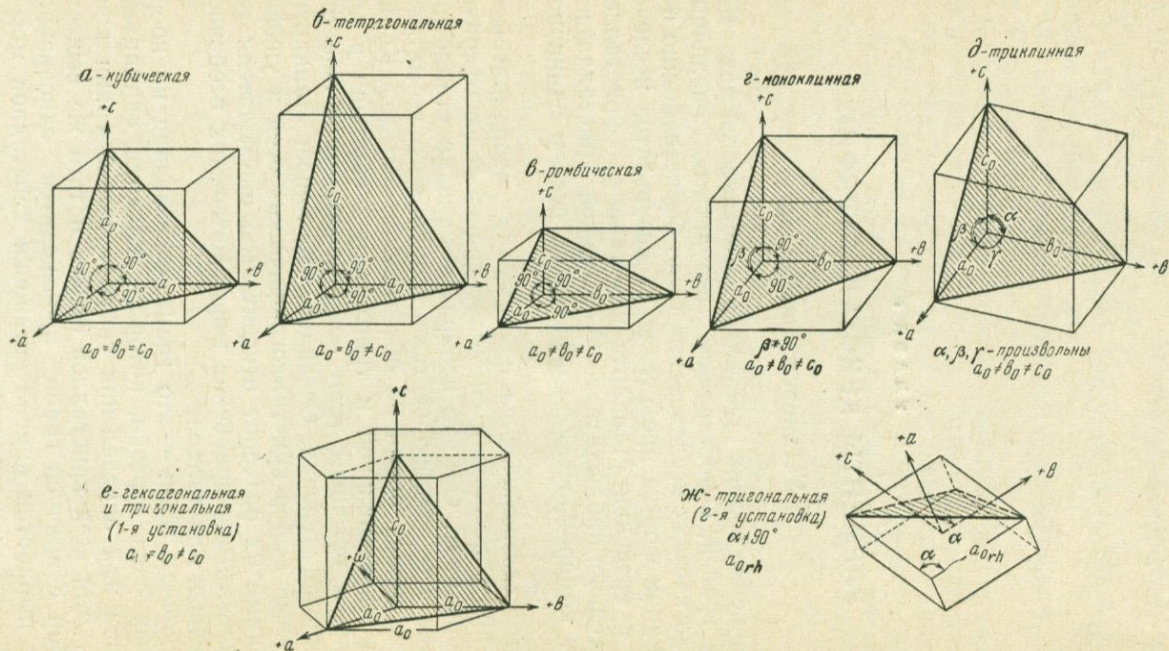


Рис. 1. Структурная установка кристаллов разных сингоний и выбор единичной грани.

В этой установке за кристаллографические оси принимаются направления, параллельные ребрам элементарной ячейки кристалла. Единичной является грань (реально развитая на кристалле или гипотетическая), которая отсекает на координатных осях отрезки, пропорциональные параметрам элементарной ячейки.

При отсутствии структурных характеристик кристалла или для специальных целей можно производить морфологическую установку кристаллов по развитым на них граням. Она производится по строго определенным для каждой сингонии правилам. Морфологическая установка кристаллов может не совпадать со структурной.

### Выбор кристаллографических осей

*Для кристаллографических осей во всех сингониях, кроме гексагональной и тригональной, приняты следующие обозначения:*

первая ось  $[100]$ , иначе ось  $a$ , иначе ось  $x$ ;  
вторая ось  $[010]$ , иначе ось  $b$ , иначе ось  $y$ ;  
третья ось  $[001]$ , иначе ось  $c$ , иначе ось  $z$ .

*В гексагональной и тригональной сингонии приняты обозначения:*

первая ось  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ , иначе ось  $a$ , иначе ось  $x$ ;  
вторая ось  $[\bar{1}2\bar{1}0]$  иначе ось  $b$ , иначе ось  $y$ ;  
третья ось (вспомогательная)  $[\bar{1}\bar{1}20]$ , иначе ось  $w$ ;  
четвертая ось  $[0001]$ , иначе ось  $c$ , иначе ось  $z$ .

*В кубической сингонии за элементарную ячейку принимается куб. При структурной установке координатные оси проводятся параллельно ребрам элементарного куба.*

При морфологической установке за координатные оси принимают три перпендикулярные оси симметрии 4, либо 2. Кристалл в структурной и морфологической установках разворачивают относительно наблюдателя так, чтобы одна ось была горизонтальна и направлена строго на наблюдателя. Это ось  $a$ . Ось  $b$  располагают горизонтально параллельно наблюдателю. Ось  $c$  вертикальная.

Морфологическая и структурная установки кристаллов идентичны друг другу.

В тетрагональной сингонии за элементарную ячейку принимается тетрагональная призма, ограниченная базопинакоидом.

При структурной установке направление, параллельное главной оси симметрии, ставят вертикально и принимают за ось  $c$ . Два других ребра элементарной ячейки оказываются, таким образом, в горизонтальной плоскости. Одно из них направляют на наблюдателя и принимают за ось  $a$ , второе (ось  $b$ ) разворачивают параллельно наблюдателю.

При морфологической установке за вертикальную ось  $c$  принимают ось симметрии  $\bar{4}$  или 4. Выбор двух других осей несколько произволен:

1) при наличии осей симметрии 2 за координатные оси  $a$  и  $b$  можно принять любую пару взаимно перпендикулярных осей 2;

2) при наличии только плоскостей симметрии за координатные оси  $a$  и  $b$  принимают любую пару взаимно перпендикулярных нормалей плоскостей симметрии.

Морфологическая установка для случаев 1 и 2 может либо совпадать со структурной, либо отличаться от нее поворотом кристалла вокруг оси  $c$  на  $45^\circ$ ;

3) в кристаллах примитивного, центрального, инверсионно-примитивного видов симметрии за оси  $a$  и  $b$  принимают два взаимно перпендикулярных направления, которые параллельны действительным или возможным ребрам кристалла. Морфологическая установка таких кристаллов может отличаться от их структурной установки произвольным поворотом вокруг оси  $c$ .

В ромбической сингонии за элементарную ячейку принимается прямоугольный параллелепипед.

При структурной установке за координатные оси принимают три взаимно перпендикулярные ребра элементарной ячейки. За вертикальную ось  $c$  принимают ребро с наименьшим параметром элементарной ячейки — вдоль этого направления кристаллы, как правило, удлинены. Ребро с наибольшим параметром элементарной ячейки устанавливают параллельно наблюдателю (ось  $b$ ). Ось  $a$  направляют на наблюдателя. За нее принимают ребро со средним параметром элементарной ячейки. Итак,  $c_0 < a_0 < b_0$ . Эти правила выбора осей по величине параметра элементарной ячейки предложены Международным союзом кристаллографов лишь

в недавнее время. Поэтому до сих пор во многих работах можно найти разные варианты структурной установки кристаллов даже для одного и того же минерала.

При морфологической установке в кристаллах аксиального и планаксиального видов симметрии за координатные оси принимают оси симметрии 2. В планальном виде симметрии за вертикальную принимают ось 2; две другие оси отвечают нормальям к плоскостям симметрии.

Морфологическая и структурная установки кристаллов здесь могут не совпадать.

*В моноклинной сингонии* за элементарную ячейку принимают прямой параллелепипед.

При структурной установке сначала выбирают ось  $b$ . За нее принимают ребро, перпендикулярное плоскости симметрии элементарного параллелепипеда. Разворачивают его горизонтально и параллельно наблюдателю. При этом два других ребра, образующих между собой непрямой угол ( $\beta$ ), оказываются в вертикальной плоскости. Одно из них, отвечающее меньшему параметру, ориентируют вертикально и принимают за ось  $c$ . Другое ребро должно быть направлено вперед и вниз — это ось  $a$ . Итак,  $a_0 > c_0$ . В старых работах это соотношение не всегда выдерживалось и выбор осей  $a$  и  $c$  мог быть обратным.

При морфологической установке начинают с выбора оси  $b$ . В аксиальном и планаксиальном видах симметрии ей отвечает ось 2, в планальном — нормаль к плоскости симметрии. Затем ориентируют вертикально ось зоны удлинения кристалла и принимают ее за ось  $c$ . (При этом следует иметь в виду, что кристаллы моноклинной сингонии, например эпидот, могут быть удлинены и по оси  $b$ .) Ось  $a$  проводят параллельно каким-либо реальным или возможным ребрам кристалла, лежащим в плоскости симметрии (в планальном и планаксиальном видах симметрии) или в плоскости, перпендикулярной оси 2 (в аксиальном виде симметрии).

В структурной и морфологической установках положение оси  $b$  идентично; выбор двух других осей может оказаться различным.

*В триклинной сингонии* за элементарную ячейку принимается косой параллелепипед.

При структурной установке координатные оси проводят параллельно ребрам элементарной ячейки. Углы между всеми осями имеют произвольное значение. Одно из ребер ориентируют вертикально (ось  $c$ ), другое направляют на наблюдателя (ось  $a$ ), третье ребро располагают примерно в плоскости, параллельной наблюдателю (ось  $b$ ). Здесь, как и в ромбической сингонии, желательнее придерживаться соотношения  $c_0 < a_0 < b_0$ .

При морфологической установке координатные оси выбирают по трем действительным или возможным ребрам кристалла. Предпочтительно в качестве осей выбирать оси наиболее развитых зон кристалла, углы между которыми максимально приближаются к прямым.

Морфологическая и структурная установки кристаллов могут не совпадать.

Как видно, в триклинной сингонии установка кристаллов во многом произвольна. Для унификации ее следует строго придерживаться некоторых ограничительных условий, как это сделано, например, в работах О. М. Аншелеса (1939), В. В. Доливо-Добровольского (1928), справочнике Дэна (1950—1954): 1) ось  $c$  всегда вертикальна (при этом условии первый и второй пинакоиды также ориентированы строго вертикально); 2) пинакоид (010), реально развитый или отсутствующий на кристалле, ориентируют строго перпендикулярно наблюдателю. Именно для такой ориентировки кристаллов триклинной сингонии даны все приводимые в этой книге формулы их расчетов. Формулы для других расчетов можно найти в работе О. М. Аншелеса (1939).

В гексагональной и тригональной сингонии в качестве элементарной ячейки принимается  $1/3$  гексагональной призмы, ограниченной пинакоидом. Выбирают три координатные оси  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и одну вспомогательную ось  $w$ .

При структурной установке ось  $c$ , как всегда, вертикальна и параллельна главной оси симметрии. Остальные три оси лежат в горизонтальной плоскости и проводятся через  $120^\circ$  друг от друга.

При морфологической установке вертикально устанавливают ось симметрии  $3, \bar{6}$ . За три горизонтальные кристаллографические оси принимают: 1) в кристаллах аксиального, планаксиального видов симметрии — оси 2; 2) в кристаллах планального и ин-

версионно-планального видов симметрии — нормали к плоскостям симметрии; 3) в кристаллах примитивного, центрального и инверсионно-примитивного видов симметрии — реальные или возможные ребра кристаллов.

При структурной и морфологической установке кристаллов в горизонтальной плоскости лежат три кристаллографические оси:  $a$ ,  $b$  и вспомогательная ось  $w$ . Они могут быть развернуты относительно наблюдателя по-разному. В минералогических справочниках («Минералы» Дэна и др.) ось  $b$  направлена слева направо строго параллельно наблюдателю, ось  $a$  направлена от центра координат влево вперед; третья (вспомогательная ось) —  $w$  влево назад (рис. 2). Установка кристаллов, выполненная по морфологическим признакам, может отличаться от структурной поворотом вокруг оси  $c$  на 30 или 60°.

Имеется редко используемый второй вариант установки тригональных кристаллов. В качестве элементарной ячейки принимается ромбоэдр. Кристалл разворачивают таким образом, чтобы его ось симметрии 3 была вертикальна. Координатные оси проводят из центра кристалла вверх в виде пучка лучей. Лучи расходятся параллельно ребрам ромбоэдра. Ось  $a$  направлена вперед, ось  $b$  — вправо назад, ось  $c$  — влево назад. Эта установка нами не рассматривается.

### Система отсчета сферических координат граней

При расположении кристалла в центре сферы легко обозначить положение любой грани при помощи двух сферических координат, подобно тому, как положение любой точки на земной поверхности определяется ее широтой и долготой. Координаты полюсов граней принимают за сферические координаты самих граней кристалла. Если принять единую систему отсчета координат, то идентичные грани разных кристаллов одного и того же вещества будут иметь одни и те же сферические координаты (при условии одинаковой установки кристаллов).

В кристаллографии принята определенная однозначная система отсчета координат (рис. 3).

Первая координата — полярное расстояние  $\rho$ . Она показывает угол наклона грани. Ноль отсчета угла  $\rho$  для верхних граней расположен на верхнем («север-



ном») полюсе сферы, для нижних граней — на нижнем («южном») полюсе. Для горизонтальной грани угол  $\rho$  равен  $0^\circ$ , для вертикальных граней он составляет  $90^\circ$ . Координаты  $\rho$  верхних наклонных граней заключены

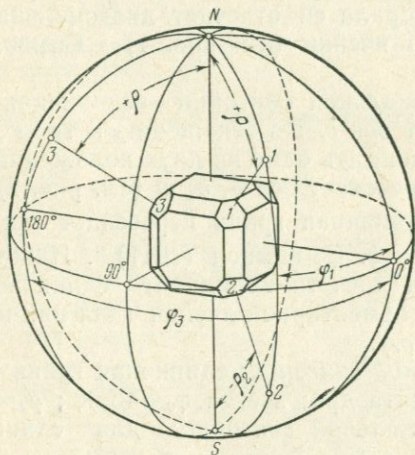


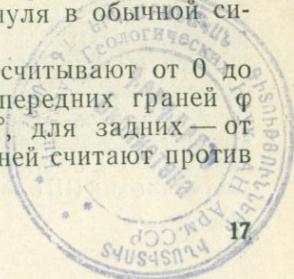
Рис. 3. Сферические координаты граней:

$\rho$  — полярное расстояние,  $\varphi$  — долгота,  $N$  и  $S$  — точки начала отсчета углов  $\rho$ ;  $O^0$  — точка начала отсчета углов  $\varphi$ , 1, 2, 3 — номера граней.

между  $0$  и  $90^\circ$ , координаты нижних наклонных граней находятся в рамках от  $(-)$  $90^\circ$  до  $0^\circ$ .

Вторая координата — долгота  $\varphi$ . Ее отсчитывают по экватору от нулевого меридиана. Положение нулевого меридиана определяется точкой пересечения с экватором того горизонтального диаметра сферы, который проходит параллельно наблюдателю. В гексагональной сингонии ноль отсчетов угла  $\varphi$  переносят по часовой стрелке на  $30$  или  $60^\circ$  от места нуля в обычной системе отсчетов (см. рис. 2).

От места нуля долготу граней отсчитывают от  $0$  до  $360^\circ$  по часовой стрелке. Для всех передних граней  $\varphi$  заключено в пределах от  $0$  до  $180^\circ$ , для задних — от  $+180$  до  $+360^\circ$ . Иногда  $\varphi$  задних граней считают против часовой стрелки от  $0$  до  $(-)$  $180^\circ$ .



## Единичная грань

Единичная грань является масштабной гранью при вычислении символов всех других граней кристалла. Во всех сингониях, кроме гексагональной, она пересекает все три кристаллографические оси. В кристаллической решетке минерала ей отвечает диагональная плоскость элементарной ячейки (см. рис. 1). Символ единичной грани  $(111)$ .

В гексагональной сингонии — единичная грань всегда пересекает ось  $c$ . По отношению к трем другим осям она может занимать одно из двух положений: 1) единичная грань пересекает оси  $a$ ,  $b$ ,  $\omega$  (см. рис. 2). Ее символ  $(11\bar{2}1)$ ; 2) единичная грань пересекает оси  $a$ ,  $\omega$  и параллельна оси  $b$ . Ее символ  $(10\bar{1}1)$ \*. Ниже приводятся формулы для расчета координат единичной грани по параметрам элементарной ячейки (для них приняты обозначения  $\varphi_e$ ,  $\rho_e$ ).

*В кубической сингонии:* единичная грань — грань тетраэдра или октаэдра; всегда  $\varphi_e = 45^\circ 00'$ ;  $\rho_e = 54^\circ 44'$ .

*В гексагональной сингонии:* для единичной грани  $(11\bar{2}1)$   $\text{tg } \rho_e = 2 \frac{c_0}{a_0}$ ,  $\varphi_e = 30^\circ 00'$ ; для единичной грани  $(10\bar{1}1)$   $\text{tg } \rho_e = 1,1548 \frac{c_0}{a_0}$ ;  $\varphi_e = 60^\circ 00'$ . Положение нуля отсчетов  $\varphi$  здесь принято по справочнику «Минералы» (1960).

*Пример.* Для киновари  $a_0 = 4,146$ ;  $c_0 = 9,497 \text{ \AA}$ . Следовательно, для грани  $(11\bar{2}1)$ :  $\text{tg } \rho_e = 2 \cdot 2,2906 = 4,5812$ ;  $\rho_e = 77^\circ 40'$ ;

для грани  $(10\bar{1}1)$ :  $\text{tg } \rho_e = 1,1548 \cdot 2,2906 = 2,646$ ;  $\rho_e = 69^\circ 18'$ .

*В тетрагональной сингонии* для всех веществ значение единичной грани  $\varphi = 45^\circ 00'$ ; полярное расстояние определяется по формуле:  $\text{tg } \rho_e = 1,415 \frac{c_0}{a_0}$ .

*Пример.* Для рутила  $a_0 = 4,594$ ,  $c_0 = 2,959 \text{ \AA}$ . Следовательно, для грани  $(111)$ :

$\text{tg } \rho_e = 1,415 \cdot 0,644 = 0,9114$ ;  $\rho_e = 42^\circ 21'$ .

---

\* Для характеристики гексагонального и тригонального кристалла достаточны три индекса: 1, 2, 4; индекс 3 всегда равен сумме двух первых с обратным знаком. При этом единичная грань будет иметь символы  $(III)$  или  $(101)$ . — *Прим. ред.*

В тригональной сингонии для расчетов принимаются формулы те же, что и для гексагональной сингонии.

В ромбической сингонии координаты единичной грани (111) определяются по формулам:

$$\operatorname{ctg} \varphi_e = \frac{a_0}{b_0} \quad \text{и} \quad \operatorname{tg} \rho_e = \frac{c_0}{b_0} \cdot \frac{1}{\cos \varphi_e}.$$

Пример. Для валентинита  $a_0=4,93$ ;  $b_0=12,48$ ;  $c_0=5,43$  Å; следовательно, для грани (111):

$$\operatorname{ctg} \varphi_e = \frac{4,93}{12,48} = 0,395; \quad \varphi_e = 68^\circ 27';$$

$$\operatorname{tg} \rho_e = \frac{5,43}{12,48} \cdot \frac{1}{\cos 68^\circ 27'} = 1,187; \quad \rho_e = 49^\circ 54'.$$

В моноклинной сингонии при вычислении учитывается величина угла  $\beta$  между первой и третьей кристаллографическими осями.

Формулы для расчетов:

$$\operatorname{tg} \varphi_e = \frac{b_0}{a_0} \cdot \frac{1}{\cos(\beta - 90^\circ)} + \frac{b_0}{c_0} \cdot \frac{1}{\operatorname{ctg}(\beta - 90^\circ)};$$

$$\operatorname{tg} \rho_e = \frac{c_0}{b_0} \cdot \frac{1}{\cos \varphi_e}.$$

Пример. Для джемсонита  $a_0=15,71$ ;  $b_0=19,05$ ;  $c_0=4,04$  Å;  $\beta=91^\circ 48'$ .

Для грани (111):

$$\operatorname{tg} \varphi_e = \frac{19,05}{15,71} \cdot \frac{1}{\cos(91^\circ 48' - 90^\circ 00')} +$$

$$+ \frac{19,05}{4,04} \cdot \frac{1}{\operatorname{ctg}(91^\circ 48' - 90^\circ 00')} = 1,3624; \quad \varphi_e = 53^\circ 43';$$

$$\operatorname{tg} \rho_e = \frac{4,04}{19,05} \cdot \frac{1}{\cos 53^\circ 43'} = 0,3563; \quad \rho_e = 19^\circ 43'.$$

В триклинной сингонии здесь и далее для использования формул расчета кристаллов триклинной сингонии кристаллам придается единообразная установка: ось  $c$  вертикальна; пинакоиды (010) и (100) лежат в вертикальной зоне и имеют сферические координаты  $\varphi_{(010)} = 0^\circ 00'$ ;  $\rho_{(010)} = 90^\circ 00'$ ;  $\varphi_{(100)} = x^\circ$ ;  $\rho_{(100)} = 90^\circ 00'$ . Величина угла  $x$  различна для разных веществ. Координаты пинакоида (001) для разных веществ также различны:  $\varphi_{(001)} = y^\circ$ ;  $\rho_{(001)} = z^\circ$ .

В формулы для определения координат единичной грани, помимо геометрических констант кристалла, входит угол  $\varphi_{(100)}$ :

$$\operatorname{ctg} \varphi_e = \frac{\frac{a_0}{b_0} \left( \frac{c_0}{b_0} - \cos \alpha \right) \cdot \sin \beta}{\left( \frac{c_0}{b_0} - \frac{a_0}{b_0} \cos \beta \right) \sin \alpha \cdot \sin \varphi_{(100)}} + \operatorname{ctg} \varphi_{(100)};$$

$$\operatorname{tg} \rho_e = \frac{\frac{c_0}{b_0} - \frac{a_0}{b_0} \cos \beta}{\frac{a_0}{b_0} \sin \beta \cdot \sin \varphi_e} = \frac{\frac{c_0}{b_0} - \cos \alpha}{\sin \alpha \cdot \sin (\varphi_{(100)} - \varphi_e)}.$$

Пример. Для беллинджерита  $a_0=7,23$ ;  $b_0=7,84$ ;  $c_0=7,94 \text{ \AA}$ ;  $\alpha=105^{\circ}06'$ ;  $\beta=96^{\circ}57'$ ;  $\gamma=92^{\circ}55'$ . За пинакоид (100) принята грань  $a$  с координатами  $\rho_{(100)}=90^{\circ}00'$ ;  $\varphi_{(100)}=85^{\circ}03'$ .

$$\operatorname{ctg} \varphi_e = \frac{0,922 (1,013 - \cos 105^{\circ}16') \times}{(1,013 - 0,922 \cos 96^{\circ}57') \times} \\ \frac{\times \sin 96^{\circ}57'}{\times \sin 105^{\circ}06' \cdot \sin 85^{\circ}03'} + \operatorname{ctg} 85^{\circ}03' = 1,1636; \quad \varphi_e = 40^{\circ}41';$$

$$\operatorname{tg} \rho_e = \frac{1,013 - 0,922 \cos 96^{\circ}57'}{0,922 \sin 96^{\circ}57' \cdot \sin 40^{\circ}41'} = 1,884; \\ \rho_e = 62^{\circ}02'.$$

### Геометрические константы кристалла

Для кристаллов всех сингоний, кроме кубической, положение единичной грани связано с некоторыми их геометрическими характеристиками. К числу их относятся углы между кристаллографическими осями и параметры элементарной ячейки. При описании морфологии кристаллов принято из углов указывать только не прямые, а для параметров давать не абсолютные значения, а их отношения между собой. Эти величины (углы и отношения) называются геометрическими константами (элементами) кристалла. Они могут быть вычислены из рентгенометрических данных по приведенным ниже формулам. Эти же константы могут быть определены и из результатов гониометрии кристалла.

В кубической сингонии углы между всеми осями прямые; отношение параметров  $a_0 : b_0 : c_0 = 1 : 1 : 1$ ; геометрические константы не приводятся.

В тетрагональной сингонии углы между всеми осями прямые; параметры  $a_0 = b_0 \neq c_0$ ; геометрические константы:  $a_0 : c_0 = 1 : \frac{c_0}{a_0}$ ; например, для халькопирита  $a_0 = 5,25$ ;  $c_0 = 10,32 \text{ \AA}$ ;  $a_0 : c_0 = 1 : 1,966$ .

В ромбической сингонии углы между всеми осями прямые; все параметры неравные; геометрические константы:  $a_0 : b_0 : c_0 = \frac{a_0}{b_0} : 1 : \frac{c_0}{b_0}$ . Например, для лаутита:  $a_0 = 3,79$ ;  $b_0 = 5,48$ ;  $c_0 = 11,49 \text{ \AA}$ ;  $a_0 : b_0 : c_0 = 0,691 : 1 : 2,097$ .

В моноклинной сингонии угол между осью  $a$  и осью  $c$  — непрямым (обозначим его  $\beta$ ); параметры  $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ ; геометрические константы:  $\beta$ ;  $a_0 : b_0 : c_0 = \frac{a_0}{b_0} : 1 : \frac{c_0}{b_0}$ . Например, для буланжерита:  $a_0 = 21,54$ ;  $b_0 = 23,51$ ;  $c_0 = 8,09 \text{ \AA}$ ;  $\beta = 100^\circ 48'$ ;  $a_0 : b_0 : c_0 = 0,9166 : 1 : 0,3475$ .

В триклинной сингонии углы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  между всеми осями — непрямы (в частном случае, один угол прямой); все параметры неравные; геометрические константы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ;  $a_0 : b_0 : c_0 = \frac{a_0}{b_0} : 1 : \frac{c_0}{b_0}$ .

В гексагональной сингонии углы между осями во всех минералах равнозначны; параметры  $a_0 = b_0 \neq c_0$ ; геометрические константы:  $a_0 : c_0 = 1 : \frac{c_0}{a_0}$ ; например, для молибденита  $a_0 = 3,16$ ;  $c_0 = 12,32 \text{ \AA}$ ;  $a_0 : c_0 = 1 : 3,899$ .

В тригональной сингонии первая установка аналогична установке в гексагональной сингонии; при второй установке даются две геометрические константы: угол  $\alpha$  между осями и параметр  $a_0$ ; например, для киновари: в первой установке  $a_0 = 4,146$ ;  $c_0 = 9,497 \text{ \AA}$ ;  $a_0 : c_0 = 1 : 2,2906$ ; во второй установке  $a_0 = 3,969 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 62^\circ 58'$  (это и есть константы).

### Кристаллографические проекции

В практике гониометрических работ обычно широко используется стереографическая проекция кристаллов. Она легко строится по координатам  $\varphi$  и  $\rho$  при помощи

сетки Вульфа (прил. 2). Гномоническая проекция используется реже, но и она нужна для вычисления и черчения кристалла\*.

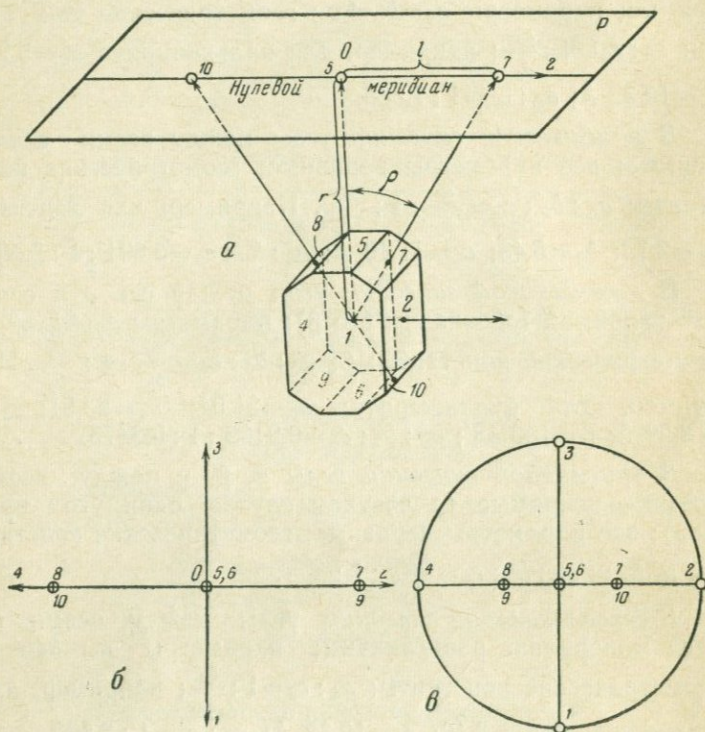


Рис. 4. Гномоническая проекция:

*а* — принцип построения гномонической проекции; *б* — гномоническая проекция кристалла с позиции *а*; *в* — стереографическая проекция того же кристалла.

Рис. 4 иллюстрирует принцип построения гномонической проекции: плоскость проекции горизонтальна и расположена над кристаллом на расстоянии  $r$  от его центра. Обычно  $r$  принимают за 50 мм. Из центра кри-

\* В данной книге не рассмотрена важная для гониометрии кристаллов стереографическая проекция в связи с наличием в отечественной литературе специальных руководств (Разумовский, 1928; Аншелес, 1959; Шафрановский и Попов, 1965). — Прим. ред.

сталла проведена нормаль к плоскости проекции. Точка  $O$ , где нормаль пересеклась с плоскостью, называется центром гномонической проекции. Проекция горизонтальных и наклонных граней будут изображаться в виде точек. Для каждой грани эта точка является точкой пересечения нормали грани с плоскостью проекций. Чем сильнее наклон грани, тем дальше от центра расположится ее проекция. Вертикальные грани проектируются в бесконечности и их положение указывается на гномонической проекции в виде стрелок. Направление стрелок отвечает ориентировке нормали к данной вертикальной грани.

Расстояние  $l$  (мм), на котором находится проекция грани от точки  $O$ , вычисляется по формуле:  $l = 50 \operatorname{tg} \rho$  ( $\rho$  — полярное расстояние грани).

Общие правила построения гномонической проекции:

1) на листе бумаги произвольно ставят центр проекции  $O$ ;

2) через центр  $O$  проводят линию нулевого меридиана;

3) проекции горизонтальных граней совпадут с точкой  $O$  (грани 5 и 6 на рис. 4);

4) для проектирования верхней наклонной грани проводят через центр  $O$  луч под углом  $\varphi$  грани к нулевому меридиану; от центра  $O$  на расстоянии  $l$  откладывают точку — проекцию грани (грани 7, 8 на рис. 4).

5) для проектирования нижней наклонной грани проводят через центр  $O$  луч под углом  $\varphi$  грани к нулевому меридиану. Луч продолжают в противоположную сторону от центра  $O$ ; откладывают на нем точку на расстоянии  $l$  — проекцию грани, при этом выявляется особое свойство гномонической проекции: точки для нижних наклонных граней лежат с противоположной стороны от центра  $O$  по сравнению с их реальным положением (грани 9, 10 на рис. 4);

6) для проектирования вертикальных граней проводят через центр  $O$  стрелку под углом  $\varphi$  грани к нулевому меридиану (лучи 1, 2, 3, 4 на рис. 4).

## ТИПЫ ГОНИОМЕТРОВ

## Двукружные отражательные гониометры

Двукружные отражательные гониометры служат для определения сферических координат граней кристаллов. Принципиальная схема устройства гониометров одинакова (рис. 5), хотя имеется ряд конструктивных вариан-

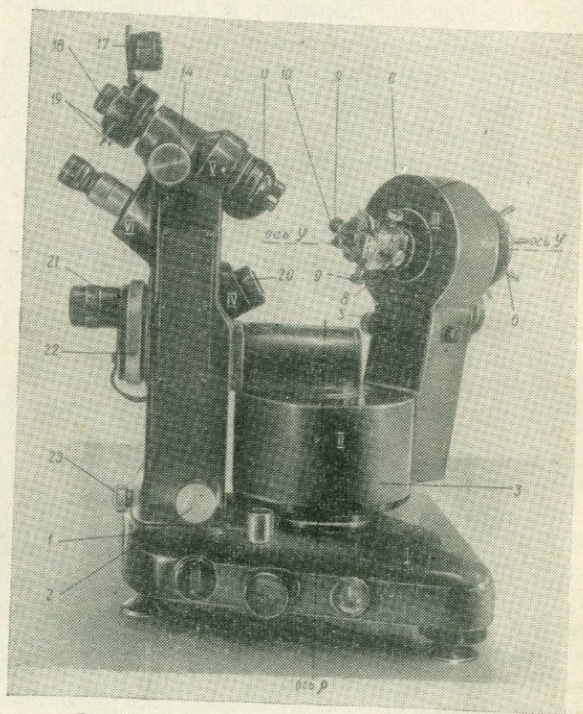


Рис. 5. Гониометр ГД-1:

I—VI — узлы; 1—23 — детали узлов.

тов (гониометры Е. С. Федорова, С. Чапского, Е. Е. Флинта, ГД-1, ZRG-3). На них при помощи специального устройства — гониометрической головки III — укрепляется кристалл. На него из осветителя IV падает луч света, который при отражении от кристалла может

попасть в зрительную трубу V. Это произойдет в том случае, если одна из граней кристалла окажется в роли зеркала, симметрично расположенного по отношению к осветителю и зрительной трубе. Гониометр устроен так, что кристалл можно свободно вращать вокруг горизонтальной и вертикальной осей, придавая кристаллу любое положение в пространстве. Поэтому оказывается возможным привести любую грань в положение отблеска. На специальных лимбах для грани в таком положении снимаются отсчеты углов, которые и являются сферическими координатами.

В большинстве гониометров ось вращения для определения долгот граней  $\varphi$  располагается горизонтально (далее обозначается как ось  $\varphi$ ). На этой оси укрепляется в гониометрической головке кристалл. Ось вращения для определения углов  $\rho$  располагается вертикально (далее обозначается как ось  $\rho$ ). Кристалл при этом располагается на гониометре своей вертикальной осью  $c$  горизонтально.

Гониометр признается исправным и пригодным для работы при соблюдении следующих основных требований:

- 1) оси  $\varphi$  и  $\rho$  пересекаются и взаимно перпендикулярны;
- 2) биссектриса угла зрительная труба — осветитель и ось  $\varphi$  лежат в одной плоскости;
- 3) в гониометрах Гольдшмидта, Федорова, Флинта плоскость, в которой лежат оптические оси зрительной трубы и осветителя и ось  $\varphi$ , должна быть перпендикулярна оси  $\rho$ .

В гониометрах ГД-1, ZRG-3 ось  $\rho$ , оптическая ось осветителя и оптическая ось зрительной трубы должны лежать в одной вертикально ориентированной плоскости;

4) ось  $\varphi$ , ось  $\rho$ , оптическая ось осветителя и оптическая ось зрительной трубы пересекаются в одной точке; центр креста нитей зрительной трубы проектируется на эту точку;

5) оптическая система зрительной трубы и осветителя установлены на бесконечность.

Проверка и юстировка гониометра являются важным и достаточно сложным делом (Бонштедт, 1934; Болдырев, 1949; Флинт, 1956; Нардов, 1958).

Наиболее распространенными приборами являются гониометр ГД-1 (см. рис. 5) и гониометр конструкции В. Гольдшмидта (рис. 6). Они предназначены для измерения сферических координат граней кристаллов и могут быть использованы при подготовке кристаллов к

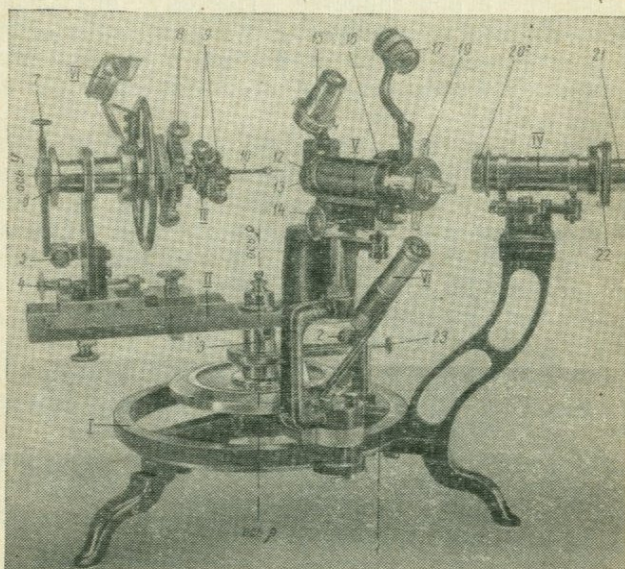


Рис. 6. Гониометр Гольдшмидта:  
I—VI — узлы; 1—23 — детали узлов.

рентгеновскому исследованию (придания им необходимой ориентации). Достоинствами гониометра ГД-1 являются компактность, удобное расположение деталей, удачно сконструированная осветительная система и наличие отсчетного микроскопа для одновременного замера углов  $\varphi$  и  $\rho$ . Оптимальный размер кристаллов для измерения составляет 1—3 мм. К гониометру ГД-1 по своим техническим данным близок гониометр ZRG-3 (рис. 7), выпускаемый в настоящее время в ГДР предприятием VEB Freiburger Präzisionsmechanik.

Гониометр системы Гольдшмидта является весьма совершенным и точным прибором с отличной оптической системой и техническими данными. На гониометре мож-

но измерять кристаллы размером от 0,1 (и даже 0,05) мм до 3 см.

Гониометры ГД-1, Гольдшмидта, ZRG-3 состоят из следующих основных узлов: I — подставки с вертикально вмонтированной в нее осью  $\rho$ ; II — узла горизонталь-

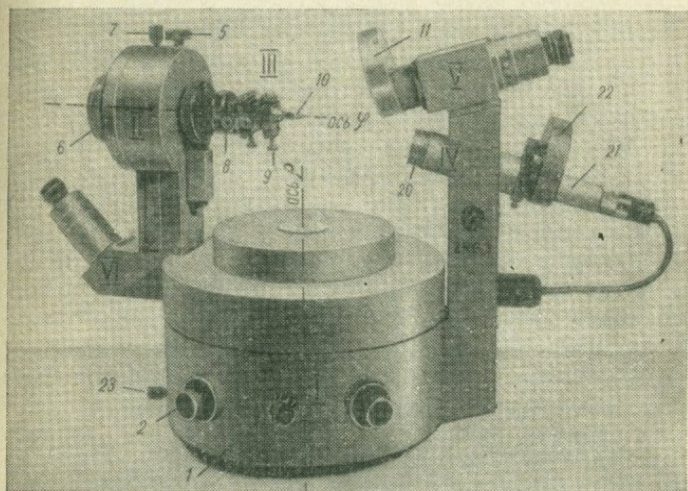


Рис. 7. Гониометр ZRG-3:  
I—VI — узлы; 1—23 — детали узлов.

но ориентированной оси  $\varphi$  (узел свободно вращается на подставке вокруг оси  $\rho$ ); III — гониометрической головки; IV — осветительной трубы (коллиматора); V — зрительной трубы; VI — отсчетного микроскопа (в гониометре Гольдшмидта их два).

*Детали подставки:* станина 1 (в ней неподвижно закреплена ось  $\rho$ ), вокруг которой свободно вращается узел оси  $\varphi$ ; стопорный винт 23 для закрепления оси  $\rho$ ; микрометрический винт 2 оси  $\rho$ .

*Детали узла оси  $\varphi$ :* втулка 3, свободно вращающаяся вокруг оси  $\rho$ ; штурвал (колесо) 6 для вращения кристалла вокруг оси  $\varphi$ ; стопорный винт 7 для закрепления оси  $\varphi$  (на рис. 5 не виден); микрометрический винт 5 оси  $\varphi$ .

*Детали гониометрической головки:* съемный кристаллоносец 10 (на нем укреплен кристалл); юстировочные

винты 9 для наклона — «качания» (нужной ориентировки) кристалла в пространстве; центрировочные винты 8, дающие возможность перемещать кристалл параллельно самому себе.

Вся гониометрическая головка может поступательно перемещаться вдоль оси  $\phi$  вперед и назад с помощью специального винта 4 (на рис. 5 не виден).

*Детали осветительной трубы (коллиматора):* трубка 21 (в гониометрах ГД-1, ZRG-3 в нее вмонтирована лампочка для освещения кристалла; на гониометре Гольдшмидта к ней подносится осветительное устройство); вращающийся барабан 22 с диафрагмами, дающими возможность получать от грани сигнал разной формы (большой и малый крест, точечные сигналы, горизонтальный и вертикальный полукресты и т. п.); объектив 20 коллиматора (на приборе ГД-1 для получения более яркого освещения на объектив может одеваться добавочная линза, входящая в комплекс прибора).

*Детали зрительной трубы:* винт 14 для фокусировки зрительной трубы; шторки 19 для изменения величины поля зрения; поворотный барабан 11 (на гониометре ГД-1) с объективами, размеченными индексами  $T$ ,  $4^*$ ,  $17^*$ ,  $25^*$ ,  $46^*$ ; для введения подвижного объектива в оптическую систему зрительной трубы индекс объектива на барабане следует совместить с риской на тубусе; откидной, вертикальный окуляр 17; откидной «горизонтальный» окуляр 18 (на ГД-1); неподвижный объектив 13 (на гониометре Гольдшмидта); откидные объективы 12, 15 (на гониометре Гольдшмидта); откидная линза 16 (на гониометре Гольдшмидта).

Набор разных окуляров, объективов и линз дает возможность: 1) рассматривать кристалл и получать отблески от граней при разных увеличениях (зрительная труба работает по системе микроскопа); 2) принимать сигналы от граней при разных увеличениях (зрительная труба работает по телескопической системе). Установка линз и объективов для разного режима работы показана в табл. 1.

Работа на гониометрах ГД-1, Гольдшмидта и др. должна производиться в затемненном помещении, так как световые сигналы и отблески от граней кристалла слабы.

Таблица 1

Увеличение зрительной трубы гониометров Гольдшмидта и ГД-1

Оптическая система	Гониометр Гольдшмидта		Гониометр ГД-1		
	Установлены окуляры и объективы (цифры отмечают номерам на рис. 6)	Увеличение	Установлен окуляр	На барабане установлен индекс	Увеличение
«Микроскоп» для наблюдения кристаллов и отблесков от граней	12+13+17	12	Вертикальный	17*	17
	15+13+	20	Вертикальный	25*	24,6
	+16+17				
	15+13+17	30	Горизонтальный	17*	31,6
«Телескоп» для получения сигналов от граней			Горизонтальный	46*	46
	13+17	10	Без окуляров	4*	4,3
	15+13+17	15	Вертикальный	T	5,4
			Горизонтальный	T	10,1
			Без окуляров	17*	1

При работе на гониометрах рекомендуется вращать оси  $\varphi$  и  $\rho$  в одну сторону (напр., по часовой стрелке).

### Определение места нуля двукружного гониометра

Рассмотрим подготовку к работе полностью исправного и отъюстированного прибора — определение места нуля. Место нуля на двукружных гониометрах определяется по оси  $\rho$ ; место нуля по оси  $\varphi$  не определяется, так как все измеренные координаты  $\varphi$  для разных граней приводятся к нулевому меридиану расчетом.

Выполнение данной операции производится в определенной последовательности.

1. На гониометрической головке вместо кристалла укрепляют юстировочное входящее в комплект прибора зеркало. Последнее поворачивают в обойме так, чтобы его плоскость была перпендикулярна оси  $\varphi$ .

2. Приводят ось  $\varphi$  и биссектрису угла между осветителем и зрительной трубой во взаимно перпендикулярное положение. Для этого поворачивают узел оси  $\varphi$  вокруг вертикальной оси гониометра. После такого поворота зеркало видно через зрительную трубу сбоку.

3. Устанавливают зрительную трубу по системе «Микроскоп».

4. Винтом поступательного движения передвигают гониометрическую головку вперед или назад вдоль оси

$\varphi$  и совмещают зеркало с центром креста нитей в зрительной трубе.

5. Центрировочными винтами совмещают центр зеркала с осью  $\varphi$ . Для этого сначала вращением вокруг оси  $\varphi$  ставят любой из винтов вертикально. Работая этим винтом, совмещают центр зеркала с горизонтальной нитью креста. Поворачивают головку гониометра вокруг оси  $\varphi$  примерно на  $90^\circ$ . При этом зеркало смещается с горизонтальной нити креста. Возвращают его на эту нить тем центрировочным винтом, который принял вертикальное положение. Вновь поворачивают гониометрическую головку на  $90^\circ$ . Затем опять выводят зеркало на горизонтальную нить вертикальным центрировочным винтом. Эти операции повторяются до полной центровки зеркала.

6. Поворачивают агрегат оси  $\varphi$  так, чтобы зеркальце стало примерно перпендикулярно биссектрисе угла между осветителем и зрительной трубой. Этим юстировочное зеркало приведено приблизительно в такое положение, в котором оно может отражать лучи из осветителя в зрительную трубу.

После выполнения этой операции может оказаться, что плоскость зеркала ушла из фокуса или вышла за пределы поля зрения влево или вправо. Это свидетельствует о неисправности прибора.

7. Выполняют юстировку, используя отблеск от зеркала, но сначала вращением гониометрической головки вокруг оси  $\varphi$  ставят один из юстировочных винтов перпендикулярно биссектрисе угла между осветителем и зрительной трубой (в гониометрах всех систем этот винт по отношению к кресту нитей является горизонтальным). Зеркало при этом может блестеть слабо или совсем потускнеть. Его надо развернуть на какой-то угол до положения максимального отблеска. Половину расстояния до максимального отблеска выбирают горизонтальным юстировочным винтом. Половину расстояния выбирают перемещением всего узла оси  $\varphi$  вокруг вертикальной оси гониометра.

Вращением гониометрической головки вокруг оси  $\varphi$  ставят следующий юстировочный винт горизонтально. Зеркало после этого поворота опять может не блестеть. Вновь выводят зеркало в положение максимального отблеска. Для этого половину расстояния выбирают гори-

зонтальным юстировочным винтом, половину — вращением всего узла оси  $\varphi$  вокруг вертикальной оси гониометра.

Повторяют все эти операции до момента, когда зеркало начнет постоянно блестеть при полном обороте гониометрической головки вокруг оси  $\varphi$ .

8. Переводят зрительную трубу на телескопическую систему для получения сигнала от зеркала.

9. Выполняют точную юстировку по сигналу от зеркала аналогично тому, как это делалось по отблеску. Юстировка выполнена, когда сигнал остается на перекрещивании нитей при полном повороте гониометрической головки вокруг оси  $\varphi$  на  $360^\circ$ .

10. Снимают и записывают отсчет на лимбе оси  $\rho$ . Он отвечает положению места нуля по оси  $\rho$ . Численное значение места нуля различно на приборах разной конструкции. На гониометрах типа ГД-1 оно должно составлять  $0^\circ$ . На гониометрах Гольдшмидта оно произвольно.

При юстировании может оказаться, что после многократных попыток точно отъюстировать зеркало сигнал либо описывает в поле зрения окружность с центром на перекрещивании нитей зрительной трубы, либо, оставаясь неподвижным при вращении гониометрической головки вокруг оси  $\varphi$ , смещен с креста нитей. И то и другое указывает на неисправность гониометра.

### Специальные типы гониометров

Двукружные отражательные гониометры являются наиболее совершенными приборами для измерения кристаллов. Однако в практике минералогических исследований иногда приходится использовать гониометры других типов (Флинт, 1949). Однокружные отражательные гониометры находят применение для рефрактометрии иммерсионных жидкостей, измерения показателей преломления кристаллов и т. д.

Для решения некоторых минералогических задач применяются фотогониометры, впервые предложенные в 1925 г. Рёшем, а затем усовершенствованные (Мокиевский, Шафрановский, 1955; Флинт, 1949). Они дают возможность проводить точные и детальные исследования особенностей тонкой скульптуры граней кристаллов.

## ИЗМЕРЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ НА ГОНИОМЕТРЕ

## Задачи и ход исследования

В зависимости от целей выполняемой работы и степени изученности вещества (минерала) задачи измерения его кристаллов могут быть различными. В соответствии с этим объем и ход гониометрического исследования кристаллов должны быть разными. Но наиболее часто при выполнении этих задач осуществляются следующие операции: 1) первое измерение кристаллов новых и известных минералов и искусственных веществ; 2) установление и изучение новых форм роста на кристаллах; 3) диагностика минералов и искусственных веществ; 4) получение характеристики морфологических особенностей кристаллов определенного месторождения.

Первое измерение кристаллов является наиболее сложной задачей. Как обычно, оно начинается с визуального изучения особенностей морфологии кристаллов, их внешней симметрии и схематического изображения кристаллов на бумаге. Желательно кристаллам на рисунках придавать стандартную ориентировку.

Далее следует измерение кристаллов на гониометре и обработка результатов этого измерения. После этого по данным стереографической или гномонической проекции выполняются чертежи кристалла.

Установление и изучение новых форм роста на кристаллах является частью первой задачи. Сначала кристаллы изучаются визуально и эти данные сопоставляются с кристаллографическими справочниками (Goldschmidt, 1897; Goldschmidt, 1913—1923; Croth, 1906—1919; Niggli, 1932; Dana, 1892; Дэна, 1951—1954; «Минералы», 1960).

После визуального изучения кристаллы укрепляются на гониометре, и производится их частичное измерение. Затем обычным путем вычисляют символы новых граней и их теоретические сферические координаты.

Диагностика минералов и искусственных веществ по их кристаллам, методы которой были впервые предложены и разработаны Е. С. Федоровым в ряде работ (Fedorow, 1926), в настоящее время носит вспомогательный характер. Для

диагностики вещества по его форме обычно используются более простые методы А. К. Болдырева и др. (1937—1939) и В. Т. Баркера (Porter, 1951—1963).

Метод А. К. Болдырева (Болдырев, Доливо-Добровольский, 1937—1939) обеспечивает простую и однозначную диагностику кристаллического вещества. Их работа «Определитель кристаллов» составлена для средней категории сингоний. Все кристаллы разбиты по сингониям. К каждой сингонии составлен ключ. В нем кристаллы выстроены в порядке возрастания угла  $\rho$  основных габитусных граней. Каждый кристалл вставлен в ключ несколько раз по величине  $\rho$  разных граней.

Метод Т. В. Баркера положен в основу 7-томного «Определителя», составленного его учениками (Porter, 1951). «Баркерский индекс» является полной сводкой по морфологии кристаллов. Сущностью метода являются придание измеренным кристаллам однозначной установки и поиск вещества в «Определителе» по величине углов между гранями.

Получение характеристики морфологических особенностей кристаллов определенного месторождения обычно выполняется с целью выяснения механизма и условий роста кристаллов. Ценные практические советы по методике таких кристалломорфологических исследований даны И. И. Шафрановским (1957). Работа ведется в следующем порядке:

а) предварительное изучение кристаллов (размер, морфологические типы), выделение материала для дальнейшего изучения);

б) гониометрическое изучение;

в) описание облика кристаллов, по возможности сопровождаемое статистическими данными по соотношению высоты, длины, ширины кристаллов в каждом их морфологическом типе (Доливо-Добровольский, 1933);

г) установление габитуса кристаллов по преобладающим на них простым формам со статистическим учетом частоты встречаемости и размеров (площадей) граней разных простых форм (Франк-Каменецкий, 1952);

д) черчение кристаллов с учетом их реальных морфологических особенностей;

е) исследование внутренней морфологии кристаллов и скульптуры граней и познание эволюции облика кристаллов в процессе их роста;

ж) изучение морфологии поверхности граней; наиболее ценными здесь являются методы фотогониометрии (Мокиевский, Джафаров; 1963), отчасти возможно использование различных приспособлений к федоровскому столику (Вазбуцкий, 1966, 1968).

Все исследования морфологии плоскогранных кристаллов выполняются с помощью обычных гониометров. При изучении кристаллов со сложно скульптурированными поверхностями удобны фотогониометры (Митрофанова, 1955, Нардов, 1956, 1958; Флинт, 1961), хотя они и недостаточно точны в работе.

Заслуживает внимания также принципиально иная методика изучения морфологических особенностей кристаллов не при помощи оптических гониометров, а с использованием дифрактометров и другой рентгеновской аппаратуры (Янулов, Хорошилова, 1966).

### Подбор и подготовка кристаллов для измерения

Для гониометрического измерения наиболее пригодны небольшие (1—3 мм в поперечнике) кристаллы, но годны и кристаллы размером в доли миллиметра. При изучении крупных (3—4 см) кристаллов, если грани их плохо блестят, на них накладывают, предварительно смачивая поверхность граней водой, мелкие осколки покровных стекол. Имеются специальные конструкции гониометров (Гольдшмидта и др.) для измерения еще более крупных кристаллов.

Подлежащие исследованию кристаллы должны быть хорошо отмыты (водой, спиртом, иногда кислотой). После этого их просматривают под биноклем и отбирают пригодные для изучения на гониометре. При наличии кристаллов разного облика целесообразно отбирать для измерения отдельно каждый морфологический тип. Следует измерять серию кристаллов каждого типа (4—5, а в отдельных случаях и 10—15 шт.). Наиболее характерные для каждого типа кристаллы следует схематически зарисовывать, по возможности учитывая реальные размеры граней. Рисунки даются в плане, в проекции «сбоку» и «спереди»; все грани размечаются порядковыми номерами (рис. 8).

Предназначенные для измерения кристаллы крепятся на кристаллоносец, представляющий металлический или деревянный стержень. Стержень вставляется в отверстие

гонометрической головки, а на другом его конце или площадке укрепляется (при помощи воска, пластилина, клея) кристалл. Удобно укреплять мелкие кристаллы на остро отточенных спичках при помощи сахарного сиропа.

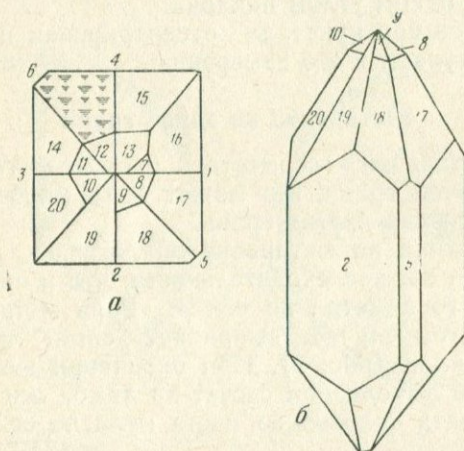


Рис. 8. Зарисовка кристалла № 1 кальцита:  
 а — в плане; б — сбоку; 1—20 — номера граней.

Мелкие кристаллы удобно приклеивать (клей типа БФ-2) к тонким стеклянным нитям под бинокулярным микроскопом. Для этого каплю клея помещают на предметное стекло, в нее «макают» кончик стеклянного волоска и затем подносят к кристаллу. Неудачно приклеенный кристалл легко отделяется от волоска в капле спирта. Стеклянная нить с кристаллом посредством воска или пластилина прикрепляется к кристаллоносцу.

При укреплении кристаллов на кристаллоносцах по возможности следует учитывать правила их установки в разных сингониях, что значительно упрощает последующую обработку результатов измерения и не требует пересчета координат граней\*.

После укрепления кристалла на гониометре его центрируют (как зеркало). После этого юстируют — совме-

\* Если вначале этого достичь не удастся, следует измерить пробный кристалл, построив проекцию, установить его сингонию и тогда придать всей серии стандартную установку. — *Прим. ред.*

щают избранное направление в кристалле (ось  $c$ , нормаль к грани и т. п.) с осью  $\varphi$  гониометра.

Юстировка кристаллов в зависимости от их габиту-са производится: по одной грани, по граням одной зоны, по граням с одним углом наклона.

После того как кристалл отцентрирован и отъюстирован, приступают к его измерению.

### Юстировка по одной грани

Цель юстировки — совместить с осью  $\varphi$  гониометра нормаль к этой грани. Ею может быть моноэдр, грань пинакоида, любая другая грань.

Все операции по юстировке аналогичны и выполняются в той же последовательности, что и определение места нуля гониометра по оси  $\rho$ . Роль юстировочного зеркала в этом случае выполняет сама юстируемая грань кристалла (рис. 9). При окончании юстирования и точном его выполнении отсчет на лимбе оси  $\rho$  должен соответствовать положению места нуля по оси  $\rho$  гониометра.

Завершив юстировку, проверяют центрировку кристалла.

### Юстировка по граням одной зоны

Зоной (или поясом) называется совокупность граней кристалла, параллельных одной и той же прямой. Эта прямая называется осью зоны. Например, грани призм  $(010)$  и  $(110)$  в тетрагональной сингонии также относятся к одной зоне и обозначаются символом этой зоны —  $[001]$ .

Цель юстирования — совместить ось зоны с осью  $\varphi$  гониометра. При этом все грани этой зоны будут параллельны оси  $\varphi$  гониометра. Представим себе удлиненный вдоль оси  $c$  кристалл ромбической сингонии, образованный комбинацией граней пинакоидов  $(100)$ ,  $(010)$ , призмы  $(hk0)$  и серией каких-либо косых граней. Грани  $(100)$ ,  $(010)$  и  $(hk0)$  принадлежат к одной зоне; осью ее является ось  $c$  —  $[001]$ . Юстируя кристалл по граням этой зоны, совмещают с осью  $\varphi$  гониометра ось  $c$  кристалла, т. е. ориентируют его в стандартной установке. Эта задача решается также с помощью ряда операций, выполняемых в определенной последовательности.

1. Поворачивают кристаллоносец в отверстии гониометрической головки так, чтобы одна из граней юстируемой зоны оказалась перпендикулярной одному из юстировочных винтов гониометрической головки.

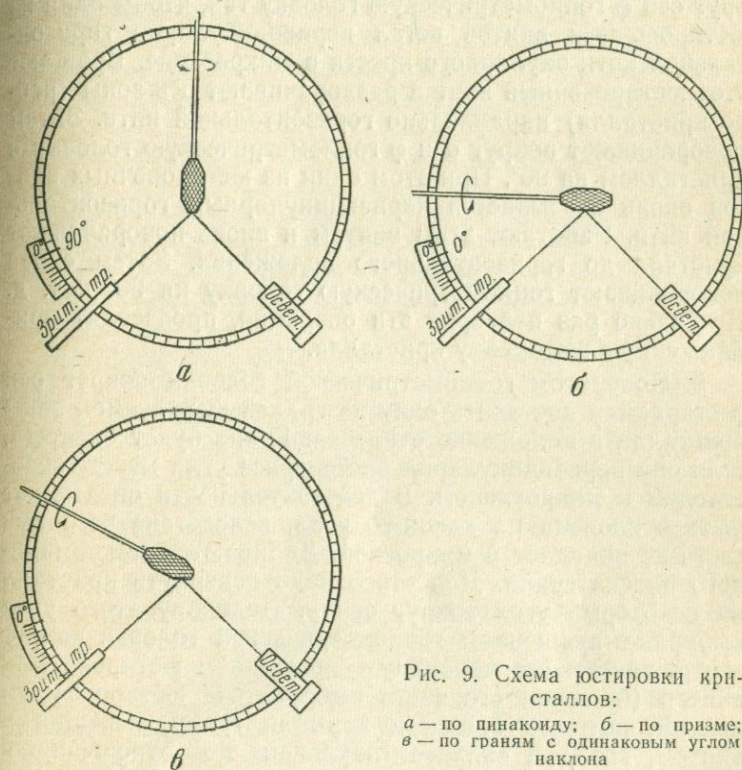


Рис. 9. Схема юстировки кристаллов:

*a* — по пинаконду; *б* — по призме; *в* — по граням с одинаковым углом наклона

2. Центрируют кристалл.

3. Поворачивают гониометрическую головку так, чтобы ось  $\phi$  гониометра стала перпендикулярна биссектрисе угла между осветителем и зрительной трубой (см. рис. 9). Наблюдают через микроскоп кристалл и вращают его вокруг оси  $\phi$ . Если кристалл отъюстирован, то все грани юстируемой зоны должны пройти через положение максимального блеска. Отсутствие этого явления означает, что ось зоны не совпадает с осью вращения

кристалла. Выполняя следующие операции, можно достичь полного совпадения этих двух направлений.

4. Проводят приближенное юстирование «на глаз», наблюдая за кристаллом через микроскоп при минимальном его увеличении. Для этого поворачивают вокруг оси  $\phi$  гониометрическую головку так, чтобы один из юстировочных винтов встал перпендикулярно горизонтальной нити окулярного креста в микроскопе. Вращают этот юстировочный винт и разворачивают ось зоны (ребро кристалла) параллельно горизонтальной нити. Затем поворачивают вокруг оси  $\phi$  гониометрическую головку с кристаллом на  $90^\circ$ . При этом один из юстировочных винтов вновь оказывается перпендикулярным горизонтальной нити. Работают этим винтом и вновь поворачивают кристалл до горизонтального положения. Затем снова поворачивают гониометрическую головку на  $90^\circ$  и т. д. Несколько раз повторяя эти операции, производят приближенную юстировку кристалла.

5. Поворотом гониометрической головки вокруг оси  $\phi$  стараются поставить одну из граней юстируемой зоны кристалла в положение отблеска. Грань будет блестеть, если она перпендикулярна биссектрисе угла между осветителем и микроскопом. В действительности она может быть отклонена на какой-то угол, вследствие чего луч света не попадает в микроскоп. Добиваются максимального блеска грани. Для этого надо повернуть кристалл на некоторый угол вокруг оси  $\rho$ . Половину этого угла выбирают вращением гониометрической головки вокруг оси  $\rho$ , другую его половину — вращением юстировочных винтов (большая его часть выбирается юстировочным винтом, который ближе к нормали грани, меньшая — винтом, который сильнее наклонен по отношению к грани).

6. После этого поворотом гониометрической головки вокруг оси  $\phi$  стараются поставить следующую грань зоны в положение отблеска. Повторяя операции пункта 5, приводят грань на максимальный отблеск. Затем доводят до положения отблеска все остальные грани зоны и на этом заканчивают грубую юстировку кристалла.

7. После этого приступают к точной юстировке кристалла, для чего переводят зрительную трубу на телескопическую систему для наблюдения не отблесков, а сигналов от граней (крест, полукрест, точка).

Поворотом гониометрической головки вокруг оси  $\varphi$  приводят сигнал от какой-либо грани зоны на горизонтальную нить зрительной трубы. При этом сигнал может оказаться смещенным от центра окулярного креста влево или вправо, иногда же он может оказаться вне поля зрения. Переводят сигнал вдоль горизонтальной нити в центр креста. Для этого половину расстояния выбирают вращением гониометрической головки вокруг оси  $\rho$  (рукой или микрометренным винтом), а другую его половину — юстировочными винтами (большую часть тем винтом, который меньше наклонен по отношению к грани).

8. Поворачивают кристалл на гониометрической головке вокруг оси  $\varphi$ , последовательно повторяя операции пункта 7 для всех граней юстируемой зоны до момента установления точного прохождения сигналов от них через крест нитей.

Очевидно, что достаточно отъюстировать три любые грани одной зоны, чтобы осуществить юстировку. Е. Е. Флинт рекомендует выбрать 3 грани одной зоны, крайние из которых образуют угол не более  $90^\circ$ , расположить средний сигнал наиболее близко к вертикальной нити, а другие — один левее, другой правее. Поочередно приближают к вертикальной нити то левый, то правый сигнал, действуя для каждого сигнала разными юстировочными винтами. При этом «выправляется» и средний сигнал (если он не лежал на вертикальной нити). Добиваются наиболее точного совмещения с вертикальной нитью этих трех сигналов, после чего, поворачивая кристалл на  $360^\circ$ , проверяют все грани зоны и, если надо, уточняют юстировку. После этого ось юстируемой зоны точно совпадает с осью  $\varphi$  гониометра.

Юстировка идеально развитого кристалла заканчивается, когда при его полном обороте вокруг оси  $\varphi$  отблески от всех граней проходят по вертикальной нити креста зрительной трубы. Юстировку нельзя заканчивать, пока сигналы от двух параллельных друг другу граней проходят через центр креста, а остальные проходят слева и справа. В реальных кристаллах некоторые грани могут быть несколько смещены относительно их идеального положения. Поэтому даже при идеальной юстировке сигналы от некоторых граней иногда отклоняются в сторону.

После завершения юстировки уточняют центровку кристалла.

В исключительных случаях приходится юстировать кристалл только по двум параллельным граням (например, по граням пинакоида). Все операции производятся так же и в той же последовательности. Юстирование заканчивается, если при вращении кристалла вокруг оси  $\varphi$  сигнал от обеих граней ходит точно по вертикальной нити. В этом случае с осью вращения, т. е. с осью  $\varphi$ , совмещена плоскость симметрии между юстируемыми гранями.

### Юстировка по граням с одинаковым углом наклона

Рассматривается случай, когда на изучаемых кристаллах отсутствуют или плохо блестят грани призматического пояса, а пинакоид (001) не развит или не дает хорошего сигнала. В этом случае, как обычно, необходимо совместить с осью  $\varphi$  гониометра ось  $c$  кристалла. Для юстировки используют равнонаклонные грани (не менее 3) одной простой формы: трапецеэдра, скаленоэдра, ромбоэдра, пирамиды, дипирамиды. Приблизительно (на глаз) или по справочнику оценивают угол наклона  $\rho$  граней, избранных для юстировки кристалла. Пусть это будут грани тетрагональной дипирамиды с углом  $\rho$  (приблизительно или точно) равным  $\alpha^0$ .

Мысленно развернем гониометрическую головку с кристаллом вокруг оси  $\rho$  так, чтобы лимб оси  $\rho$  установился на отсчете  $\alpha^0$  (см. рис. 9). Теперь, если вращать гониометрическую головку с кристаллом вокруг оси  $\varphi$ , 4 верхние грани дипирамиды должны пройти через положение отблеска. Но этого может и не быть. Цель юстировки — придать кристаллу такое положение, чтобы при вращении вокруг оси  $\varphi$  через крест нитей окуляра проходили сигналы от всех этих граней. В этом случае с осью  $\varphi$  гониометра совпадает ось  $c$  кристалла.

Юстировка также выполняется в определенной последовательности.

1. Центрируют кристалл.

2. Выполняют приблизительную юстировку кристалла: глядя на него через микроскоп и работая юстировочными винтами, ориентируют кристалл примерно параллельно оси  $\varphi$ . Например, при развитии на кристалле граней тетрагональной дипирамиды, стараются грубо

совместить четверную ось симметрии с осью  $\phi$  гониометра.

3. Уточняют юстировку. Для этого, вращая гониометрическую головку вокруг оси  $\phi$ , ставят в положение отблеска одну из граней дипирамиды. Грань блестит, если ее нормаль совпадает с биссектрисой угла между осветителем и микроскопом (см. рис. 9). Поворачивают гониометрическую головку вокруг оси  $\phi$  до второй грани; она может отклониться от биссектрисы на какой-то угол (блестит слабо или вовсе не блестит). Ставят грань в положение отблеска: часть отклонения выбирают вращением гониометрической головки вокруг оси  $\rho$ , другую часть выбирают юстировочными винтами.

4. Вращая гониометрическую головку вокруг оси  $\phi$ , последовательно стараются поставить в положение отблеска все грани дипирамиды и обычными действиями каждую грань выводят на максимальный отблеск. В результате при вращении кристалла вокруг оси  $\phi$  все грани должны проходить через положение отблеска. На этом заканчивается грубая юстировка.

5. Ставят зрительную трубу на телескопическую систему для наблюдения сигналов от граней. Вращением гониометрической головки вокруг оси  $\phi$  ставят сигнал от одной из граней пирамиды на горизонтальную нить креста зрительной трубы. Сигнал может при этом отклониться влево или вправо от центра и даже выйти за пределы поля зрения. Чтобы сигнал попал в центр креста, кристалл надо повернуть на какой-то угол. Для этого половину угла выбирают вращением гониометрической головки вокруг оси  $\rho$  рукой или микрометренным винтом, а половину выбирают юстировочными винтами.

6. Вращением гониометрической головки вокруг оси  $\phi$  ставят сигнал от следующей грани на горизонтальную нить зрительной трубы. Выводят сигнал на центр креста: половину угла выбирают вращением вокруг оси  $\rho$ , а половину — юстировочными винтами.

7. Поворачивая гониометрическую головку вокруг оси  $\phi$ , ставят следующую грань и т. д.

Юстировка идеально развитого кристалла заканчивается, когда при вращении гониометрической головки вокруг оси  $\phi$  сигналы от всех граней проходят точно через центр креста нитей зрительной трубы. Отсчет на

лимбе оси  $\rho$  отвечает  $x^0$ , что соответствует углу  $\rho$  использованных для юстирования наклонных граней.

После окончания юстировки проверяют центрировку кристалла.

### Измерение сферических координат граней

Измерение сферических координат граней начинают с зоны вертикальных граней, параллельных оси  $\phi$  гониометра. Вращением вокруг оси  $\phi$  и  $\rho$  ставят одну из граней в положение отблеска. Переводят зрительную трубу на телескопическую систему и микрометренными винтами осей  $\phi$  и  $\rho$  совмещают сигнал от грани с центром креста нитей. Снимают отсчеты углов  $\phi$  и  $\rho$  и записывают их в журнал наблюдений. От плохих граней отсчеты берутся не по сигналу, а по отблеску — как среднее из нескольких повторных промеров. Вращая кристалл вокруг оси  $\phi$ , берут отсчет углов для всех граней зоны.

Поворачивают гониометрическую головку вокруг оси  $\rho$  приблизительно на  $5^\circ$ , что соответствует углу зрения микроскопа. Вращая гониометрическую головку вокруг оси  $\phi$ , наблюдают за появлением отблесков. Отмечают все появившиеся отблески при повороте кристалла на  $360^\circ$ .

Принимая во внимание предполагаемую симметрию кристаллов, производят повторное наблюдение (поиск) граней в симметричных участках. Если, например, кристалл тригональный, то через  $120$  или  $60^\circ$  от наблюдавшегося отблеска должны быть симметричные грани, первоначально пропущенные из-за их несовершенства, малых размеров и т. п.

После того как все отблески от граней выявлены, снимаются отсчеты для них по сигналу. По окончании фиксации всех встретившихся граней вновь поворачивают гониометрическую головку вокруг оси  $\phi$  примерно на  $5^\circ$  и вновь ищут грани и т. д. Так можно найти все верхние грани. Для измерения нижних граней кристалл следует переклеить.

При измерении кристалла следует пользоваться шторками зрительной трубы, вырезая из поля зрения то место отражающей грани, которое является самым надежным. Одновременно с измерением углов производится изучение характера граней, фигур травления,

формы штриховки или узорчатости на них. Отдельные грани с характерными скульптурными образованиями фотографируются, для чего используется фотонасадка к гониометру.

Результаты гониометрического исследования записываются в дневнике (табл. 2). В нем номера граней от-

Таблица 2

Образец записи в дневнике измерения кристаллов.

Кальцитит, кристалл № 1; юстировка по [001]; место нуля  $\rho = 98^{\circ}50'$

№ грани	Зарисовки	Качество сигнала	$\varphi$	$\rho$	Примечание
1	—	4	$340^{\circ}07'$	$98^{\circ}53'$	—
2	—	1	$69^{\circ}57'$	$98^{\circ}50'$	Сигнал тройной; отсчет по наиболее яркому

вечают номерам на предварительно сделанном рисунке или схеме кристалла: это значительно облегчает обработку результатов измерения и вычерчивание кристалла. Очень важно разметить нижние грани: зрительная труба дает обратное изображение. Поэтому при переклейке кристалла для измерения нижних граней легко ошибиться в оценке их положения относительно верхних.

Качество сигнала от граней оценивается по пятибалльной или десятибалльной шкале визуально. Наиболее яркие, четко ограниченные и недвоящиеся сигналы получают наивысшую оценку: они обеспечивают наиболее точные замеры углов. Для точности измерений важна в первую очередь не яркость сигнала, а резкость и четкость его границ. Для граней с раздвоенными или более сложными сигналами можно записать отсчеты для всех сигналов или пределы «разноса» углов  $\varphi$  и  $\rho$  и замеры для наиболее хорошего сигнала. Замеры положения грани без сигнала (по отблеску) дают очень низкую точность ( $\pm 2-3^{\circ}$ ).

Для проверки отдельных замеров кристаллы следует хранить до полного окончания гониометрического исследования, не снимая их с кристаллоносцев.

## ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ

### Общий порядок работы

Первичные результаты гониометрических исследований должны быть подвергнуты обработке. Ее методика и последовательность показаны на примере кристаллов кальцитита.

Кристаллы кальцитита по визуальному изучению относятся к тетрагональной сингонии, они имеют удлиненно-призматический габитус и образованы комбинацией тетрагональных призм и серией косых граней, вероятно, пирамид и дипирамид (см. рис. 8). Результаты измерения трех кристаллов даны в табл. 3, 5, 6. При измерении кристаллы юстировались по зоне [001] так, что ось  $c$  кристаллов совпадала с осью  $\varphi$  гониометра. Измерялись только верхние головки кристаллов, так как оба окончания кристаллов идентичны по огранке.

Первым этапом является введение поправок в углы  $\rho$  на место нуля гониометра. Все три кристалла юстировались по граням призм. После окончания юстировки на гониометре по оси  $\rho$  стоял отсчет: для первого кристалла  $98^{\circ}50'$ , для второго  $98^{\circ}50'$ , для третьего тоже  $98^{\circ}50'$ . Для всех трех случаев поправка на место нуля  $(-)$  $8^{\circ}50'$ . Исправляют на эту величину измеренные значения углов  $\rho$  и получают цифры столбца 7 в табл. 3, 5, 6.

Далее для каждого кристалла в отдельности по табл. 3, 5, 6 строятся стереографические проекции их граней (рис. 10). Затем для выявления всех граней и простых форм составляют сводную проекцию по всем кристаллам (см. рис. 10). Если проекции нанесены на кальке, их просто накладывают друг на друга и затем совмещают однозначные грани.

Если сингония кристаллов неизвестна, необходимым этапом является определение сингонии кристаллов и вида симметрии по проекции. Для этого с помощью сетки Вульфа по проекциям измеренных граней развиваются зоны (см. рис. 10).

Анализ взаимного расположения реально присутствующих граней и развитых на сетке Вульфа зон дает

возможность определить сингонию кристалла и его ориентировку. После развития некоторого оптимального (в разных случаях различного) числа зон на сетке Вуль-

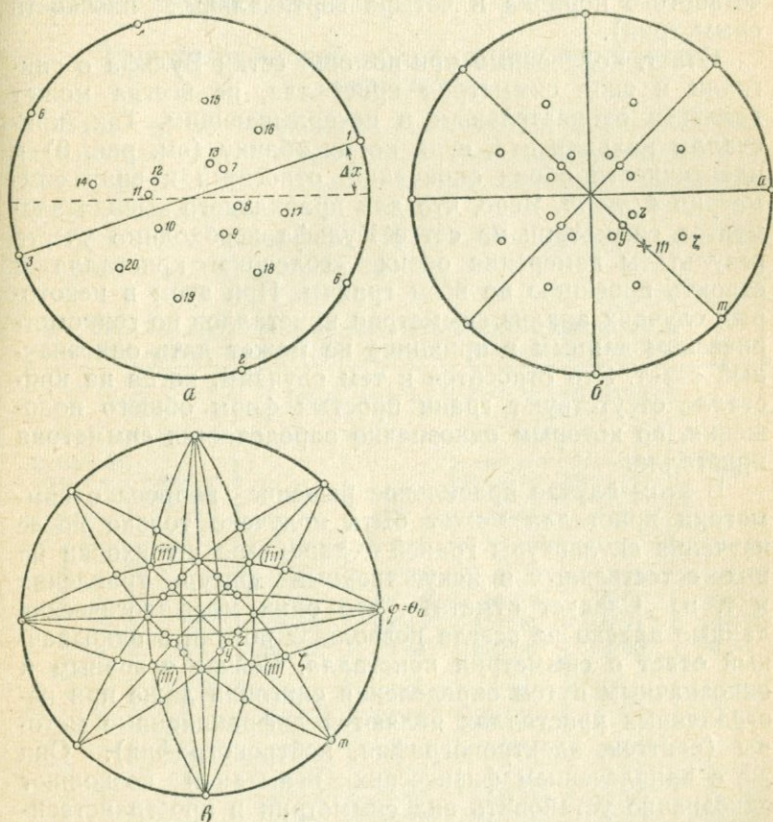


Рис. 10. Стереографические проекции кристаллов кальцитита:  
*a* — кристалл № 1 до поворота; *b* — кристалл № 1 в стандартной установке;  
*v* — сводная проекция по трем кристаллам.

фа выявляется ряд осей, по которым эти зоны пересекаются. Каждая из таких осей пересечения зон потенциально может оказаться осью симметрии. Рассматривают и измеряют углы пересечения зон, стараясь найти периодическое повторение одних и тех же величин — признак оси симметрии. Точно так же, сравнивая взаим-

ное расположение реальных граней и одинаковых углов между зонами, находят положение плоскостей симметрии. На рис. 10 для кристаллов кальцитита так выявляются элементы симметрии вида симметрии  $4mm$  (ось четвертого порядка и четыре вертикальных плоскости симметрии).

Ответ, полученный при помощи сетки Вульфа о сингонии и виде симметрии кристалла, не всегда может являться окончательным и исчерпывающим. Так, кристаллы кальцитита, судя по их облику (см. рис. 8) и идентичности обоих окончаний, относятся к виду симметрии  $4/mmm$ . Ясно, что для правильного вывода элементов симметрии на сетке Вульфа необходимо учесть результаты измерения обеих «головок» кристалла и строить проекцию по всем граням. При этом в некоторых случаях анализ симметрии кристаллов по гониометрическим данным в принципе не может дать однозначный ответ. Это относится к тем случаям, когда на кристалле отсутствуют грани простых форм общего положения, по которым однозначно определяется симметрия кристалла.

В этом случае правильное решение вопроса о симметрии кристалла может быть получено только после изучения скульптуры граней — характера штриховки на них, естественных и искусственных фигур травления и т. п. Следует отметить, что одни морфологические данные далеко не всегда позволяют получить однозначный ответ о симметрии кристалла. Сейчас основным и однозначным путем определения сингонии даже при неограниченных кристаллах являются дифракционные методы (рентген, электронография, нейтронография). Они же с привлечением физических испытаний позволяют однозначно установить вид симметрии и пространственную группу.

Следующий этап — пересчет углов  $\varphi$  по такой системе, которая сделала бы возможным сравнение между собой всех изучаемых кристаллов несмотря на то, что при измерении все они укреплялись на гониометре в произвольном развороте вокруг оси  $\varphi$ . Говоря иначе, на всех кристаллах выбирают один и тот же начальный меридиан для отсчета углов  $\varphi$  и пересчитывают относительно его измеренные углы  $\varphi$ . Существуют разные методы таких расчетов.

Следующий этап — приведение координат к одному сектору стереографической проекции.

Последний этап — получение средних арифметических значений координат  $\varphi$  и  $\rho$ . Они называются координатами сводного кристалла.

### Приведение координат $\varphi$ к одному начальному меридиану

Этот способ основан на выполнении пересчетов раздельно для каждого кристалла. Методика расчетов разработана В. В. Доливо-Добровольским, дополнена О. М. Аншелесом.

Обработка первичных результатов измерения показана в табл. 3 (кристалл № 1).

Таблица 3

Обработка первичных результатов измерения кристалла № 1.  
Юстировка по зоне [001]; место нуля по оси  $\rho$  98°50'

Грани		Измеренные		Углы $\varphi$ (пересчитанные)		$\rho$ исправлен- ное	
Буквенное обозначение и номера	Качество сигнала	$\varphi$	$\rho$	приведенные к нулевому меридиану	приведенные к первому сектору		
a	1	4	340°07'	98°53'	0°13'	0°13'	90°03'
	2	1	69°57'	98°50'	90°03'	0°03'	90°00'
	3	2	159°33'	98°49'	179°39'	0°21'	89°59'
	4	3	250°00'	98°51'	270°06'	0°06'	90°01'
m	5	1	24°42'	98°58'	44°48'	44°48'	90°08'
	6	1	204°59'	98°56'	225°05'	44°55'	90°06'
z	7	5	313°27'	35°10'	333°33'	26°27'	26°20'
	8	1	6°22'	35°15'	26°28'	26°28'	26°25'
	9	2	43°17'	35°08'	63°23'	26°37'	26°18'
	10	3	133°25'	35°30'	153°31'	26°29'	26°40'
	11	1	186°17'	35°27'	206°23'	26°27'	26°37'
y	12	4	204°37'	33°56'	224°43'	44°47'	25°06'
	13	5	294°45'	34°00'	314°51'	44°51'	25°10'
λ	14	1	186°37'	64°53'	206°43'	26°43'	56°03'
	15	2	276°27'	64°59'	296°33'	26°33'	56°09'
	16	4	313°24'	64°58'	333°30'	26°30'	56°08'
	17	5	6°23'	65°00'	26°29'	26°29'	56°10'
	18	3	43°27'	64°55'	63°33'	26°27'	56°05'
	19	1	96°22'	64°58'	116°28'	26°28'	56°08'
	20	2	133°18'	65°06'	153°25'	26°35'	56°16'

1. Вводят в измеренные величины углов  $\rho$  поправку на место нуля (исправленные значения углов показаны в табл. 3, столбец 7).

2. На стереографической проекции кристалла (см. рис. 10) определяют положение элементов симметрии: кристалл несколько развернут вокруг оси  $c$  так, что ни одна из плоскостей симметрии не совпадает с нулевым меридианом (его положение отмечено пунктиром в соответствии с принятой в кристаллографии системой отсчета сферических координат).

3. Проводят на проекции кристаллографические оси. Ось  $c$ , согласно правилам установки, совпадает с осью  $\varphi$ . На проекции она в центре. Выбор осей  $a$  и  $b$  может быть произведен двояко: их можно совместить либо с нормальными гранями габитусной призмы (грани 1, 2, 3, 4), либо с нормальными гранями слабо развитой призмы (грани 5, 6). Известно, что ребра определенной рентгенометрически элементарной ячейки кальциррита перпендикулярны граням габитусной призмы (грани 1, 2, 3, 4). Перпендикулярно этим граням проводим кристаллографические оси  $a$  и  $b$ . На рис. 10,  $a$  ось  $b$  обозначена сплошной линией. Кристалл должен быть развернут вокруг вертикальной оси по часовой стрелке на угол  $\Delta_x$ . Тогда он придет в положение, отвечающее правилам установки кристаллов. Приблизительно угол  $\Delta_x$  равен  $20^\circ$ .

4. Вычисляют величину  $\Delta_x$ . Для идеально развитого кристалла с точно замеренными углами  $\varphi$  и  $\rho$  плоскости (или оси) симметрии на рис. 10 разобьют стереографическую проекцию на симметричные части. Иначе говоря, в этом идеальном случае положение, например, плоскости симметрии (100) и перпендикулярной ей оси  $b$  мы могли бы определить по любой паре симметричных граней. Можно, например, взять координаты  $\varphi$  граней 16 и 17 и по ним найти координату  $\varphi_x$  точки пересечения оси  $b$  с основным кругом проекции:

$$\varphi_x = \frac{313^\circ 24' + 6^\circ 23'}{2} = 159^\circ 53'.$$

Для реального кристалла значения  $\varphi_x$ , найденные по разным парам граней, могут несколько отличаться друг от друга. В связи с этим определение угла  $\Delta_x$  для поворота кристалла производят следующим образом:

а) выбирают пары симметричных граней: 2 и 4; 16 и 17; 7 и 8; 14 и 20; 15 и 18; 10 и 11. Они расположены симметрично относительно плоскости симметрии (100) и оси  $b$ . Можно дополнительно взять и другие пары граней: 1 и 3; 8 и 10; 17 и 20; 18 и 19; 12 и 13; 14 и 16; 7 и 11; они расположены симметрично относительно плоскости симметрии (010) и оси  $a$ ;

б) находят среднеарифметические значения  $\varphi_x$  из координат для каждой пары граней (табл. 4, столбцы 2, 3);

в) находят (табл. 4, столбцы 4, 5) для каждой пары граней разность  $\Delta$ :

$$\Delta = 180^\circ - \varphi_x \text{ (или } 360^\circ - \varphi_x, 90^\circ - \varphi_x, 270^\circ - \varphi_x);$$

г) находят угол поворота  $\Delta_x$  кристалла вокруг оси  $\varphi$ ; он равен среднеарифметической величине из цифр табл. 4, столбца 5, что составляет (+)  $20^\circ 06'$ .

5. Во все значения  $\varphi$  в табл. 3, столбец 3, вводят поправку  $\Delta_x$ . Так получают значения долгот, приведенные к нулевому меридиану (табл. 3, столбец 5).

В такой же последовательности ведут расчеты для двух других кристаллов. Доворот  $\Delta_x$  для кристалла № 2 (табл. 5) определяют по парам граней 1 и 3; 13 и 15; 5 и 6; 7 и 8; 2 и 4; 12 и 13; 5 и 8; 6 и 7. Он составляет (-)  $40^\circ 01'$ . Доворот  $\Delta_x$  для кристалла № 3 (табл. 6) определен по парам 1 и 3; 2 и 4; 6 и 7; 11 и 13. Он равен (+)  $4^\circ 58'$ .

При всех расчетах  $\Delta_x$  следует выбирать только грани с качественными сигналами, обеспечивающими максимальную точность отсчета углов  $\varphi$  на гониометре, или, используя все грани, учитывать веса наблюдений. Пример таких вычислений приведен в табл. 4 (столбцы 6, 7, 8). Сначала по качеству (четкости) сигналов определяют средний вес наблюдения для пар граней. Их записывают в табл. 4, столбец 7. Качество сигналов граней для кристалла № 1 дано в табл. 3. Находят произведения величин  $\Delta$  на средние веса и записывают их в табл. 4, столбец 8. Суммируют числа столбца 8. Значение  $\Delta_x$  равно частному от деления суммы столбца 8 на сумму столбца 7. Оно оказалось равным  $20^\circ 03'$ , т. е. несущественно отличающимся от ранее найденного значения  $20^\circ 06'$ . Однако при малом числе пар граней это расхождение может быть более значительным.

Расчет угла  $\Delta x$  для доворота кристалла № 1

Пары граней	Расчет $\varphi_x$	$\varphi_x$	Расчет $\Delta$	$\Delta$	Расчет $\Delta_x$ с учетом веса наблюдения		
2 и 4	$\frac{69^\circ 57' + 250^\circ 00'}{2}$	159°58,5'	180°—159°58,5'	+20°01,5'	$\frac{2+3}{2}$	2,5	50°04'
16 и 17	$\frac{313^\circ 24' + 6^\circ 23'}{2}$	159°53,5'	180°—159°53,5'	+20°06,5'	$\frac{4+5}{2}$	4,5	90°29'
7 и 8	$\frac{313^\circ 27' + 6^\circ 22'}{2}$	159°54,5'	180°—159°55,5'	+20°05,5'	$\frac{5+1}{2}$	3	60°16,5'
14 и 20	$\frac{186^\circ 37' + 133^\circ 18'}{2}$	159°57,5'	180°—159°57,5'	+20°02,5'	$\frac{1+2}{2}$	1,5	30°04'
15 и 18	$\frac{276^\circ 27' + 43^\circ 27'}{2}$	159°57'	180°—159°57'	+20°03'	$\frac{2+3}{2}$	2,5	[50°07,5'
10 и 11	$\frac{133^\circ 25' + 186^\circ 17'}{2}$	159°51'	180°—159°51'	+20°09'	$\frac{3+1}{2}$	2	40°18'
1 и 3	$\frac{340^\circ 07' + 159^\circ 33'}{2}$	69°50'	90°—69°50'	+20°10'	$\frac{4+2}{2}$	3	60°30'

Пары граней	Расчет $\varphi_x$	$\varphi_x$	Расчет $\Delta$	$\Delta$	Расчет $\Delta_x$ с учетом веса наблюдения		
8 и 10	$\frac{6^{\circ}22' + 133^{\circ}25'}{2}$	69°53,5'	90°—69°53,5'	+20°06,5'	$\frac{1+3}{2}$	2	40°13'
17 и 20	$\frac{6^{\circ}23' + 133^{\circ}18'}{2}$	69°50,5'	90°—69°50,5'	+20°09,5'	$\frac{5+2}{2}$	3,5	70°33'
18 и 19	$\frac{43^{\circ}27' + 96^{\circ}22'}{2}$	69°54,5'	90°—69°54,5'	+20°05,5'	$\frac{3+1}{2}$	2	40°11'
12 и 13	$\frac{204^{\circ}37' + 294^{\circ}45'}{2}$	69°41'	90°—69°41'	+20°19'	$\frac{4+5}{2}$	4,5	91°25,5'
14 и 16	$\frac{186^{\circ}37' + 313^{\circ}24'}{2}$	70°00,5'	90°—70°00,5'	+19°58,5'	$\frac{1+4}{2}$	2,5	49°56'
7 и 11	$\frac{313^{\circ}27' + 186^{\circ}17'}{2}$	69°52'	90°—69°52'	+20°08'	$\frac{5+1}{2}$	3	60°24'
—	—	—	—	—	Итого...	36,5	730°32'
			Среднее...	20°06'		Среднее	20°03'

Другой способ расчетов предложен В. Б. Татарским (1961). Он основан на одновременной обработке результатов измерения по всем кристаллам сразу.

Таблица 5  
Обработка первичных результатов измерения кристалла № 2  
Юстировка по зоне [001]; место нуля по оси  $\rho = 98^\circ 50'$

Буквенное обозначение и № граней	Измеренные		Углы $\phi$ (пересчитанные)		$\rho$ исправленное	
	$\phi$	$\rho$	приведенные к нулевому меридиану	приведенные к первому сектору		
a	1	220°03'	98°51'	180°02'	0°02'	90°01'
	2	310°06'	98°53'	270°05'	0°05'	90°03'
	3	39°50'	98°50'	359°49'	0°11'	90°00'
	4	130°01'	98°44'	90°00'	0°00'	89°54'
m	5	84°58'	98°50'	44°57'	44°57'	90°00'
	6	175°08'	98°47'	135°07'	44°53'	89°57'
	7	265°02'	98°46'	225°01'	44°59'	89°56'
	8	354°57'	98°52'	314°56'	44°56'	90°02'
z	9	66°20'	35°25'	26°19'	26°19'	26°35'
y	10	174°55'	34°20'	134°54'	44°54'	25°30'
λ	11	336°30'	64°30'	296°29'	26°29'	55°40'
	12	13°28'	64°58'	333°27'	26°33'	56°08'
	13	66°38'	64°40'	26°37'	26°37'	55°50'
	14	156°30'	65°05'	116°29'	26°29'	56°15'
	15	193°20'	65°10'	153°19'	26°31'	56°20'

Таблица 6  
Обработка первичных результатов измерения кристалла № 3  
Юстировка по зоне [001]; место нуля по оси  $\rho = 98^\circ 50'$

Буквенное обозначение и № граней	Измеренные		Углы $\phi$ (пересчитанные)		$\rho$ исправленное	
	$\phi$	$\rho$	приведенные к начальному меридиану	приведенные к первому сектору		
a	1	355°01'	98°40'	0°03'	0°03'	89°50'
	2	84°55'	98°51'	89°57'	0°03'	90°01'
	3	174°58'	98°44'	180°00'	0°00'	89°54'
	4	265°07'	98°41'	270°09'	0°09'	89°51'

Буквенное обозначение и № грани	Измеренные		Углы $\phi$ (пересчитанные)		$\rho$ исправленное	
	$\phi$	$\rho$	Приведенные к начальному меридиану	Приведенные к первому сектору		
<i>m</i> {	5	310°05'	98°50'	315°07'	44°53'	90°00'
	6	129°58'	98°52'	135°00'	45°00'	90°02'
	7	220°03'	98°48'	225°05'	44°55'	89°58'
<i>z</i> {	8	201°34'	35°00'	206°36'	26°36'	26°10'
<i>y</i> {	9	40°02'	33°40'	45°04'	45°04'	24°50'
	10	328°28'	64°40'	333°30'	26°30'	55°50'
$\lambda$ {	11	111°37'	64°50'	116°39'	26°39'	56°00'
	12	148°24'	64°45'	153°26'	26°34'	55°55'
	13	238°27'	65°00'	243°29'	26°31'	56°10'
	14	291°33'	64°55'	296°35'	26°35'	56°05'

### Приведение координат к элементарному сектору (сводный кристалл)

Приведенные к одному начальному меридиану долги граней вновь пересчитывают для того, чтобы свести все грани кристаллов в один элементарный сектор стереографической проекции и получить гониометрическую характеристику так называемого сводного кристалла.

Элементарным назовем минимальный по площади сектор, обладающий полным набором элементов симметрии, присущих данному кристаллу.

Пример первый. В тетрагональной сингонии в виде симметрии 4 *mm* сфера проекции разрезается плоскостями симметрии на 8 частей. Им на рис. 11, *a* отвечают восемь элементарных секторов. Нанесем в первом секторе проекцию какой-либо грани 1, например, с координатами  $\phi = +12^\circ 02'$ ,  $\rho = -63^\circ 00'$ . По положению проекции в первом секторе путем симметричных переносов легко определить положение проекций всех других граней и их координаты. Таких граней восемь, они образуют дитетрагональную пирамиду. Легко решить и обратную задачу — мысленно перенести все грани в первый сектор и соответственно пересчитать их координаты. Для всех граней одной и той же простой формы координаты, приведенные к первому сектору, должны быть одинаковыми. В действительности они несколько отличаются друг от друга, отражая неточность измерения кристалла и его отклонение от идеальной формы.

Отметим, что при всех переносах любых граней любых простых форм в первый сектор и пересчетах их ко-

ординат нижние грани всегда будут оставаться внизу и угол  $\rho$  для них имеет отрицательные значения; все верхние грани будут оставаться вверху, а углы  $\rho$  для них по-

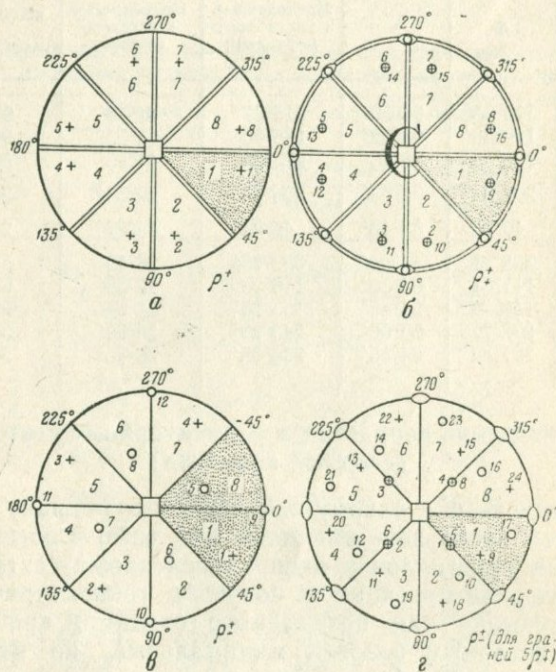


Рис. 11. Выбор элементарного сектора:

а, б, в, г — сферы проекций; 1—8 — номера секторов (элементарный сектор выделен крапом; 2—24 — номера граней

ложительные. На рис. 11, а это помечено индексом  $\rho^{\pm}$ . Пересчет координат иллюстрируется табл. 7.

Пример второй. В тетрагональной сингонии в виде симметрии 4 выбирают восемь секторов (рис. 11, в). Грани переносятся при помощи оси 4 в 1 и 8 секторы. В секторе 1  $\phi$  лежит в пределах  $0^{\circ}-(+)45^{\circ}00'$ , в секторе 8 — в пределах  $0^{\circ}-(-)45^{\circ}00'$ . При любых переносах и пересчетах нижние грани несовместимы с верхними. Это помечено на рисунке индексом  $\rho^{\pm}$ . На рис. 11, в для граней 1, 2, 3, 4  $\phi$  после приведения в 1-й сектор оказывается заключенным в интервал  $0-(+)45^{\circ}$ , а  $\rho$  отрицательным (границы нижние). Для граней 5, 6, 7, 8  $\phi$  после приведения в сектор 8 окажется заключенным в пределы  $0^{\circ}-(-)45^{\circ}00'$ , а  $\rho$  положительным (границы верхние).

## Приведение сферических координат в элементарный сектор (примеры)

№ граней		приведенные к одному начальному меридиану		Приведенные к первому сектору		Средние	
верхних	нижних	Ф	ρ	Ф	ρ	Ф	ρ
1	2	3	4	5	6	7	8
<i>К рисунку 11, а</i>							
—	1	12°02'	—63°00'	12°02'	—63°00'	+12°01'	—63°00'
—	2	78°00'	—63°10'	12°00'	—63°10'		
—	3	101°59'	—63°05'	11°59'	—63°05'		
—	4	167°58'	—62°54'	12°02'	—62°54'		
—	5	192°03'	—62°59'	12°03'	—62°59'		
—	6	257°55'	—63°02'	12°05'	—63°02'		
—	7	281°58'	—63°00'	11°58'	—63°00'		
—	8	348°01'	—62°50'	11°59'	—62°50'		
9	—	0°03'	+45°00'	0°03'	+45°00'	+0°04'	+44°56'
10	—	89°56'	+44°50'	0°04'	+44°50'		
11	—	179°54'	+44°53'	0°06'	+44°53'		
12	—	270°02'	+45°01'	0°02'	+45°01'		
<i>К рисунку 11, б</i>							
1	—	15°00'	+65°02'	15°00'	+65°02'	+15°00'	+65°00'
2	—	74°50'	+64°50'	15°10'	+64°50'		
3	—	105°05'	+65°09'	15°05'	+65°09'		
4	—	165°02'	+65°03'	14°58'	+65°03'		
5	—	194°57'	+64°48'	14°57'	+64°48'		
6	—	255°01'	+65°07'	14°59'	+65°07'		
7	—	285°00'	+65°00'	15°00'	+65°00'		
8	—	344°52'	+65°04'	15°08'	+65°04'		
—	9	15°00'	—65°12'	15°00'	+65°12'		
—	10	75°10'	—65°00'	14°50'	+65°10'		
—	11	104°55'	—64°58'	14°55'	+64°58'		
—	12	164°58'	—65°10'	15°02'	+65°10'		
—	13	195°03'	—64°57'	15°03'	+64°57'		
—	14	254°59'	—64°53'	15°01'	+64°53'		
—	15	285°00'	—64°56'	15°00'	+64°56'		
—	16	345°08'	—64°51'	14°52'	+64°51'		

№ граней		Приведенные к одно- му начальному ме- ридиану		Приведенные к перво- му сектору		Средние	
верх- них	ниж- них	$\varphi$	$\rho$	$\varphi$	$\rho$	$\varphi$	$\rho$
1	2	3	4	5	6	7	8
<i>К рисунку 11, г</i>							
1	—	45°01'	+30°00'	44°59'	+30°00'	+44°52'	+29°58'
2	—	134°48'	+30°10'	44°48'	+30°10'		
3	—	224°51'	+30°02'	44°51'	+30°02'		
4	—	315°09'	+29°50'	44°51'	+29°50'		
—	5	44°51'	-30°05'	44°51'	+30°05'		
—	6	134°55'	-29°52'	44°55'	+29°52'		
—	7	224°50'	-29°48'	44°50'	+29°48'		
—	8	314°49'	-29°58'	44°49'	+29°58'		
—	9	38°00'	-60°01'	38°00'	-60°01'	+37°59'	-59°57'
10	—	51°59'	+60°09'	38°01'	-60°09'		
—	11	127°40'	-59°45'	37°40'	-59°45'		
12	—	141°45'	+59°55'	38°15'	-59°55'		
—	13	218°02'	-59°50'	38°02'	-59°50'		
14	—	232°02'	+60°05'	37°58'	-60°05'		
—	15	308°00'	-59°47'	38°00'	-59°47'		
16	—	322°12'	+60°02'	37°48'	-60°02'		
17	—	15°00'	+72°10'	15°00'	+72°10'	+14°51'	+71°58'
—	18	75°20'	-72°05'	14°40'	+72°05'		
19	—	114°45'	+72°04'	14°45'	+72°04'		
—	20	164°55'	-71°50'	15°05'	+71°50'		
21	—	194°38'	+71°58'	14°38'	+71°58'		
—	22	255°05'	-71°48'	14°55'	+71°48'		
23	—	285°05'	+71°50'	15°05'	+71°50'		
—	24	345°19'	-72°01'	14°41'	+72°01'		

Еще два примера даны на рис. 11, б и г и в табл. 7.

Элементарные секторы для всех видов симметрии перечислены в прил. 1. Там же даны формулы для приведения долгот граней к первому (или к минус первому) сектору. Искомая долгота первого сектора обозначена индексом  $\varphi_1$  или  $\varphi_{(-)1}$ . Расчеты следует начинать с вычисления координат  $\varphi$ . Для граней, которые при переносах попали в первый сектор,  $\varphi$  имеет положительное зна-

чение, для граней минус первого сектора —  $\varphi$  отрицательное. Затем приступают к пересчету координат  $\rho$ . Если в формулах стоит знак  $\rho^\pm$ , для нижних граней углы  $\rho$  сохраняют отрицательное значение. Знак  $\rho^\pm$  показывает, что нижние грани должны быть мысленно совмещены с верхними, а их углам  $\rho$  при этом приписывают положительное значение.

Долготы  $\varphi$  кристаллов кальцитита, приведенные к первому сектору, даны в табл. 3, 5, 6, столбец 6.

### Определение координат сводного кристалла

Расчет координат сводного кристалла является последним этапом обработки первичных результатов гониометрического исследования.

Координаты сводного кристалла — это среднеарифметические значения координат  $\varphi$  и  $\rho$  каждой простой формы, вычисленные по частным значениям по всем ее граням на измеренных кристаллах и приведенные к элементарному сектору. При этом целесообразно сразу придавать всем выявленным простым формам буквенные обозначения, поскольку они позволяют сопоставлять данные, полученные при разных установках разными авторами.

Для кальцитита определение координат сводного кристалла производим по цифрам табл. 3, 5, 6, столбцы 6, 7. Найденные величины приведены в табл. 8\*.

Таблица 8

Координаты сводного кристалла кальцитита

Буквенное обозначение кристаллографической формы	Количество граней	$\varphi$	$\rho$
<i>a</i>	12	0°06'	89°58'
<i>m</i>	9	44°55'	90°01'
<i>z</i>	7	26°29'	26°23'
<i>y</i>	4	44°54'	24°59'
$\lambda$	17	26°23'	56°04'

\* В эти данные рекомендуется включать реальную точность определения сферических координат граней простых форм сводного кристалла. Она складывается из оценки погрешностей отдельных измерений. — *Прим. ред.*

При изучении кристаллов на гониометрах всегда получается некоторый разброс в значениях координат граней одних и тех же простых форм. Он может быть различным, но, как правило, не превышает 1—2°, хотя может быть и большим. Он отражает, во-первых, реальное отклонение граней от их «теоретического» положения, во-вторых, — степень точности определения при помощи гониометров широты и полярного расстояния граней (Нардов, 1958). Поэтому юстировку кристаллов необходимо производить с использованием максимально возможного числа граней. Самым нежелательным является юстировка по одной грани, если даже она хорошо блестит и дает четкий сигнал. Положение нулевого меридиана (вычисление места нуля по оси  $\varphi$ ) должно определяться по максимально возможному числу граней.

## ГЛАВА 5.

### МЕТОДЫ ВЫЧИСЛЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ

#### Задачи и ход вычислений

В задачу вычислений кристаллов входит определение их геометрических констант, символов развитых на них граней, расчет теоретических координат граней. Все расчеты ведутся по координатам сводного кристалла.

Начальным этапом вычислений является определение на кристалле единичной грани и расчет ее координат. По ним затем определяются символы всех других граней. Далее рассчитываются геометрические константы кристалла. Наконец, по символам вычисляют «теоретические» координаты, строго отвечающие положению грани с данным символом.

Приводимые в настоящей книге формулы взяты из работ О. М. Аншелеса и В. В. Доливо-Добровольского. Они даны для кристаллов только в стандартной установке. Приведены наиболее общие формулы. Для частных случаев формулы не рассматриваются. Также не даны расчеты с использованием координат двуединичных граней, основных граней и зональных методов вычисления. Полная разработка методов вычисления кри-

сталлов дана в работах О. М. Аншелеса (1925, 1926, 1934, 1939) и В. В. Доливо-Добровольского (1928)\*.

В гониометрических исследованиях широко используются также графические методы вычисления кристаллов (Федоров, 1912; Гольдшмидт, 1896; Вульф, 1904; Аншелес, 1939). Их подробное описание дается в руководствах по кристаллографии (Флинт, 1956 и др.).

Здесь и далее приняты следующие обозначения:

$(hk\bar{i}l)$  — для гексагональной и тригональной сингоний;

$(hkl)$  — для остальных сингоний;

для координат единичной грани:  $\varphi_e, \rho_e$ ;

для координат любой грани:  $\varphi_x, \rho_x$ ;

для параметров элементарной ячейки:  $a_0, b_0, c_0$ ;

для углов между координатными осями:  $\alpha, \beta, \gamma$ ;

для единичных отрезков на координатных осях:  $a, b, c$ .

При всех расчетах вычисления следует вести с использованием максимально возможного числа граней кристалла, выводя из совокупности частных значений средние значения искоемых величин. Этим сглаживаются неточности исследования кристаллов.

### Выбор единичной грани и определение ее координат

При выборе и определении координат единичной грани исследователь может располагать разным объемом сведений о кристалле:

а) известна сингония и параметры элементарной ячейки, гониометрия выполнена впервые;

б) гониометрические исследования выполнялись и ранее, известны простые формы, единичная грань и ее координаты, сведения о размерах элементарной ячейки отсутствуют;

в) кристалл изучен впервые, сведения о размерах элементарной ячейки отсутствуют.

---

\* О. М. Аншелес (1934, 1939), развивая теодолитный метод Е. С. Федорова, разработал «метод непосредственной подстановки» — наиболее простой и всеупотребительный метод вычисления кристаллов по гониометрическим данным, полученным на двукружном (теодолитном) гониометре. Этот метод впервые опубликован в 1926 г. в трудах Ленинградского об-ва естествоиспытателей. Частную проблему — вычисление элементов кристаллов — рассмотрел В. В. Доливо-Добровольский (1928, 1937). — *Прим. ред.*

В соответствии с объемом сведений выбор единичной грани и расчет ее координат будет также производиться по-разному.

1. По рассмотренным ранее формулам (см. стр. 18) рассчитывают  $\varphi_e$  и  $\rho_e$  и определяют, какая из наблюдавшихся граней является единичной. При этом может оказаться, что принятая по морфологическим признакам установка кристалла не совпала со структурной. Тогда можно изменить установку кристалла.

Пример первый. Изучается тетрагональный минерал вида симметрии *Amm*. На его кристаллах установлены грани с координатами  $\varphi_x=45^\circ 03'$ ;  $\rho_x=26^\circ 39'$ ;  $\varphi_y=0^\circ 02'$ ;  $\rho_y=70^\circ 23'$ ;  $\varphi_z=34^\circ 29'$ ;  $\rho_z=56^\circ 21'$ . Параметры элементарной ячейки:  $a_0=3 \text{ \AA}$ ;  $c_0=6 \text{ \AA}$ . Отсюда  $\varphi_e=45^\circ 00'$ ;  $\rho_e=70^\circ 38'$ .

Очевидно, за единичную грань должна быть принята грань  $y$ , но при этом кристалл должен быть повернут на  $45^\circ$  вокруг оси  $c$ , что связано с пересчетом координат  $\varphi$  всех граней. В последующих вычислениях за исходные берутся координаты  $\varphi_e=44^\circ 58'$ ,  $\rho_e=70^\circ 23'$ , измеренные для грани  $y$  (но не  $70^\circ 38'$ ).

Пример второй. После расчета по параметрам элементарной ячейки координат  $\varphi_e$  и  $\rho_e$  оказывается, что на изученных кристаллах единичные грани не развиты. Рационален следующий путь дальнейших расчетов: определяют рентгеновскими методами положение осей  $a$ ,  $b$ ,  $c$  относительно граней кристалла; придают кристаллам структурную установку; рассчитывают символы, «теоретические» координаты и константы кристалла по величинам  $\varphi_e$  и  $\rho_e$ , которые получены из рентгеновских данных.

2. Единичную грань выбирают по аналогии с выбором, уже сделанным ранее для данного кристалла (по справочникам Goldschmidt, 1897; Dana, 1882; Дэна, 1951—1954; «Минералы», 1960). Исходя из координат выбранной единичной грани, производят все вычисления кристалла.

Может случиться, что на кристаллах нет грани, которая принята для этого минерала за единичную. Тогда берут грань, символ которой может быть определен по аналогии с ранее изученными кристаллами. По специальным формулам (Аншелес, 1939) переходят к  $\varphi_e$  и  $\rho_e$ , а по ним производят все остальные расчеты.

3. Выбор единичной грани производят по морфологическим особенностям кристаллов и полученным при исследовании представлениям о их сингонии. За единичную грань принимают грань, пересекающую координатные оси. Если на кристалле развиты грани несколь-

ких простых форм, отвечающие этому условию, предпочтение отдается той грани, которая отсекает на всех трех координатных осях по возможности максимально равные отрезки.

После выбора единичной грани ее сферические координаты (средние величины, приведенные к первому сектору) используются за исходные для всех последующих расчетов.

В некоторых случаях на кристаллах отсутствуют грани, одновременно пересекающие все три координатные оси. В других случаях имеется грань, которая пересекает все координатные оси, но не отвечает требованиям к единичной грани данной сингонии или отсекает несоразмерно разные отрезки. Тогда выбирают так называемые двуединичные грани. Они пересекают две какие-нибудь оси и параллельны третьей. Им придают символы (101), (011), (110). Затем по их координатам с помощью специальных формул (Аншелес, 1939) рассчитывают символы всех других граней. Можно придать исходным граням и другие символы: (201), (102) и т. д. Важно только, чтобы затем все другие формы, развитые на кристалле, получили возможно более простые символы. Для средней категории сингоний двуединичная грань вполне заменяет единичную, так как дает соотношение отрезков по горизонтальным и вертикальным осям.

Выбор единичной грани по особенностям морфологии кристаллов не обязательно отвечает положению единичной грани в структурной установке. Поэтому символы граней после выполнения рентгеновского исследования могут быть при необходимости пересчитаны применительно к структурной установке. Надо учитывать, что морфологическая установка чаще всего (за исключением кубических кристаллов) неоднозначна; здесь следует руководствоваться правилом: чем проще символы, получаемые из координат данной единичной грани для других граней кристалла, тем более обоснована правильность сделанного выбора.

### Формулы для расчета символов по координатам

Ниже приводятся основные формулы для вычисления символов граней по их координатам, исходя из координат единичной грани.

Кубическая сингония всегда характеризуется координатами  $\varphi_e = 45^\circ 00'$ ;  $\rho_e = 54^\circ 44'$ :

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{h}{k}; \quad \frac{k}{l} = \operatorname{tg} \rho_x \cdot \cos \varphi_x.$$

Пример. Координаты граней  $\varphi_x = 33^\circ 41'$ ;  $\rho_x = 60^\circ 59'$ .  
Определяем символы:

$$\frac{h}{k} = \operatorname{tg} 33^\circ 41' = 0,6665; \quad h:k = 2:3;$$

$$\frac{k}{l} = \operatorname{tg} 60^\circ 59' \cdot \cos 33^\circ 41' = 1,497; \quad k:l = 3:2;$$

$$h:k:l = 2:3:2$$

Символ (232).

Для кристаллов кубической сингонии в справочнике «Минералы» (1960) приведены заранее рассчитанные значения  $\varphi$  и  $\rho$  для граней с разными символами.

Гексагональная (и тригональная) сингонии. Приводимые ниже формулы даются в соответствии с установкой и выбором места нуля по  $\varphi$ , принятыми в справочнике «Минералы» (1960). Положение кристаллографических осей и нуля отсчетов углов  $\varphi$  показано нами в прил. 1. За единичную принимается грань  $(11\bar{2}1)$ ; всегда  $\varphi_e = +30^\circ 00'$ .

$$h:k:l = [2 \sin \varphi_x] : [2 \sin (60^\circ - \varphi_x)] : \left[ \frac{\operatorname{ctg} \rho_x}{\operatorname{ctg} \rho_e} \right].$$

При вычислении символов рассчитываются индексы  $h$ ,  $k$ ,  $l$ . Индекс  $i$  равен сумме  $(h+k)$ , взятой с противоположным знаком.

Пример первый. Измерены кристаллы киновари, для которых  $\varphi_e = 30^\circ 00'$ ;  $\rho_e = 77^\circ 40'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = 0^\circ 00'$ .  $\rho_x = 41^\circ 24'$ .

$$h:k:l = [2 \sin 0^\circ 00'] : [2 \sin (60^\circ - 0^\circ 00')] : \left[ \frac{\operatorname{ctg} 41^\circ 24'}{\operatorname{ctg} 77^\circ 40'} \right] = \\ = 0:1,732:5,188 = 0:1:2,98 = 0:1:3.$$

Символ  $(01\bar{1}3)$ .

Пример второй. Измерены кристаллы вюртцита, для которых  $\varphi_e = 30^\circ 00'$ ;  $\rho_e = 53^\circ 40'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = 0^\circ 00'$ ;  $\rho_x = -52^\circ 06'$  (пирамиды на нижней головке кристаллов; кристаллы вюртцита гемиморфны).

$$h:k:l = [2 \sin 0^\circ] : [2 \sin (60^\circ - 0^\circ)] : \left[ \frac{\operatorname{ctg} (-52^\circ 06')}{\operatorname{ctg} 53^\circ 40'} \right] = 0:1:(-1).$$

Символ  $(01\bar{1}\bar{1})$ .

Тетрагональная сингония. Вычисления ведутся по формуле:

$$h:k:l = [\sin \varphi_x]:[\cos \varphi_x]:\left[\frac{0,707 \operatorname{tg} \rho_e}{\operatorname{tg} \rho_x}\right]$$

Пример первый. Измерены кристаллы рутила. Установлено:  $\varphi_e = 45^\circ 02'$ ;  $\rho_e = 42^\circ 23'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = 71^\circ 34'$ ;  $\rho_x = 34^\circ 10'$ .

$$\frac{h}{k} = \operatorname{tg} 71^\circ 34' = 3,0; \quad h:k = 3:1;$$

$$\begin{aligned} k:l &= [\cos 71^\circ 34']:\left[\frac{0,707 \operatorname{tg} 42^\circ 23'}{\operatorname{tg} 34^\circ 10'}\right] = [0,3162]:[0,9683] = \\ &= 1:3,062 = 1:3; \\ h:k:l &= 3:1:3. \end{aligned}$$

Символ: (313).

Пример второй. Измерены кристаллы неизвестного минерала вида симметрии  $\bar{4}$ .

Установлено:  $\varphi_e = 45^\circ 00'$ ;  $\rho_e = 70^\circ 15'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = -18^\circ 26'$ ;  $\rho_x = -46^\circ 05'$ .

$$\frac{h}{k} = \operatorname{tg} (-18^\circ 26') = -0,333; \quad h:k = (-1):( +3).$$

$$\begin{aligned} k:l &= [\cos (-18^\circ 26')]:\left[\frac{0,707 \operatorname{tg} 70^\circ 15'}{\operatorname{tg} (-46^\circ 05')}\right] = (+0,9487):(-1,896) = \\ &= (+1):(-2); \\ h:k:l &= (-1):( +3):(-6). \end{aligned}$$

Символ  $(\bar{1}3\bar{6})$ .

Ромбическая сингония. Вычисления ведутся по формулам:

$$\frac{h}{k} = \frac{\operatorname{ctg} \varphi_x}{\operatorname{ctg} \varphi_e}; \quad \frac{l}{h} = \frac{\operatorname{ctg} \rho_x \cdot \sin \varphi_e}{\sin \varphi_x \cdot \operatorname{ctg} \rho_e}.$$

Пример первый. Измерены кристаллы валентинита, для них принято  $\varphi_e = 68^\circ 30'$ ,  $\rho_e = 49^\circ 49'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = 90^\circ 00'$ ;  $\rho_x = 29^\circ 00'$ .

$$\begin{aligned} \frac{k}{h} &= \frac{\operatorname{ctg} 90^\circ 00'}{\operatorname{ctg} 68^\circ 38'} = 0, \quad \text{отсюда } k = 0; \\ \frac{l}{h} &= \frac{\operatorname{ctg} 29^\circ 00' \cdot \sin 68^\circ 30'}{\sin 90^\circ 00' \cdot \operatorname{ctg} 49^\circ 49'} = 1,990 = 2; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} l:h &= 2:1. \\ h:k:l &= 1:0:2. \end{aligned}$$

Символ: (102).

Пример второй. Измерены кристаллы неизвестного минерала вида симметрии  $2/m$ . Установлено:  $\varphi_e = 57^\circ 49'$ ;  $\rho_e = 52^\circ 08'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = -21^\circ 40'$ ;  $\rho_x = -55^\circ 40'$ .

$$\frac{k}{h} = \frac{\text{ctg}(-21^\circ 40')}{\text{ctg} 57^\circ 49'} = -3,987; \quad k:h = 4:(-1).$$

$$\frac{l}{h} = \frac{\text{ctg}(-55^\circ 40') \cdot \sin 57^\circ 49'}{\sin(-21^\circ 40') \cdot \text{ctg} 52^\circ 08'} = 2,001;$$

$$l:h = 2:1.$$

Символ  $(\bar{1}4\bar{2})$ .

*Моноклинная сингония.* В формулы входят величины  $\varphi_e$ ,  $\rho_e$  и  $\rho_{(001)}$ . Последняя величина — угол наклона третьего пинакоида (или моноэдра). Как известно, он связан с углом  $\beta$  уравнением:  $\beta = 90^\circ + \rho_{(001)}$ .

$$h:k:l = \left[ \frac{\text{tg} \rho_x \sin \varphi_x - A}{B - A} \right] : \left[ \frac{\text{tg} \rho_x \cos \varphi_x}{C} \right] : 1,$$

где

$$A = \text{tg} \rho_{(001)}; \quad B = \text{tg} \rho_e \sin \varphi_e;$$

$$C = \text{tg} \rho_e \cos \varphi_e.$$

Пример первый. Измерены кристаллы джемсонита, для которых  $\varphi_e = 52^\circ 50'$ ;  $\rho_e = 19^\circ 20'$ ;  $\rho_{(001)} = 1^\circ 24'$  ( $\beta = 91^\circ 24'$ ). Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = 51^\circ 30'$ ;  $\rho_x = 34^\circ 20'$ .

$$A = \text{tg} 1^\circ 24' = 0,0419;$$

$$B = \text{tg} 19^\circ 20' \sin 52^\circ 50' = 0,2796;$$

$$C = \text{tg} 19^\circ 20' \cos 52^\circ 50' = 0,2119.$$

$$h:k:l = \left[ \frac{\text{tg} 34^\circ 20' \sin 51^\circ 30' - 0,0419}{0,2796 - 0,0419} \right] : \left[ \frac{\text{tg} 34^\circ 20' \cos 51^\circ 30'}{0,2119} \right] : 1 = 2,072:2,006:1 = 2:2:1.$$

Символ грани  $x$  (221).

Пример второй. На тех же кристаллах координаты граней  $y$ :  $\varphi_y = -45^\circ 22'$ ;  $\rho_y = 16^\circ 26'$ .

$$h:k:l = \left[ \frac{-(\text{tg} 16^\circ 26' \sin 45^\circ 22') - 0,0419}{0,2796 - 0,0419} \right] : \left[ \frac{\text{tg} 16^\circ 26' \cos (-45^\circ 22')}{0,2119} \right] : 1 = (-) 1,060:0,977:1 = (-) 1:1:1.$$

Символ грани  $y$  (III).

*Триклинная сингония.* В формулы для расчетов, помимо сферических координат единичной грани кристалла, входят долгота третьего пинакоида  $\varphi_{(001)}$  и долгота первого пинакоида  $\varphi_{(100)}$ .

$$h:k:l = \left[ \frac{\operatorname{tg} \rho_x \sin \varphi_x - A}{B - A} \right] : \left[ \frac{\operatorname{tg} \rho_x \sin (\varphi_{(100)} - \varphi_x) - C}{D - C} \right] : 1,$$

где

$$A = \operatorname{tg} \rho_{(001)} \sin \varphi_{(001)};$$

$$B = \operatorname{tg} \rho_e \sin \varphi_e;$$

$$C = \operatorname{tg} \rho_{(001)} \sin (\varphi_{(100)} - \varphi_{(001)});$$

$$D = \operatorname{tg} \rho_e \sin (\varphi_{(100)} - \varphi_e).$$

**Пример.** Измерены кристаллы беллинджерита (рис. 12). Для них  $\varphi_e = 40^\circ 41'$ ;  $\rho_e = 62^\circ 02'$ . За пинакоиды приняты: за (010) — грань  $b$  с координатами  $\varphi_{(010)} = 0^\circ 00'$ ;  $\rho_{(010)} = 90^\circ 00'$ ; за (001) — грань  $c$  с коор-

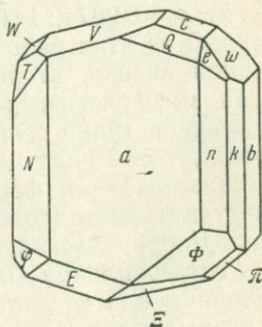


Рис. 12. Кристалл беллинджерита (вид симметрии  $\bar{1}$ , вес простые формы пинакоиды)

динатами  $\varphi_{(001)} = 23^\circ 26'$ ;  $\rho_{(001)} = 17^\circ 03'$ ; за (100) — грань  $a$  с координатами  $\varphi_{(100)} = 85^\circ 03'$ ;  $\rho_{(100)} = 90^\circ 00'$ . Координаты граней  $x$ :  $\varphi_x = -124^\circ 23'$ ;  $\rho_x = 27^\circ 29'$ .

$$h:k:l = \left[ \frac{\operatorname{tg} 27^\circ 29' \sin (-124^\circ 23') - A}{B - A} \right] : \left[ \frac{\operatorname{tg} 27^\circ 29' [\sin 85^\circ 03' - (-124^\circ 23')] - C}{D - C} \right] : 1.$$

Из исходных данных вычисляются значения коэффициентов:  $A = 0,1220$ ;  $B = 1,227$ ;  $C = 0,2698$ ;  $D = 1,318$ .

Подстановка значений коэффициентов дает:

$$h:k:l = \left[ \frac{\operatorname{tg} 27^\circ 29' \sin (-34^\circ 23') - 0,1220}{1,105} \right] :$$

$$: \left[ \frac{\text{tg } 27^{\circ}29' (-\sin 29^{\circ}26') - 0,2698}{1,048} \right] : 1 = (-0,540) : (-0,500) : 1 = \\ = (-1) : (-1) : 2.$$

Символ грани  $x$  ( $\bar{1}\bar{1}2$ ).

### Расчет геометрических констант

Если известны параметры решетки, то геометрические константы кристалла в структурной установке могут быть вычислены по формулам, приведенным в разделе «Геометрические константы кристалла». Но можно их вычислить непосредственно по результатам гониометрического исследования кристаллов. В этом случае за исходные берутся координаты граней, для которых удалось установить символы. Вычисленные таким образом константы даются без индекса «0» для отличия их от констант, рассчитанных по структурным данным. Например, если для висмутита приведено два ряда цифр:  $a_0 : b_0 : c_0 = 0,9874 : 1 : 0,3523$  и  $a : b : c = 0,9862 : 1 : 0,3498$ , то первый из этих рядов рассчитан по параметрам элементарной ячейки, второй — по результатам гониометрии. Если морфологическая установка кристаллов и выбор единичной грани совпали со структурной установкой, то совпадут оба ряда цифр (в пределах точности работы).

Ниже даются формулы для расчета геометрических констант кристаллов по результатам гониометрии (Долливо-Добровольский, 1928).

*Гексагональная (и тригональная) сингонии.* Значение величины  $c$  вычисляется по значению углов  $\rho$  для граней с разными символами (табл. 9).

Таблица 9

Формулы для расчета  $c$  в тригональной и гексагональной сингониях

Символ	$c$
$hk\bar{l}$	$\frac{0,861 l}{\sqrt{h^2 + hk + l^2}} \text{tg } \rho$
$hh\bar{2}hl$	$0,5 \frac{l}{h} \text{tg } \rho$
$ho\bar{h}l$	$0,861 \frac{l}{h} \text{tg } \rho$

Пример. Измерены кристаллы прустита, на которых установлены грани ряда простых форм. Порядок расчета  $c$  по максимальному числу граней отражен в табл. 10.

Таблица 10

Расчет константы  $c$  для прустита

Символы	$\rho$	Расчет $c$	$c$
$12\bar{3}2$	$50^{\circ}50'$	$\frac{0,861 \cdot 2}{\sqrt{1+1 \cdot 2+4}} \operatorname{tg} 50^{\circ}50'$	0,8066
$10\bar{1}1$	$42^{\circ}52'$	$0,861 \operatorname{tg} 42^{\circ}52'$	0,7999
$11\bar{2}3$	$28^{\circ}11'$	$0,5 \frac{3}{1} \operatorname{tg} 28^{\circ}11'$	0,8036
Среднее . . .			0,8034

Геометрические константы:  $a : c = 1 : 0,8034$  (по структурным данным:  $a_0 : c_0 = 1 : 0,804$ ).

Тетрагональная сингония. Величина  $c$  вычисляется по значениям углов  $\rho$  граней с разными символами (табл. 11).

Таблица 11

Формулы для расчета  $c$  в тетрагональной сингонии

Символ	$c$
$hkl$	$\frac{l}{\sqrt{h^2+k^2}} \operatorname{tg} \rho$
$hhl$	$0,707 \frac{l}{h} \operatorname{tg} \rho$
$hol$	$\frac{l}{h} \operatorname{tg} \rho$
$okl$	$\frac{l}{k} \operatorname{tg} \rho$

Пример. Измерены кристаллы гаусманита. Результаты расчета по максимальному числу граней отражены в табл. 12.

Таблица 12

Расчет константы  $c$  для гаусманита

Символы	$\rho$	Расчет $c$	$c$
316	40°46'	$\frac{6}{\sqrt{9+1}} \operatorname{tg} 40^\circ 46'$	1,643
213	50°39'	$\frac{3}{\sqrt{4+1}} \operatorname{tg} 50^\circ 39'$	1,636
112	49°10'	$0,707 \cdot \frac{2}{1} \operatorname{tg} 49^\circ 10'$	1,636
203	47°29'	$\frac{3}{2} \operatorname{tg} 47^\circ 29'$	1,636
Среднее . . .			1,638

Геометрические константы  $a : c = 1 : 1,638$  (по структурным данным  $a_0 : c_0 = 1 : 1,639$ ).

*Ромбическая сингония.* Величины  $a$  и  $c$  вычисляются по координатам  $\varphi$  и  $\rho$  граней с установленными для них символами (табл. 13).

Таблица 13

Формулы для расчета  $a$  и  $c$  в ромбической сингонии

Символ	$a$	$c$
$hkl$	$\frac{h}{k} \operatorname{ctg} \varphi$	$\frac{l}{k} \operatorname{tg} \rho \cos \varphi$

*Пример.* Измерены кристаллы ферсмита. Результаты произведенного расчета  $a$  и  $c$  по максимальному числу граней приведены в табл. 14.

*Моноклинная сингония.* Для выполнения расчетов должна быть известна величина  $\rho_{(001)}$  — угол наклона грани (001), а также сферические координаты по возможности большего числа граней и их символы (табл. 15).

Сначала вычисляется величина  $c$ , затем —  $a$ . В формулы для расчета  $a$  входит угол  $\theta$ . Угол  $\theta_x$  для грани  $x$  вычисляется по соотношению

$$\operatorname{tg} \theta_x = \operatorname{tg} \rho_x \sin \varphi_x.$$

Расчет констант  $a$  и  $c$  для ферсмита

Символы	$\varphi$	$\rho$	Расчет $a$	$a$	Расчет $c$	$c$
131	41°06'	53°57'	$\frac{1}{3} \operatorname{ctg} 41^{\circ}06'$	0,3821	$\frac{1}{3} \operatorname{tg} 53^{\circ}57' \cos 41^{\circ}06'$	0,3449
111	69°06'	44°03'	$\operatorname{ctg} 69^{\circ}06'$	0,3819	$\operatorname{tg} 44^{\circ}03' \cos 69^{\circ}06'$	0,3449
120	52°48'	90°00'	$\frac{1}{2} \operatorname{ctg} 52^{\circ}48'$	0,3795	$\frac{l}{k} = 0$	
021	0°00'	34°36'	$\frac{h}{k} = 0$	—	$\frac{1}{2} \operatorname{tg} 34^{\circ}36' \cos 0^{\circ}00'$	0,3449
130	41°06'	90°00'	$\frac{1}{3} \operatorname{ctg} 41^{\circ}06'$	0,3821	$\frac{l}{k} = 0$	
			Среднее . . .	0,3814	Среднее . . .	0,3449

Геометрические константы:  $a : b : c = 0,3814 : 1 : 0,3449$ ; (по структурным данным  $a_0 : b_0 : c_0 = 0,383 : 1 : 0,353$ ).

Таблица 15

Формулы для расчета геометрических констант в моноклинной сингонии

Символы	$a$	$c$	$\beta$
$hkl$	$c \frac{h}{l} \cdot \frac{\cos \theta}{\sin(\theta - \rho_{(001)})}$	} $\frac{l}{k} \cdot \cos \varphi \cdot \operatorname{tg} \rho$	Вычислить нельзя
$okl$	Вычислить нельзя		
$hko$	$\frac{h}{k} \cdot \frac{\operatorname{ctg} \varphi}{\cos \rho_{(001)}}$	} Вычислить нельзя	$\beta = \rho + \nu$ ; ( $\cos \nu =$ $= \frac{c}{a} \cdot \frac{h}{l} \cos \rho$ ); $\beta = 90^{\circ} + \rho_{(001)}$
$hol$	$c \frac{h}{l} \cdot \frac{\cos \theta}{\sin(\theta - \rho_{(001)})}$		
001	Вычислить нельзя		

Пример. Измерены кристаллы бадделеита с гранями (001)  $\rho = 9^{\circ}08'$ . Вычисляются  $a$  и  $c$  по максимальному числу граней. Сначала рассчитывается  $c$ , затем находятся вспомогательные углы  $\theta$ . Далее вычисляется  $a$ . Результаты расчета приведены в табл. 16.

Расчет констант  $a$  и  $c$  для бадделента

Символы	$\varphi$	$\rho$	Расчет $c$	$c$	Расчет $\operatorname{tg} \theta_x$	$\theta_x$	Расчет $a$	$a$
112	53°18'	40°27'	$\frac{2}{1} \cos 53^\circ 18' \operatorname{tg} 40^\circ 27'$	1,019	$\operatorname{tg} 40^\circ 27' \sin 53^\circ 18'$	34°21'	$1,019 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\cos 34^\circ 21'}{(34^\circ 21' - 9^\circ 08')}$	0,9874
111	49°49'	57°39'	$\frac{1}{1} \cos 49^\circ 49' \operatorname{tg} 57^\circ 39'$	1,019	$\operatorname{tg} 57^\circ 39' \sin 49^\circ 49'$	50°20'	$1,019 \cdot \frac{1}{1} \cdot \frac{\cos 50^\circ 20'}{\cos (50^\circ 20' - 9^\circ 08')}$	0,9649
112	-35°24'	32°01'	$\frac{2}{1} \cos (-35^\circ 24') \cdot \operatorname{tg} 32^\circ 01'$	1,020	$\operatorname{tg} 32^\circ 01' \sin (-35^\circ 24')$	-19°55'	$1,020 \cdot \frac{-1}{2} \cdot \frac{\cos (-19^\circ 55')}{\sin (-19^\circ 55' - 9^\circ 08')}$	0,9877
111	-40°58'	53°28'	$\frac{1}{1} \cos (-40^\circ 58') \cdot \operatorname{tg} 53^\circ 28'$	1,018	$\operatorname{tg} 52^\circ 38' \sin (-40^\circ 58')$	-41°29'	$1,018 \cdot \frac{-1}{1} \cdot \frac{\cos (-41^\circ 29')}{\sin (-41^\circ 29' - 9^\circ 08')}$	0,9879
120	27°10'	90°00'	$\frac{l}{k} = 0$	—	—	—	$\frac{1}{2} \cdot \frac{\operatorname{ctg} 27^\circ 10'}{\cos 9^\circ 08'}$	0,9870
011	8°57'	45°54'	$\frac{1}{1} \cos 8^\circ 57' \operatorname{tg} 45^\circ 54'$	1,020	—	—	—	—
103	0°00'	26°59'	—	—	—	—	—	—
Среднее . . .				1,0192	Среднее . . .			0,9790

Угол  $\beta$ : 1) по грани (001) =  $90^\circ + 9^\circ 08' = 99^\circ 08'$ ; 2) по грани (103) =  $\rho_{(103)} + v$ ;  $\cos v = \frac{1,0192}{0,9730} \cdot \frac{1}{3} \cdot \cos 26^\circ 59'$ ;  $v = 71^\circ 52'$ ;  $\beta = 26^\circ 59' + 71^\circ 52' = 98^\circ 51'$ ; в среднем по граням (103) и (001)  $\beta = 98^\circ 59'$ .  
 По результатам вычислений:  $a : b : c = 0,9730 : 1 : 1,0192$ ;  $\beta = 98^\circ 59'$ ; (по структурным данным  $a_0 : b_0 : c_0 = 0,988 : 1 : 1,001$ ;  $\beta = 99^\circ 15'$ ).

*Триклинная сингония.* Вычисления выполняются с использованием коэффициентов  $A, B, C, D$ .

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \alpha &= -C; & \operatorname{ctg} \beta &= -A; \\ \cos \gamma &= \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta \cos \varphi_{(100)}; \\ a : 1 : c &= \left[ \frac{\sin \alpha (D - C)}{\sin \beta (B - A)} \right] : 1 : [\sin \alpha (D - C)]. \end{aligned}$$

Пример. Измерены кристаллы беллинджерита (см. рис. 12). На них для третьего пинакоида  $\varphi_{(001)} = 23^\circ 26'$ ; для первого пинакоида  $\varphi_{(100)} = 85^\circ 03'$ ; для единичной грани  $\varphi_e = 40^\circ 41'$ ;  $\rho_e = 62^\circ 02'$ .

Определяем геометрические константы (значения коэффициентов  $A, B, C, D$  вычислены на стр. 65):

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \alpha &= -0,2698; & \alpha &= -74^\circ 54' = 105^\circ 06'. \\ \operatorname{ctg} \beta &= -0,1220; & \beta &= -83^\circ 03' = 96^\circ 57'. \\ \cos \gamma &= \cos 105^\circ 06' \cdot \cos 96^\circ 57' - \sin 105^\circ 06' \cdot \sin 96^\circ 57' \cdot \cos 85^\circ 03' = \\ &= 0,0336 - 0,082 - 0,0491; & \gamma &= -87^\circ 09' = +92^\circ 51'. \\ a : 1 : c &= \left[ \frac{\sin 105^\circ 06' \cdot 1,048}{\sin 96^\circ 57' \cdot 1,105} \right] : 1 : [\sin 105^\circ 06' \cdot 1,048] = \\ &= 0,923 : 1 : 1,013. \end{aligned}$$

(По структурным данным  $\alpha = 105^\circ 06'$ ,  $\beta = 96^\circ 57'$ ,  $\gamma = 92^\circ 55'$ ;  $a_0 : b_0 : c_0 = 0,922 : 1 : 1,013$ ).

### Формулы для обратного расчета координат по символам

При измерении кристаллов часто обнаруживается разброс граней около некоторого их среднего положения, которому отвечают координаты сводного кристалла. Чем совершеннее кристалл и точнее исследование, тем ближе среднее положение граней к теоретическому. Чтобы оценить точность измерения и степень совершенства кристалла, производят обратное вычисление координат граней по символам, исходя либо из элементов кристалла, либо из координат его единичной грани.

Рассмотрим оба эти случая для разных сингоний.  
*Гексагональная (и тригональная) сингонии.*

Вычисления ведутся по формулам:

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = 0,5774 \frac{h+2k}{h}.$$

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \rho_x &= 0,5774 \operatorname{tg} \rho_e \cdot \frac{\sqrt{h^2+hk+k^2}}{l} = \\ &= 1,1548c \cdot \frac{\sqrt{h^2+hk+k^2}}{l}. \end{aligned}$$

Пример первый. Для кристаллов киновари  $\varphi_e = 30^\circ 00'$ ,  $\rho_e = 77^\circ 40'$ . Координаты грани  $x$  по символу  $(\bar{3}8\bar{5}10)$  составят:

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = 0,5774 \frac{-3+2 \cdot 8}{-3} = -2,5111; \quad \varphi_x = -21^\circ 43'.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,5774 \frac{\sqrt{9-24+64}}{10} \cdot \operatorname{tg} 77^\circ 40' = 1,849; \quad \rho_x = 61^\circ 36'.$$

Пример второй. Для тех же кристаллов  $a:c=1:2,2905$ . Рассчитаем  $\rho_x$  грани  $(\bar{3}8\bar{5}10)$ .

$$\operatorname{tg} \rho_x = 1,1548 \cdot 2,2905 \frac{\sqrt{9-24+64}}{10} = 1,853; \quad \rho_x = 61^\circ 38'.$$

*Тетрагональная сингония.* Вычисления ведутся по формулам:

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{h}{k};$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,7072 \frac{\sqrt{h^2+k^2}}{l} \cdot \operatorname{tg} \rho_e = c \frac{\sqrt{h^2+k^2}}{l}.$$

Пример первый. Для кристаллов рутила  $\varphi_e = 45^\circ 00'$ ,  $\rho_e = 42^\circ 23'$ . Определим координаты грани  $x$  по символу  $(323)$ :

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{3}{2} = 1,5; \quad \varphi_x = 56^\circ 19'.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,7072 \frac{\sqrt{9+4}}{3} \operatorname{tg} 42^\circ 23' = 0,7756; \quad \rho_x = 37^\circ 48'.$$

Пример второй. Для тех же кристаллов определено  $a:c=1:0,6440$ . Рассчитаем  $\rho_x$  грани  $(323)$ :

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,6440 \frac{\sqrt{9+4}}{3} = 0,7739; \quad \rho_x = 37^\circ 44'.$$

Пример третий. Для кристаллов неизвестного минерала (вид симметрии 4) определено  $a:c=1:2,00$ .

Координаты  $\rho_x$  и  $\varphi_x$  (границ  $\bar{1}\bar{3}\bar{2}$ ) будут:

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{-1}{+3} = -0,333; \quad \varphi_x = -18^\circ 27'.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 2,00 \frac{\sqrt{1+9}}{-2} = -3,162; \quad \rho_x = -72^\circ 27'$$

*Ромбическая сингония.* Вычисления ведутся по формулам:

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = \frac{k}{h} \operatorname{ctg} \varphi_e = a \frac{k}{h};$$

$$\operatorname{ctg} \rho_x = \frac{l}{h} \sin \varphi_x \frac{\operatorname{ctg} \rho_e}{\sin \varphi_e};$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = c \frac{k}{l} \cdot \frac{1}{\cos \varphi_x}.$$

*Пример первый.* Для измеренных кристаллов валентинита  $\varphi_e = 68^\circ 30'$ ,  $\rho_e = 49^\circ 49'$ . Определим координаты  $\varphi_x$ ,  $\rho_x$  грани (122):

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = \frac{2}{1} \operatorname{ctg} 68^\circ 30' = 0,7878; \quad \varphi_x = 51^\circ 46';$$

$$\operatorname{ctg} \rho_x = \frac{2}{1} \sin 51^\circ 46' \frac{\operatorname{ctg} 49^\circ 49'}{\sin 68^\circ 30'} = 1,426; \quad \rho_x = 35^\circ 02'.$$

*Пример второй.* Для тех же кристаллов установлено  $a : b : c = 0,3939 : 1 : 0,4339$ . Координаты  $\varphi_x$ ,  $\rho_x$  грани (122) будут:

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = 0,3939 \frac{2}{1} = 0,7878; \quad \varphi_x = 51^\circ 46'.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,4339 \frac{2}{2} \cdot \frac{1}{\cos 51^\circ 46'} = 0,7013; \quad \rho_x = 35^\circ 04'.$$

*Пример третий.* Для кристаллов неизвестного минерала (вид симметрии  $2/m$ ) вычислено  $a : b : c = 0,923 : 1 : 0,873$ . Определим координаты  $\varphi_x$ ,  $\rho_x$  грани ( $\bar{1}\bar{2}\bar{1}$ ):

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = 0,923 \frac{2}{-1} = -1,846; \quad \varphi_x = -28^\circ 28'.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,873 \frac{2}{-1} \cdot \frac{1}{\cos (-28^\circ 28')} = -1,986;$$

$$\rho_x = -63^\circ 16'.$$

*Моноклинная сингония.* При использовании координат единичной грани и известном угле наклона грани (001) расчет ведется по следующим формулам:

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{hB + (l-h) \cdot A}{kC}.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = \frac{kC}{l \cos \varphi_x}, \text{ где}$$

$$A = \operatorname{tg} \rho_{(001)}; \quad B = \operatorname{tg} \rho_e \sin \varphi_e; \quad C = \operatorname{tg} \rho_e \cos \varphi_e.$$

При использовании величин  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и угла  $\beta$  (или  $\rho_{(001)}$ ) расчет ведется по другим формулам:

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{1}{a} \cdot \frac{h}{k} \cdot \frac{1}{\cos \rho_{(001)}} + \frac{1}{c} \cdot \frac{l}{k} \cdot \frac{1}{\operatorname{ctg} \rho_{(001)}};$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = c \frac{k}{l} \cdot \frac{1}{\cos \varphi_x}.$$

Пример первый. Для кристаллов джемсонита установлено  $\varphi_e = 52^\circ 50'$ ;  $\rho_e = 19^\circ 20'$ ;  $\rho_{(001)} = 1^\circ 24'$ . Координаты  $\varphi_x$ ,  $\rho_x$  грани с символом (211) будут:

$$\operatorname{tg} \varphi_x = \frac{(-2) \cdot 0,2796 + (1+2) \cdot 0,0419}{1 \cdot 0,2119} = -2,244$$

$$\varphi_x = -65^\circ 58'$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = \frac{1 \cdot 0,2119}{1 \cdot \cos(-65^\circ 58')} = +0,520; \quad \rho_x = +27^\circ 07'.$$

Пример второй. Для тех же кристаллов определено  $a : b : c = 0,8316 : 1 : 0,2130$ . Для грани с символом  $(\bar{2}31)$ :

$$\operatorname{tg} \varphi_x = -0,802;$$

$$\varphi_x = -38^\circ 38'.$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = 0,2130 \cdot \frac{3}{1} \cdot \frac{1}{\cos(-38^\circ 38')} = +0,8181;$$

$$\rho_x = +39^\circ 17'.$$

*Триклинная сингония.* При использовании сферических координат единичной грани расчеты ведутся по формулам (расчеты коэффициентов  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$  показаны на стр. 65):

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = \frac{kD + (l-k)C}{\sin \varphi_{(100)} [hB + (l-h)A]} + \operatorname{ctg} \varphi_{(100)};$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = \frac{hB + (l-h)A}{l \sin \varphi_x}.$$

Если за исходные берутся геометрические константы кристалла, расчеты ведутся по формулам:

$$\operatorname{ctg} \varphi_x = \frac{(kc - l \cos \alpha) a \sin \beta}{(hc - la \cos \beta) \sin \alpha \sin \varphi_{(100)}} + \operatorname{ctg} \varphi_{(100)};$$

$$\operatorname{tg} \rho_x = \frac{hc - la \cos \beta}{la \sin \beta \sin \varphi_x} = \frac{kc - l \cos \alpha}{l \sin \alpha \sin (\varphi_{(100)} - \varphi_x)}.$$

Для пользования этими формулами кристаллам должна быть придана установка, описанная выше.

Пример первый. Для кристаллов беллинджерита (см. рис. 12) установлено:  $\varphi_e = 40^\circ 14'$ ;  $\rho_e = 62^\circ 02'$ ; за (100) принята грань  $a$  с величиной  $\varphi_{(100)} = 85^\circ 03'$ . Определим координаты  $\varphi_x$ ,  $\rho_x$  грани  $T$  с символом  $(\bar{1}\bar{2}1)$ , используя значения коэффициентов  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $D$ :

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \varphi_x &= \frac{(-2) \cdot 1,318 + [1 - (-2)] \cdot 0,2698}{\sin 85^\circ 03' [1 \cdot 1,227 + (1 - 1) \cdot 0,1220]} + \operatorname{ctg} 85^\circ 03' = \\ &= -1,408; \\ \varphi_x &= -35^\circ 23' = 324^\circ 37' = 144^\circ 37'. \\ \operatorname{tg} \rho_x &= \frac{1 \cdot 1,227 + [1 - 1] \cdot 0,1220}{1 \cdot \sin 144^\circ 37'} = 2,119; \\ \rho_x &= 64^\circ 44'. \end{aligned}$$

Пример второй. Для тех же кристаллов по серии граней определено  $a : b : c = 0,923 : 1 : 1,013$ ;  $\alpha = 105^\circ 06'$ ;  $\beta = 96^\circ 57'$ ; для грани (100)  $\varphi_{(100)} = 85^\circ 03'$ . Определим координаты  $\varphi_x$ ,  $\rho_x$  для грани  $V$  с индексом  $(0\bar{1}2)$ :

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \varphi_x &= \frac{[(-1) \cdot 1,013 - 2 \cos 105^\circ 06'] \cdot 0,923 \sin 96^\circ 57'}{(0 - 2 \cdot 0,923 \cos 96^\circ 57') \sin 105^\circ 06' \sin 85^\circ 03'} + \\ &+ \operatorname{ctg} 85^\circ 03' = -2,099 + 0,087 = -2,012. \\ \varphi_x &= -26^\circ 22' = 333^\circ 38' = 153^\circ 38'. \\ \operatorname{tg} \rho_x &= \frac{0 - 2 \cdot 0,923 \cos 96^\circ 57'}{2 \cdot 0,923 \sin 96^\circ 57' \sin 153^\circ 38'} = 0,2745. \\ \rho_x &= 15^\circ 21'. \end{aligned}$$

### Пример вычисления кристаллов кальцитита

Предположим, что для кристаллов кальцитита (тетрагональной сингонии) впервые выполнена их гониометрия. Кроме того, рентгеновскими методами определены параметры элементарной ячейки:  $a_0 = 15,31 \pm 0,03$ ,  $c_0 = 10,19 \pm 0,03$  Å.

Выбор единичной грани. Исходя из параметров элементарной ячейки, вычисляем  $\rho_e$ . Оно равно  $43^\circ 14'$ . Как обычно, для тетрагональной сингонии  $\varphi_e = 45^\circ 00'$ . По данным табл. 8 такие грани отсутствуют на измеренных кристаллах. Поэтому следует проверить правильность приданной кристаллам установки. Для этого по рентгеновским монокристалльным данным определено положение осей  $a$  и  $b$  по отношению к граням кристалла. Как оказалось, избранная установка совпала со структурной.

Расчет символов граней. Расчет выполняется по координатам сводного кристалла (табл. 8).

Для грани  $z$  отношение

$$h:k:l = [\sin 26^\circ 29'] : [\cos 26^\circ 29'] : \left[ 0,707 \operatorname{tg} 43^\circ 14' \frac{1}{\operatorname{tg} 26^\circ 23'} \right] = \\ = 0,4459 : 0,8950 : 1,309 = 1 : 1,92 : 2,93. \text{ Символ (123).}$$

Для грани  $y$  отношение

$$h:k:l = [\sin 44^\circ 54'] : [\cos 44^\circ 54'] : \left[ \frac{0,707 \operatorname{tg} 43^\circ 14'}{\operatorname{tg} 24^\circ 59'} \right] = \\ = 0,7059 : 0,7083 : 1,394 = 1 : 1 : 1,97. \text{ Символ (112).}$$

Для грани  $\lambda$  отношение

$$h:k:l = [\sin 26^\circ 23'] : [\cos 26^\circ 23'] : \left[ \frac{0,707 \operatorname{tg} 43^\circ 14'}{\operatorname{tg} 56^\circ 04'} \right] = \\ = 0,4443 : 0,8958 : 0,4370 = 1 : 2,04 : 1. \text{ Символ (121).}$$

Расчет геометрических констант. Отношение осей с использованием символов граней и координат сводного кристалла определяется по табл. 17.

Таблица 17

Расчет константы  $c$  для кальцитрита

Грани	Символы	$\rho$	Расчет $c$	$c$
$z$	123	$26^\circ 23'$	$\frac{3}{\sqrt{1+4}} \operatorname{tg} 26^\circ 23'$	0,6655
$y$	112	$24^\circ 59'$	$\frac{2}{\sqrt{1+1}} \operatorname{tg} 24^\circ 59'$	0,6589
$\lambda$	121	$56^\circ 04'$	$\frac{1}{\sqrt{1+4}} \operatorname{tg} 56^\circ 04'$	0,6646
Среднее . . .				0,6630

Отношение осей  $a : c = 1 : 0,6630$ .

Расчет координат граней по символам. Вычисления производятся исходя из найденного среднего значения  $c$  (табл. 18).

Таблица 18

Расчет координат граней для кальцитита

Исходный символ	$\text{ctg } \varphi$	$\varphi$	$\text{tg } \rho$	$\rho$
123	$\frac{1}{2}$	26°34'	$0,6630 \frac{\sqrt{1+4}}{3}$	26°32'
112	$\frac{1}{1}$	45°00'	$0,6630 \frac{\sqrt{1+1}}{2}$	25°20'
121	$\frac{1}{2}$	26°34'	$0,6630 \frac{\sqrt{1+4}}{1}$	56°16'

### Методы графического вычисления кристаллов

Графические методы вычисления кристаллов менее точны, чем расчеты по формулам. Однако несомненным достоинством этих методов является их наглядность и простота. Графическое вычисление кристаллов производится либо по гномонической, либо по стереографической проекции. Предпочтение должно быть отдано расчетам по гномонической проекции.

*Вычисления по гномонической проекции* (по методу В. Гольдшмидта)\*. Покажем их на примере кристаллов кальцитита. Вычисления производятся поэтапно.

1. Строят гномоническую проекцию (на рис. 13 для кальцитита с целью уменьшения площади чертежа воспроизведена только одна четвертая часть такой проекции; фактически развитые грани показаны жирными точками).

\* Графические методы на базе гномонической проекции разрабатывались также О. М. Аншелесом (Аншелес, 1934). Особенностью методики В. Гольдшмидта является использование в гониометрии только гномонической проекции. О. М. Аншелес оригинально использовал гномоническую проекцию при графическом определении символов (метод основного параллелограмма, метод отрезка прямой и другие). — *Прим. ред.*



для грани  $y$   $h = \frac{1}{2}$ ,  $k = \frac{1}{2}$ ; в итоге символ будет (112);

для грани  $z'$   $h = \frac{1}{3}$ ,  $k = \frac{2}{3}$ ; в итоге символ будет (123);

для грани  $z''$   $h = \frac{2}{3}$ ,  $k = \frac{1}{3}$ ; в итоге символ будет (213).

На рис. 13 для пояснения идеи расчетов кружками дополнительно показаны возможные положения граней и их символы. Для примера дан также символ вертикальной грани  $x$ , определяемый следующим образом: из любой точки луча опускают перпендикуляры на оси  $a$  и  $b$  и измеряют отрезки на этих осях; если перпендикуляры опущены из точки  $\zeta'$ , то  $h=1$ ,  $k=2$ ; а  $hk0$  во всех случаях будет (120).

7. Производят (если это нужно) обратный расчет координат по символам. Угол  $\phi$  измеряется транспортиром. Угол  $\rho$  рассчитывают по формуле:  $\text{tg } \rho = \frac{l}{50}$ . Величину  $l$  (в мм) измеряют линейкой на проекции.

8. Производят (если это нужно) расчет отношения осей по величинам  $h_0$  и  $k_0$  (в мм). Это единичные отрезки на осях  $a$  и  $b$ . Их измеряют линейкой на проекции. Формулы расчета для ряда сингоний:

для тетрагональной —  $c = 0,02 h_0$ ;

для гексагональной (и тригональной) —  $c = 0,015 h_0$   
(по грани 1011) =  $0,01 h_0$  (по грани  $11\bar{2}1$ );

для ромбической —  $c = 0,02 k_0$ ;  $a = \frac{k_0}{h_0}$ .

В других сингониях расчет трудно выполним по проекциям.

*Вычисления по стереографической проекции.* Расчеты можно выполнять в двух вариантах — по методу двойных отношений и по методу развития зон.

Расчеты по методу двойных отношений косинусов (метод Вульфа) выполняются поэтапно:

1. При помощи сетки Вульфа строят стереографическую проекцию.

2. Выбирают единичную грань или наносят ее по координатам  $\phi_e$  и  $\rho_e$ . В данном случае по результатам рентгенометрии  $\phi_e = 45^\circ$ ;  $\rho_e = 43^\circ 14'$ .

3. Определяют отношение осей по формуле:

$$a:b:c = a:1:c = \frac{\cos e_b}{\cos e_a} : 1 : \frac{\cos e_b}{\cos e_c}.$$

Здесь  $e_a, e_b, e_c$  — углы между полюсом единичной грани и точками пересечения со сферой проекций осей  $a, b, c$ .

Для данного примера кальцитрита  $e_a=61^\circ$ ;  $e_b=61^\circ$ ;  $e_c=43^\circ 14'$ . Отсюда:

$$a:1:c = \frac{\cos 61^\circ}{\cos 61^\circ} : 1 : \frac{\cos 61^\circ}{\cos 43^\circ 14'} = 1:1:0,6651.$$

Отношение осей 1 : 0,6651.

4. Определяют символ граней по формуле:

$$h:k:l = \frac{\cos x_a}{\cos e_a} : \frac{\cos x_b}{\cos e_b} : \frac{\cos x_c}{\cos e_c}.$$

Здесь  $x_a, x_b, x_c$  — углы между полюсом какой-либо грани  $x$  и точками пересечения осей  $a, b, c$  со сферой проекции.

Так, для граней  $y$   $y_a=72^\circ 15'$ ;  $y_b=72^\circ 15'$ ;  $y_c=25^\circ$ . Тогда

$$\begin{aligned} h:k:l &= \frac{\cos 72^\circ 15'}{\cos 61^\circ} : \frac{\cos 72^\circ 15'}{\cos 61^\circ} : \frac{\cos 25^\circ}{\cos 43^\circ 14'} = \\ &= 0,6273:0,6273:1,244 = 1:1:2. \end{aligned}$$

Символ грани  $y$  (112).

Расчеты по методу развития зон (метод Вейсса).

1. При помощи сетки Вульфа строят стереографическую проекцию и развивают на ней по возможности большее количество зон с тем, чтобы проекция каждой из граней кристалла оказалась бы на пересечении двух зон.

2. Определяют символ зон по символам каких-либо двух граней, лежащих в этой зоне.

3. По символам пересекающихся зон определяют символы граней.

Идею таких расчетов проиллюстрируем простым примером (рис. 14). Определим символ грани  $x$  на пересечении двух зон. Сначала определяют символ зон.

Для зоны  $e-a$  пишут два раза символ грани  $e$ , под ним два раза символ грани  $a$ , отбрасывают крайние

цифры справа и слева, производят умножение крест на крест\*:

$$0|11 \quad 01|1$$

$$1|00 \quad 10|0$$

$$h : k : l = (1 \cdot 0 - 0 \cdot 1) : (1 \cdot 1 - 0 \cdot 0) : (0 \cdot 0 - 1 \cdot 1).$$

Символ зоны  $e - a$   $[01\bar{1}]$ .

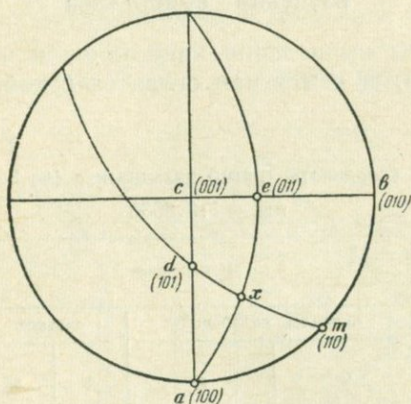


Рис. 14. Нахождение символов граней по символам зон.

Для зоны  $d - m$  расчет производится в том же порядке

$$1|01 \quad 10|1$$

$$1|10 \quad 11|0$$

$$h : k : l = (0 \cdot 0 - 1 \cdot 1) : (1 \cdot 1 - 0 \cdot 1) : (1 \cdot 1 - 1 \cdot 0).$$

Символ зоны  $d - m$   $[\bar{1}11]$ .

Символ грани  $x$  определяется по той же схеме по символам зон  $e - a$  и  $d - m$ :

$$0|\bar{1}\bar{1} \quad 01|\bar{1}$$

$$\bar{1}|\bar{1}1 \quad \bar{1}1|1$$

$$h : k : l = (1 \cdot 1 - \bar{1} \cdot 1) : (\bar{1} \cdot \bar{1} - 1 \cdot 0) : (0 \cdot 1 - \bar{1} \cdot 1).$$

Символ грани  $x$   $(211)$ .

\* Надо иметь в виду, что в гексагональных кристаллах перекрестное умножение требует предварительного пересчета индексов на редуцированные (см. Аншелес, 1954). — Прим. ред.

При выполнении таких расчетов иногда (например, для случая изучавшихся кристаллов кальцитита) такой путь определения символов граней бывает малоудобным. В этих случаях удобнее пользоваться другими методами (двойного отношения косинусов и т. д.).

### Форма представления результатов гониометрического изучения кристаллов

Результаты вычисления кристаллов и часть первичных результатов измерения сводятся в табл. 19).

Таблица 19  
Сферические координаты граней кальцитита (по 3 кристаллам)

$$a:c = 1:0,6630$$

Буквенные обозначения граней	Символ	Число измеренных граней	Измеренные				Вычисленные	
			пределы колебаний		среднее		Ф	Р
			Ф	Р	Ф	Р		
<i>a</i>	010	12	0°21'—0°00'	89°50'—90°03'	0°06'	89°58'	0°00'	90°00'
<i>m</i>	110	9	44°59'—44°48'	90°08'—89°56'	44°55'	90°01'	45°00'	90°00'
<i>z</i>	123	7	26°37'—26°19'	26°37'—26°10'	26°29'	26°23'	26°34'	26°32'
<i>y</i>	112	4	45°04'—44°47'	25°30'—24°50'	44°54'	24°59'	45°00'	25°20'
<i>λ</i>	121	17	26°43'—26°29'	56°20'—55°40'	26°23'	56°04'	26°34'	56°16'

В заголовке таблицы указывается число измерявшихся кристаллов, в столбце 3 — число фактически замеренных граней для каждой простой формы. В столбцах 4, 5, 6, 7 координаты приведены к первому элементарному сектору, здесь даны пределы колебаний долготы и полярного расстояния граней и координаты сводного кристалла. В столбце 2 указаны символы граней, а в столбце 8 и 9 — координаты, рассчитанные по этим символам. Иногда вместо вычисленных значений  $\phi$  и  $\rho$  в столбцах 8 и 9 приводят координаты граней по справочникам (W. Goldschmidt, 1897; «Минералы», 1960; Дэна, 1951—1954). Под заголовком таблицы даются геометрические константы кристалла.

Помимо указанных выше, в некоторых справочниках и статьях иногда приводятся дополнительные сведения:

1) обратное отношение  $p_0 : q_0 : r_0$ , в котором величины  $p_0, q_0, r_0$  соответственно равны  $\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}$ , причем  $r_0$  приравняется к единице; для кристаллов ромбической и моноклинной сингоний даются, кроме того, обратные отношения, вычисленные для других установок кристалла ( $q_1 : r_1 : p_1$  и  $r_2 : p_2 : q_2$ );

2) константы гномонической проекции кристалла  $p'_0, q'_0, x'_0, y'_0$  и др;

3) углы  $\lambda = (180^\circ - \alpha), \mu = (180^\circ - \beta), \nu = (180^\circ - \gamma)$ ;

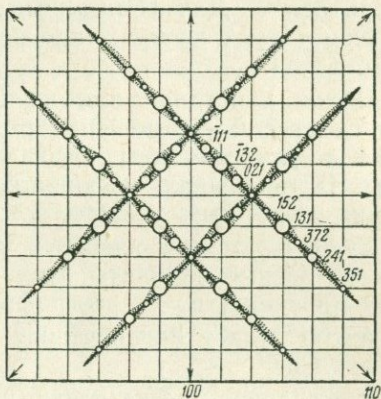
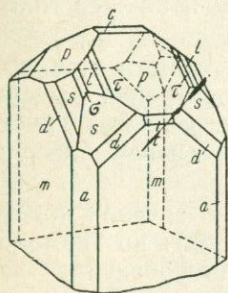


Рис. 15. Кристалл везувияна и проекция его граней (по Курбатову, 1946).

4) углы  $A, B, C$ , причем  $A$  — угол между гранью и  $(100)$ ,  $B$  — между гранью и  $(010)$ ,  $C$  — между гранью и  $(001)$ .

Вычисление этих величин не является обязательным, оно необходимо только при выполнении некоторых специальных расчетов.

В некоторых случаях целесообразно привести значения  $\phi$  и  $\rho$  граней для кристалла в других установках.

Иногда для наглядности удобно иллюстрировать результаты измерения графиками, как это сделано для кристаллов везувияна (рис. 15). На нем в гномонической проекции кружками показано положение всех граней, дающих четкие отблески, а серией точек — положение вивиналей и других поверхностей ограничения кристаллов.

## ЧЕРЧЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ

### Методы изображения кристаллов

Изображение кристаллов, сделанное по результатам их гониометрии, обычно дают в двух проекциях — ортогональной и перспективной (аксонометрической). В ортогональной проекции вычерчивают вид на кристалл сверху вдоль оси *c*. Для гемиморфных кристаллов в той же проекции дают изображение верхней и нижней головки кристаллов.

Облик кристалла при черчении схематизируют, но его габитус и соотношение размеров граней выдерживают в среднем таким же, как и на реальных кристаллах. Часть мелких, несущественных граней для упрощения может быть исключена.

Существуют два основных метода черчения кристаллов (и разные варианты этих методов): по гномонической проекции, по стереографической проекции.

Автор отдает предпочтение работе с гномонической проекцией.

Все операции по черчению кристаллов требуют аккуратного исполнения. Работа с использованием гномонической проекции должна вестись на хорошей чертежной бумаге на листах размером не менее  $50 \times 50$  см, допускающей исправления и дополнения чертежа. При черчении используют набор больших треугольников и линеек длиной до 50 см и более (или специальные треугольники и чертежный стол конструкции В. Гольдшмидта) и хорошо отточенные твердые и мягкие карандаши. Черчение кристалла по стереографической проекции выполняется на кальке.

Оптимальный размер чертежа кристалла — около 5—10 см в ширину. При меньших размерах чертежа значительно усложняется работа по вычерчиванию кристалла и точному изображению его граней. В дальнейшем размер готового чертежа может быть уменьшен фотографированием.

## Черчение кристаллов по гномонической проекции

Сначала у левого обреза листа ватмана выше его середины наносят гномоническую проекцию кристалла (рис. 16, *а*). Затем по гномонической проекции чертят в ортогональной проекции верхнюю головку кристалла — вид на кристалл сверху вдоль оси *c* (см. рис. 16, *б*). От него переходят к пространственному изображению кристалла (см. рис. 16, *в*). Все эти операции покажем сначала на простом примере черчения кубооктаэдров флюорита.

Гномоническую проекцию строят по значениям углов  $\varphi$  и  $\rho$ . Для куба  $\varphi = 0^\circ 00'$ ,  $\rho = 90^\circ 00'$ ; для октаэдра  $\varphi = 45^\circ 00'$ ;  $\rho = 54^\circ 44'$ . Сначала наносят проекции граней в первом секторе. Путем симметричных преобразований находят проекции всех других граней, их получилось 14. Номера нижних граней отмечены штрихами.

*Черчение ортогональной проекции* (вид кристалла сверху). Масштаб изображения произволен. Направление ребер между каждой парой граней находят, соединяя прямой линией проекции этих двух граней на гномонической проекции. Перпендикуляр к этой линии является направлением ребра.

Начнем черчение с верхней грани 5. Чтобы провести ребро между гранями 5 и 8, соединяют прямой линией точки 5 и 8 на гномонической проекции. Перпендикуляр к этой линии и есть направление ребра между гранями 5 и 8. Длина ребра и его положение на листе бумаги произвольны.

Проведем теперь ребро между гранями 5 и 9. Для этого соединяем прямой линией точки 5 и 9 на гномонической проекции. Перпендикуляр к ней отвечает ребру между гранями 5 и 9. Его положение на листе бумаги и длина произвольны.

Для определения ребра между гранями 5 и 10 соединяем прямой линией точки 5 и 10 на гномонической проекции и проводим перпендикуляр к ней. Аналогично находим ребро между гранями 5 и 7. Все ребра должны быть одинаковой длины. Тогда грань 5 будет иметь на чертеже, как и в действительности, форму квадрата.

Грань 5 очерчена. Теперь проводим ребра между гранями 7, 8, 9, 10. Для получения ребра между гранями 7 и 8 соединяют точки 7 и 8 на гномонической проекции. Перпендикуляр к этой линии отвечает направ-

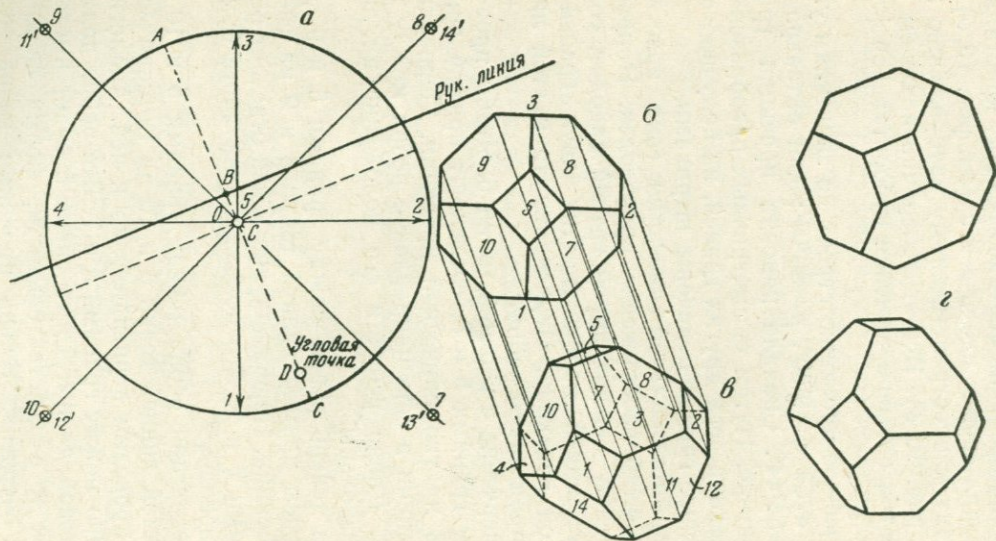


Рис. 16. Черчение кристалла по его гномонической проекции:  
*a* — гномоническая проекция кристалла; *б* — чертёж в ортогональной проекции; *в* — чертёж в аксонометрической проекции; *г* — окончательный чертёж кристалла.

лению ребра между гранями 7 и 8. Аналогично находим направление ребер между всеми другими гранями октаэдра. Все ребра проводят одинаковой длины.

Перейдем теперь к вертикальной грани 2. Ребра вертикальных граней находят иначе, чем это было описано выше. Чтобы провести ребро между вертикальной гранью 2 и наклонной гранью 8, проводим перпендикуляр к лучу № 2 на гномонической проекции. Этот перпендикуляр и покажет искомое направление ребра.

Возьмем грань 3. Чтобы провести ребро между гранями 3 и 8, надо восстановить перпендикуляр к лучу 3 на гномонической проекции. Направление этого перпендикуляра и будет отвечать направлению искомого ребра.

Находим теперь ребро между верхними и нижними гранями кристалла. Чтобы провести ребро между гранями 7 и 11, соединяют прямой линией точки 7 и 11 на гномонической проекции. Перпендикуляр к этой линии даст направление ребра между гранями 7 и 11. Тем же способом находят ребра между всеми другими верхними и нижними гранями.

*Черчение кристалла в аксонометрической проекции (метод В. Гольдшмидта).* Сначала производят ряд вспомогательных построений (на гномоническую проекцию наносят так называемую угловую точку и проводят руководящую линию):

1) проводят диаметр  $AC$  под углом  $20^\circ$  к вертикальному диаметру;

2) откладывают отрезок  $DC$ , равный  $\frac{1}{6}$  части радиуса  $r$  (точка  $D$  называется угловой точкой);

3) на диаметре  $AC$  откладывают отрезок  $DB$ , равный  $r$ ;

4) через точку  $B$  проводят через весь чертеж прямую линию, перпендикулярную диаметру  $AC$  (руководящую линию);

5) при помощи двух треугольников проводят через все вершины ортогональной проекции кристалла (через все углы «головки» кристалла) линии, перпендикулярные руководящей линии (вспомогательные перпендикуляры).

Теперь можно приступить к черчению кристалла в перспективной проекции.

Очертим грань 5. Начнем с ребра между гранями 5 и 7. Чтобы его провести, сначала соединяют прямой линией на гномонической проекции точки 5 и 7 и про-

должают ее до пересечения с руководящей линией. Точку пересечения \* соединяют с угловой точкой. Перпендикуляр к этой линии даст направление искомого ребра. На чертеже ребро проводят не произвольно, а между теми вспомогательными перпендикулярами, которые проходят через соответствующие данному ребру вершины кристалла. Аналогично проводят ребра между гранями 5 и 10, 5 и 9, 5 и 8.

Очертим грань 7. Верхнее ребро между гранями 5 и 7 уже проведено. Способ проведения ребер между гранями 7 и 10, 7 и 8, 7 и 11 аналогичен уже описанному выше. По-иному проводят ребра между гранью 7 и вертикальными гранями 1 и 2.

Начнем с ребра между гранями 1 и 7. При помощи двух треугольников или рейсшины перемещают луч 1 параллельно самому себе так, чтобы он прошел через точку 7 и пересек руководящую линию. Соединяют эту точку пересечения с угловой точкой. Перпендикуляр к этой линии даст искомое направление ребра между гранями 7 и 1.

Проведем ребро между гранями 7 и 2. Для этого перемещают луч 2 параллельно самому себе так, чтобы он прошел через точку 7 и затем пересек руководящую линию. Точку пересечения соединяют с угловой точкой. Перпендикуляр к этой прямой линии отвечает искомому направлению ребра между гранями 2 и 7.

Аналогичным способом очерчивают все другие грани кристалла. В результате получают пространственное изображение кристалла — вид на него сверху приблизительно под углом  $10-20^\circ$  и сбоку под углом  $20^\circ$ . Но по условиям черчения кристалл на рис. 16, в наклонен влево. Для придания правильной ориентировки весь чертеж надо развернуть так, чтобы вспомогательные перпендикуляры приняли вертикальное положение.

Чертеж кристалла в правильной ориентировке дан на рис. 16, г. Следует обратить внимание на то, что на нем «головка» кристалла получается повернутой косо. Изображение кристалла кальциррита, полученное по этому способу, приведено на рис. 17.

---

\* Изредка при больших углах  $\rho$  она может оказаться на расстоянии 50 см и даже более от центра проекций. Поэтому весь чертеж надо выполнять на большом листе ватмана.

При черчении может оказаться, что изображение кристалла получилось недостаточно наглядным. В этом случае можно произвольно изменить ракурс, под которым кристалл рассматривается. Для этого следует изменить положение угловой точки — перенести ее вправо или влево, переместить вверх или вниз и изменить положение руководящей линии. Остальные операции выполняются без изменений.

### Черчение кристаллов по стереографической проекции

Черчение кристалла производится на кальке. У левого обреза листа кальки при помощи сетки Вульфа наносят стереографическую проекцию граней (рис. 18). Затем чертят кристалл в ортогональной проекции и переходят к получению его пространственного изображения. Все операции покажем на примере кубооктаэдра флюорита.

*Черчение ортогональной проекции.* Сначала наносят на чертеж положение вертикальных граней (см. рис. 18). Они изображаются в виде прямых линий. Направление каждой линии есть перпендикуляр к радиусу сетки Вульфа, который проходит через проекцию данной вертикальной грани на сетке Вульфа. Направление ребер между каждой парой наклонных граней определяется так: поворотом кальки ставят на один меридиан сетки Вульфа проекции граней; линия экватора на сетке Вульфа отвечает направлению ребра между этими гранями. Следует иметь в виду, что проекции верхних и нижних граней ставятся не на один, а на два симметричных меридиана.

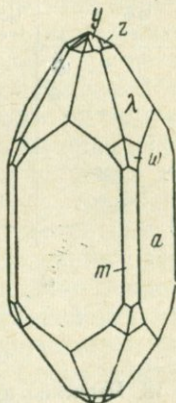
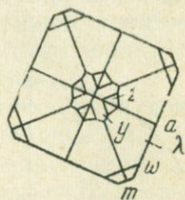


Рис. 17. Окончательный чертеж кристалла кальцитита в ортогональной и аксонометрической проекциях.

Масштаб изображения кристалла произволен. Все одинаковые ребра при изображении идеально развитого кристалла должны иметь одинаковую длину.

*Черчение кристалла в аксонометрической проекции.*  
Существует несколько вариантов черчения (Флинт,

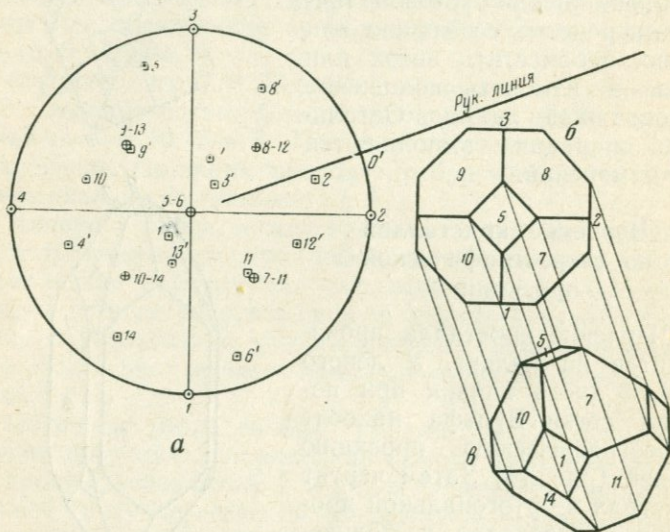


Рис. 18. Черчение кристалла по стереографической проекции:  
а — стереографическая проекция кристалла; б — чертеж в ортогональной проекции; в — чертеж в аксонометрической проекции.

1956; Татарский, 1934 и др.). Метод В. Б. Татарского состоит из ряда дополнительных и основных операций. Сначала выполняют дополнительные построения.

1. На кальке со стереографической проекцией на основном круге ставят точку  $O'$  с долготой  $\varphi = 340^\circ$ .

2. Кальку поворачивают на сетке Вульфа так, чтобы точка  $O'$  совпала с нижним полюсом сетки Вульфа.

3. Не меняя этого положения кальки, переносят по широтным дугам проекции всех граней вправо на  $80^\circ$ . Верхние грани при этом могут частично перейти вниз. Нижние грани будут двигаться влево и также могут перейти на другую сторону основного круга проекций. Отмечают новые положения всех граней квадратиками, причем грани, оказавшиеся внизу, помечают штрихами. Все эти проекции называются новыми проекциями граней.

4. Проводят руководящую линию через центр основного круга проекций и точку  $O'$ .

5. Перпендикулярно руководящей линии проводят через каждый угол на чертеже «головки» кристалла прямую линию. Получают, таким образом, серию параллельных линий. Их называют вспомогательными перпендикулярами.

Теперь можно приступить к построению аксонометрической проекции кристалла. Направление ребра между любой парой граней всегда определяют одним и тем же способом: поворотом кальки ставят на сетке Вульфа на один меридиан новые проекции этих граней, тогда линия экватора будет отвечать направлению искомого ребра. Ребро проводят не по всей длине кальки, а между соответствующими вспомогательными перпендикулярами. Затем вновь поворачивают кальку над сеткой Вульфа и ставят на один меридиан новые проекции следующей пары граней. Ребро между этими гранями также проводят параллельно экватору сетки Вульфа. Затем вновь поворачивают кальку над сеткой Вульфа и ставят на один меридиан новые проекции еще одной пары граней и т. д. Как обычно, следует помнить, что новые проекции нижней и верхней граней ставят не на один меридиан, а на два симметричных меридиана. Изображение кристалла, полученное таким способом, на рис. 18 идентично чертежу на рис. 16.

При желании можно изобразить кристалл в другом ракурсе, сместив точку  $O'$  и сделав перенос проекций граней не на  $80^\circ$ , а на иной угол.

## ГЛАВА 7.

### ПОВОРОТЫ И СМЕНА УСТАНОВКИ КРИСТАЛЛОВ

#### Поворот кристалла и вычисление новых координат граней\*

Пусть на гониометре измерены кристаллы барита, вытянутые вдоль оси  $a$ . Кристаллы юстировались по граням зоны  $[100]$ , т. е. ось  $a$  была совмещена с осью  $\phi$

\* Общее решение задачи дано в работе О. М. Аншелеса (1939).—  
*Прим. ред.*

гонометра. В этой установке для всех кристаллов получены значения углов  $\varphi$  и  $\rho$ , вычислены их средние значения. Требуется рассчитать координаты граней для кристалла в стандартной установке. Для этого выполняются ряд операций.

1. На сетке Вульфа разворачивают стереографическую проекцию кристалла так, чтобы новый полюс (в данном случае — проекция пинакоида  $c$  [001]) лег на вертикальный диаметр сетки Вульфа, на его переднюю половину. Соответственно этому повороту исправляют значения углов  $\varphi$ . Координаты  $\varphi_{\text{изм}}$  и  $\rho_{\text{изм}}$  для повернутого таким образом кристалла барита даны в табл. 20 (столбцы 2, 3). Новый полюс (грань  $c$ ) сейчас имеет координаты  $\varphi_{\text{п}} = -90^\circ$ ;  $\rho_{\text{п}} = 90^\circ$ .

2. Пересчитывают долготы граней по равенству  $\varphi' = \varphi_{\text{изм}} - \varphi_{\text{п}}$  (см. табл. 20, столбец 4).

Таблица 20

Перечисление сферических координат к новому полюсу

Обозначение граней	До поворота		Промежуточные величины		После поворота	
	$\varphi_{\text{изм}}$	$\rho_{\text{изм}}$	$\varphi'$	$\varphi''$	$\varphi_{\text{нов}}$	$\rho_{\text{нов}}$
1	2	3	4	5	6	7
<i>a</i>	$\infty$	$0^\circ 00'$	—	—	$270^\circ 00'$	$90^\circ 00'$
<i>b</i>	$0^\circ 00'$	$90^\circ 00'$	$+90^\circ 00'$	$+90^\circ 00'$	$0^\circ 00'$	$90^\circ 00'$
<i>c</i>	$90^\circ 00'$	$90^\circ 00'$	$180^\circ 00'$	—	$\infty$	$0^\circ 00'$
<i>o</i>	$37^\circ 17'$	$90^\circ 00'$	$127^\circ 17'$	$+90^\circ 00'$	$0^\circ 00'$	$52^\circ 43'$
<i>m</i>	$0^\circ 00'$	$39^\circ 11'$	$+90^\circ 00'$	$+39^\circ 11'$	$-50^\circ 49'$	$90^\circ 00'$
<i>d</i>	$90^\circ 00'$	$51^\circ 09'$	$180^\circ 00'$	$180^\circ 00'$	$90^\circ 00'$	$38^\circ 51'$
<i>z</i>	$37^\circ 17'$	$45^\circ 42'$	$127^\circ 17'$	$+39^\circ 10'$	$-50^\circ 50'$	$64^\circ 24'$

Например, для грани  $z$

$$\varphi' = 37^\circ 17' + 90^\circ = 127^\circ 17'.$$

3. Рассчитывают промежуточную в данных вычислениях величину  $\varphi''$  (см. табл. 20, столбец 5):

$$\text{ctg } \varphi'' = \frac{\text{ctg } \rho_{\text{изм}} \cdot \sin \rho_{\text{п}} - \cos \rho_{\text{п}} \cdot \cos \varphi'}{\sin \varphi'}$$

Так, для грани  $z$

$$\begin{aligned} \text{ctg } \varphi'' &= \frac{\text{ctg } 45^\circ 42' \sin 90^\circ - \cos 90^\circ \cdot \cos (127^\circ 17')}{\sin (127^\circ 17')} = \\ &= +1,227; \quad \varphi'' = +39^\circ 10'. \end{aligned}$$

4. Рассчитывают искомую величину — новую координату  $\varphi_{\text{нов}}$  (см. табл. 20, столбец 6) по равенству

$$\varphi_{\text{нов}} = \varphi'' + \varphi_{\text{п.}}$$

Например, для грани  $z$

$$\varphi_{\text{нов}} = + 39^{\circ}10' - 90^{\circ} = - 50^{\circ}50'.$$

5. Рассчитывают новую координату  $\rho_{\text{нов}}$  (см. табл. 20, столбец 7):

$$\sin \rho_{\text{нов}} = \frac{\sin \varphi' \cdot \sin \rho_{\text{изм}}}{\cos \varphi_{\text{нов}}}.$$

Например, для грани  $z$

$$\sin \rho_{\text{нов}} = \frac{\sin (127^{\circ}17') \cdot \sin 45^{\circ}42'}{\cos (-50^{\circ}50')} = + 0,9016.$$

$$\rho_{\text{нов}} = 64^{\circ}24'.$$

Наиболее часто поворот кристаллов и перечисление координат к новому полюсу приходится делать для кристаллов триклинной, моноклинной и ромбической сингоний, так как здесь допустимы разные варианты установки кристаллов. Поэтому в минералогических справочниках для кристаллов этих сингоний часто приводятся координаты при разных установках.

Нередко приходится менять установку кристаллов тетрагональной сингонии, так как при строго однозначных во всех случаях выборе и ориентировке оси  $c$  выбор осей  $a$  и  $b$  разными авторами может быть произведен по-разному. В кристаллах видов симметрии  $4mm$ ,  $422$ ,  $4/mmm$   $\bar{4}2m$  такое различие может заключаться лишь в повороте кристалла вокруг оси  $c$  на  $45^{\circ}$ . Пересчет координат прост: углы  $\rho$  сохраняют прежние абсолютные значения, значения углов  $\varphi$  изменяют на  $45^{\circ}$ . Кроме того, следует учитывать возможность неоднозначного выбора единичной грани по морфологическим данным.

В гексагональной (и тригональной) сингонии различие в установке кристаллов разными авторами может заключаться в повороте кристалла вокруг оси  $c$  на  $60$  или  $30^{\circ}$  (кроме видов симметрии  $3$ ,  $\bar{3}$ ,  $6$ ,  $6/m$ ,  $\bar{6}$ , где поворот вокруг оси  $c$  может быть любым). Пересчет координат прост: углы  $\rho$  сохраняют прежние абсолютные значения, значения углов  $\varphi$  меняют на  $60$  или  $30^{\circ}$ . Здесь также следует помнить о неоднозначности выбора единичной грани по морфологическим признакам.

Как известно, в гексагональной (и тригональной) сингонии возможен разный выбор места нуля для отсчета углов  $\varphi$ . Поэтому даже при одной и той же установке кристалла в разных работах могут даваться разные значения углов  $\varphi$  для одних и тех же граней. Например, по отношению к величинам  $\varphi$ , приводимым в справочнике «Минералы» (1960), значения  $\varphi$  для тех же граней в справочнике Дэна на  $30^\circ$  меньше (символы в обоих справочниках для одних и тех же граней одинаковые, см. рис. 2); в справочниках В. Гольдшмидта (1897, 1913—1923) значения углов  $\varphi$  также меньше на  $30^\circ$  (символы для тех же граней здесь другие из-за иной ориентировки осей  $a$ ,  $b$ ,  $w$ ).

### Смена установки кристаллов, вычисление новых символов и констант

Смена установки кристалла делает необходимым вычисление новых координат граней, расчет новых символов и определение геометрических констант кристалла. Наиболее целесообразен метод расчетов, основанный на использовании формул преобразования. Он кратко описан в справочнике Дэна (1951, т. I, полутом 1, стр. 48). В частных случаях для кристаллов тетрагональной и гексагональной (тригональной) сингоний расчеты при смене установки выполняются довольно просто.

*Тетрагональная сингония.* Пример первый. Необходимо изменить выбор единичной грани; выбор осей и их ориентировка относительно наблюдателя оставлены без изменения.

В этом случае заново вычисляют символы граней и геометрические константы кристалла.

Пример второй. Необходимо повернуть кристалл вокруг оси  $c$  на  $45^\circ$ .

В этом случае рассчитывают заново:

а) отношение осей  $1:c$ . Величина  $c$ , определенная для кристалла в первоначальной установке, связана с величиной  $c_{ст}$  для кристалла в стандартной установке равенством  $c_{ст} = 1,414 c$ ;

б) по величине  $c_{ст}$  находят  $\varphi_e$  и  $\rho_e$  для единичной грани;

в) перечисляют координаты граней ( $\rho$  остаются без изменений, величины  $\varphi$  исправляют на  $45^\circ$ );

г) приписывают граням новые символы.

Гексагональная (и тригональная) сингонии. Пример первый. Необходимо изменить выбор единичной грани. Выбор осей и их ориентировка относительно наблюдателя оставлены без изменения.

В этом случае заново вычисляют символы граней и геометрические константы кристалла.

Пример второй. Необходимо повернуть на  $30^\circ$  вокруг оси  $c$  оси  $a$ ,  $b$ ,  $\omega$  в кристалле, не меняя положение самого кристалла. Такой поворот приходится выполнять, например, при переходе от установки  $G_1$  в работах В. Гольдшмидта (1896) и др. к стандартной установке, принятой в справочниках Дэна и «Минералы».

В этом случае рассчитывают заново отношение осей  $1 : c$ . Величина  $c_{ст}$  для кристалла в обычной установке связана с величиной  $c$  для кристалла в установке  $G_1$  равенством

$$c_{ст} = 1,155 c.$$

Исходя из величины  $c_{ст}$ , определяют все остальные характеристики кристалла и символы граней.

Пример третий. Необходимо перейти от символов Бравэ ( $hk\bar{l}$ ) к трехзначным символам Миллера ( $pqr$ ). Вычисления ведутся по формулам:  $p = h - k + l$ ;  $q = i - h + l$ ;  $r = k - i + l$  или при помощи специальных таблиц (Флинт, 1956).

### К методике определения ориентации неограниченных кристаллов

Ориентация неограниченных или плохо ограниченных кристаллов является одной из специальных задач прикладной кристаллографии. Она включает, во-первых, определение ориентировки кристаллографических направлений относительно элементов ограничения или других поверхностей тела и, во-вторых, придание кристаллам необходимого положения в пространстве — для морфологических и структурных исследований, получения ориентированных вырезов из кристалла и для других научных и технических целей.

Какой-либо единой универсальной методики определения ориентировки не существует. В каждом случае решение задачи может быть различным и основывается на использовании тех или иных специальных методов, часто не имеющих отношения к гониометрии. Поэтому

ниже намечаются только пути решения такой задачи без конкретизации отдельных операций. Описание специальных методов не приводится, но даются соответствующие библиографические ссылки. Предполагается, что природа изучаемого вещества известна. Суммируя все многообразие случаев, мы можем свести их к трем основным вариантам: а) имеются природные плохо ограненные большие кристаллы (кварца, исландского шпата и т. д.); б) имеются природные или искусственные кристаллы небольшого размера, хорошо ограненные, но не идеально развитые; в) имеются монокристаллические «бульки».

Некоторые возможные методы определения ориентации кристаллов даны для этих трех вариантов в табл. 21.

*Использование специальных гнезд* для механической установки кристаллов по их спайности. Этот метод пред-

Т а б л и ц а 21

Некоторые методы определения ориентации кристаллов

Условия	Методы
Природные плохо ограненные большие кристаллы	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Установка кристаллов по их спайности.</li> <li>2. Наблюдения над скульптурой граней.</li> <li>3. Измерение граничных углов.</li> </ol>
Хорошо ограненные мелкие кристаллы искаженного облика	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Измерения граничных углов.</li> <li>2. Наблюдения над скульптурой граней.</li> <li>3. Определение оптической ориентировки в иммерсии.</li> <li>4. Использование столика Федорова.</li> <li>5. Монокристалльная рентгеновская съемка.</li> </ol>
Монокристалльные «бульки»	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Использование столика Федорова.</li> <li>2. Установка «бульки» по сколам спайности в специальных гнездах.</li> <li>3. Монокристалльная рентгеновская съемка.</li> </ol>

ложен А. В. Шустовым (1966) для точной ориентировки крупных кристаллов исландского шпата, но может быть применен для любых кристаллов и неограниченных «булек» с хорошей спайностью. Гнездо для механической установки кристаллов кальцита представляет собой входящий трехгранный угол, отвечающий спайному ромбоэдру. На кристалле делаются сколы по спайности и он помещается в гнездо. При этом кристалл автоматически получает правильную ориентацию и строго фиксированное положение.

*Измерение граничных углов.* Измеренные величины сопоставляются с граничными углами, рассчитанными для габитусных граней, обычно развитых на кристаллах данного вещества, и, таким образом, грани идентифицируются. Для природных веществ величины граничных углов даны в справочнике «Минералы» (1960) и других аналогичных сводках. Измерение граничных углов, как обычно, выполняется при помощи гониометров (прикладных или отражательных).

*Изучение скульптуры граней.* Скульптура граней, естественная или получаемая при травлении кристаллов, сопоставляется с уже известной для данного вещества.

*Определение оптической ориентировки* в иммерсионном препарате. Препарат готовится с жидкостью с показателем преломления, равным  $N_m$  минерала. По показателям преломления, коноскопическим фигурам, углам погасания, по знаку зоны определяется ориентировка оптической индикатриссы относительно граней кристалла (Татарский, 1965). Сводка сведений по оптическим свойствам веществ дана в работах А. Н. Винчелла и Г. Винчелла (1953, 1967), Е. Ларсена и Г. Бермана (1965) и др. При использовании этого метода наиболее рационально укреплять кристалл на вращающейся игле (Татарский, 1965).

*Использование столика Федорова.* Из мелких кристаллов приготавливается шлиф на шеллаке, цементе и т. п. Из монокристалльной «бульки» делается тонкая вырезка перпендикулярно оси «бульки». Перед получением вырезки на бульку наносится риска. Из вырезки готовится петрографический шлиф, причем на предметном стекле отмечается положение риски.

По обычной методике (Саранчина, 1963) производится исследование и установка главных сечений опти-

ческой индикатриссы кристаллов. Полученные данные наносятся на сетку Вульфа. Затем, используя справочные данные (Винчелл, 1953, 1967) о положении оптической индикатриссы в кристаллах данного вещества, определяют ориентацию кристаллов и «бульки».

*Методы монокристалльной рентгеновской съёмки.* Определение ориентации производится по лауэграммам (Комков, Франк-Каменецкий, 1954, 1958; Франк-Каменецкий и др., 1959; Бокий и др., 1957) или при помощи диффрактометров\*.

---

\* Широко распространены рентгеновские диффрактометры для установления ориентации крупных блоков пьезокварца, исландского шпата и других широко используемых в технике кристаллов. — *Прим. ред.*

## ЛИТЕРАТУРА

Аншелес О. М. Зависимость между индексами и сферическими координатами граней кристаллов. «Тр. Лен. об-ва естествоиспыт.», т. LV, вып. 4, 1925; т. LVI, вып. 4, 1926.

Аншелес О. М. Вычислительные и графические методы кристаллографии. Изд. ЛГУ, 1939.

Аншелес О. М. Таблицы формул для вычислений кристаллов. КУБУЧ, 1934.

Аншелес О. М. Начала кристаллографии. Изд. ЛГУ, 1959.

Бокий Г. Б. и Порай-Кошиц М. А. Практический курс рентгеноструктурного анализа. Изд-во МГУ, 1951.

Болдырев А. К. Принципы нового метода кристаллографического диагноза вещества. «Зап. Всесоюзн. минерал. об-ва», ч. 53, вып. 2, 1952.

Болдырев А. К. Поверка гониометра В. Гольдшмидта. «Зап. Всесоюзн. минерал. об-ва», ч. 78, вып. 4, 1949.

Болдырев А. К. Кристаллография. ОНТИ, 1934.

Болдырев А. К., Доливо-Добровольский В. В. Определитель кристаллов, ОНТИ, 1937—1939.

Бонштедт Э. М. Руководство по измерению и вычислению кристаллов по методу Гольдшмидта. Изд-во АН СССР, 1934.

Вазбуцкий Г. Л. Приспособления к федоровскому столику для изучения поверхностных структур кристаллов и для некоторых других целей. В сб.: «Генезис минеральных индивидов и агрегатов». Изд-во «Наука», 1966.

Вазбуцкий Г. Л. Еще о приспособлении к федоровскому столику для изучения поверхности кристаллов. «Зап. Всесоюзн. минерал. об-ва», вып. 5, 1968.

Винчелл А. Н., Винчелл Г. Оптическая минералогия. Изд-во иностр. лит., 1953.

Винчелл А. Н., Винчелл Г. Оптические свойства искусственных минералов. Изд-во «Мир», 1967.

Вульф Г. В. Руководство по кристаллографии, 1904.

Гильварт А. Б. Способ ориентировки кристаллов кварца по штриховке на паре смежных граней острых ромбоэдров или так называемой «призмы». «Тр. Ин-та кристаллографии АН СССР», вып. 5, 1949.

Доливо-Добровольский В. В. Вычисление элементов кристалла. «Тр. Лен. общ. ест.» LVIII, вып. 4, 1928.

Доливо-Добровольский В. В. Исследование геометрических свойств кристаллов кванита из месторождений дер. Борисовки Качарского р-на на Южном Урале. «Тр. Всесоюзн. геол.-разв. объединения», вып. 235, 1932.

Доливо-Добровольский В. В. Гониометрическое исследование кристаллов берилла в связи с общими вопросами классификации габитусов кристаллов. «Тр. Всесоюз. геол.-разв. объединения», вып. 240, 1933.

Доливо-Добровольский В. В. Курс кристаллографии. ОНТИ, 1937.

Дэна Дж. Д., Дэна Э. С., Пэлач Ч., Берман Г., Фрондель К. Система минералогии. Т. I, II. Изд-во иностр. лит., 1951—1954.

Заварицкий А. Н. Измерение кристаллов при помощи микроскопа Федоровским столиком. «Зап. Росс. минерал. об-ва», 2-я сер., вып. 58, 1929.

Князев В. С., Чарыгин А. М. Вычисление кристаллов с помощью сетки Вульфа. М., Изд. МИНИПРОМ., 1969.

Комков А. И., Франк-Каменецкий В. А. К вопросу об определении ориентировки неограниченного кристалла по одной лауэграмме. «Вестн. ЛГУ», сер. геологии и географии, выч. 2, № 12, 1958.

Комков А. И., Франк-Каменецкий В. А. Определение ориентировки неограниченного кристалла по одной лауэграмме методом развигтия зон. «Ученые записки ЛГУ», сер. геологич. наук, вып. 4, № 178, 1954.

Курбатов С. М. Везувианы из м-ний СССР. Изд. ЛГУ, 1946.

Ларсен Е., Берман Г. Определение прозрачных минералов под микроскопом. Изд-во «Недра», 1965.

«Минералы» (справочник). Ред. Ф. В. Чухров и Э. М. Бонштедт-Куплетская. Изд-во АН СССР, 1960.

Митрофанова К. В. Новые данные по фотогониометрии алмазов. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 84, вып. 2, 1955.

Митрофанова К. В. Фотогониометрия трех основных типов кривогранных кристаллов алмаза. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 85, вып. 4, 1956.

Мокиевский В. А., Джафаров Ч. Д. Перспективы фотогониометрического исследования кристаллов со сложной поверхностью. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 92, вып. 1, 1963.

Мокиевский В. А., Шафрановский И. И. Фотогониометрия округлых алмазов. Сб. «Кристаллография», вып. 4. Изд. ЛГИ, 1955.

Нардов В. В. О внутренних рефлексах, наблюдаемых при гониометрическом изучении кристаллов. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 85, вып. 4, 1956.

Нардов В. В. Фотограммы кристаллов алмаза, протравленных в расплаве кимберлита. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 87, вып. 5, 1958.

Нардов В. В. Юстировка исследовательского гониометра Гольдшмидта. «Вестн. ЛГУ», № 6, сер. геологии и геофизики, вып. 1. ОНТИ, 1958.

Нардов В. В. К вопросу о точности измерений на двукружном гониометре Гольдшмидта. «Вестн. ЛГУ», сер. геологии и геофизики, вып. 2, 1958.

Нардов В. В. Таблицы для определения символов по сферическим координатам. «Уч. зап. ЛГУ», № 241, сер. геолог. наук, вып. II, 1960.

Падуров Н. Н. Кристаллохимический анализ, 1931.

Разумовский Н. К. Стереографическая проекция. КУБУЧ, 1928.

Саранчина Г. М. Федоровский метод. Изд. ЛГУ, 1963.

Татарский В. Б. Инструкция по черчению кристаллов, КУБУЧ, 1934.

Татарский В. Б. Приведение данных гониометрического измерения кристаллов к одному начальному меридиану. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 90, вып. 6, 1961.

Татарский В. Б. Кристаллооптика и иммерсионный метод исследования минералов. Изд-во «Недра», 1965.

Федоров Е. С. Курс кристаллографии, изд. Российск. АН 1912.

Флинт Е. Е. К вопросу о точности измерения углов на двухкрупном гониометре. «Тр. Ин-та. кристаллографии АН СССР», вып. 3, 1947.

Флинт Е. Е. Рационализация методики измерения кристаллов. «Тр. Ин-та кристаллографии АН СССР», вып. 5, 1949.

Флинт Е. Е. Практическое руководство по геометрической кристаллографии. Госгеолиздат, 1956.

Флинт Е. Е. Новая модель фотогониометра. «Кристаллография», т. 6, вып. 2. Изд-во АН СССР, 1962.

Франк-Каменецкий В. А. Внешняя форма кристаллов барита в связи с их атомным строением. «Уч. зап. ЛГУ», 154, геохимия, вып. 2, 1952.

Франк-Каменецкий В. А., Кондратьева В. В., Каменцев И. Е. Руководство для лабораторных занятий по рентгеновскому исследованию минералов. Изд. ЛГУ, 1959.

Шафрановский И. И. Кристаллы минералов. Изд. ЛГУ, 1957.

Шафрановский И. И. Открытое письмо минералогам. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 90, вып. 4, 1961.

Шафрановский И. И., Попов Г. М. Кристаллография. Изд-во «Высшая школа», 1965.

Минералогические таблицы. Гостоптехиздат, 1962.

Шустов А. В. Простейшая механическая установка и гониометрия крупных кристаллов кальцита. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 95, вып. 1, 1966.

Янулов К. П., Хорошилова Л. А. Применение дифрактометра ГУР-3 при морфологических исследованиях кристаллов. «Зап. Всесоюз. минерал. об-ва», ч. 95, вып. 6, 1966.

Barker T. V. Systematic Crystallographyian essay on crystal description, classification and indentification, 1930.

Fedorow E. Das Krystallreich. Зап. Росс. АН, 1926.

Goldschmidt V., S. G. Gordon. Crystallographie Tables for determination of Minerals. Philadelphia, 1928.

Goldschmidt V. Kristallographische Winkeltabellen, Berlin, 1897.

Goldschmidt V. Atlas des Kristallformen. Heidelberg, 1913—1923.

Croth P. Chemische Kristallographie, 1906—1919.

Dana I. D. The System of Mineralogia, 1892.

Niggli P. Lehrbuch der Mineralogie, 1924, 1926.

Strunz H. Mineralogische Tabellen, 4 Aufl, Leipzig, 1970.

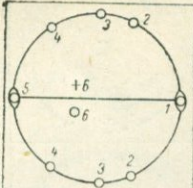
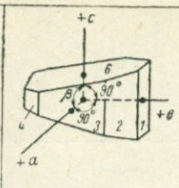
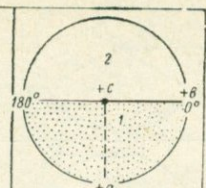
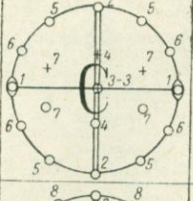
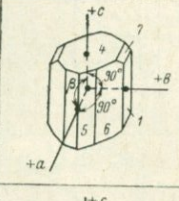
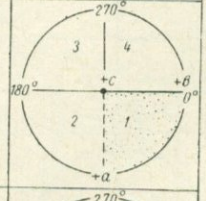
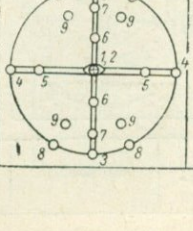
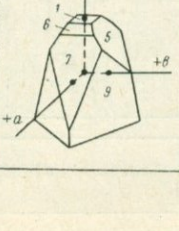
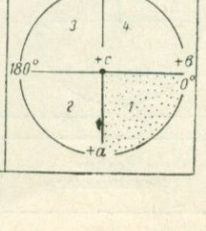
Porter M. W., Gold L. W. The Barkers index of crystals, v. I—VII, Cambridge, 1951—1963.

Симп.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
Тригональная	1. Моноэдрический (примитивный); $1; C_1$ Моноэдры (1-8)				$\varphi_1 = \varphi_1$
	2. Пинакоидальный (центральный); $1; C_1 = S_2$ Пинакоиды (1-5)				$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 \\ \varphi_2 - 180^\circ \end{cases}$ $\varphi(-)1 = \begin{cases} \varphi_4 - 360^\circ \\ \varphi_5 - 180^\circ \end{cases}$
Моноклиная	3. Диэдрический безосный (планаальный); $m; C_{1h} = C_s$ Моноэдр (1) Пинакоид (2) Диэдры (3-7)				$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 \\ 180^\circ - \varphi_2 \end{cases}$ $\varphi(-)1 = \begin{cases} \varphi_4 - 360^\circ \\ 180^\circ - \varphi_3 \end{cases}$

$$\rho \frac{+}{-}$$

$$\rho \frac{+}{-}$$

$$\rho \frac{+}{-}$$

Синг.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
Моноклиная	4. Диэдрический осевой (аксиальный); 2; C <sub>2</sub> Моноэдры (1, 5) Пинакоид (3) Диэдры (2, 4, 6)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_3 \\ 360^\circ - \Phi_2 \end{cases}$ <hr/> $\rho \frac{+}{-}$
	5. Призматический (планаксиальный); 2/m; C <sub>2h</sub> Пинакоиды (1, 2, 3, 4) Ромбические призмы (5, 6, 7)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - \Phi_2 \\ 180^\circ - \Phi_2 \\ \Phi_2 - 180^\circ \\ 360^\circ - \Phi_4 \end{cases}$ <hr/> $\rho \frac{+}{-} \left( \text{для граней } 3 \rho \frac{+}{+} \right)$
Ромбическая	6. Ромбо-пирамидальный (планальный); mmm; C <sub>2v</sub> Моноэдры (1, 2) Пинакоиды (3, 4) Диэдры (5, 6, 7) Ромбические призмы (8) Ромбические пирамиды (9)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - \Phi_2 \\ 180^\circ - \Phi_2 \\ \Phi_2 - 180^\circ \\ 360^\circ - \Phi_4 \end{cases}$ <hr/> $\rho \frac{+}{-}$

Синг.

Вид симметрии, простые формы

Проекция

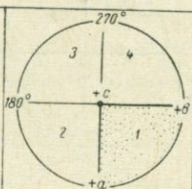
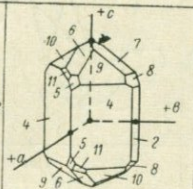
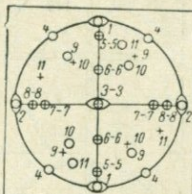
Пример кристалла

Элементарный сектор

Формулы

Ромбическая

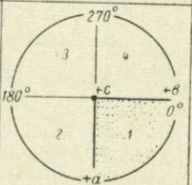
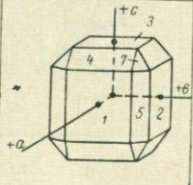
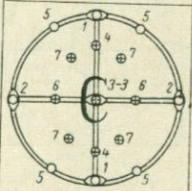
7. Ромбо-тетраэдрический (аксиальный);  $222; D_2=V$   
 Пинакоиды (1, 2, 3)  
 Ромбические призмы (4, 5, 6, 7, 8)  
 Ромбические тетраэдры (9, 10, 11)



$$\varphi_1 = \begin{cases} 180^\circ - \varphi_2 \\ \varphi_3 - 180^\circ \\ 360^\circ - \varphi_4 \end{cases}$$

$$\rho \frac{+}{-} \text{ (для граней 3, 5, 6, 7, 8 } \rho \frac{+}{+} \text{)}$$

8. Ромбо-дипирамидальный (панаксиальный);  $m\bar{3}m; D_{2h}=V_h$   
 Пинакоиды (1-3)  
 Ромбические призмы (4, 5, 6)  
 Ромбические дипирамиды (7)

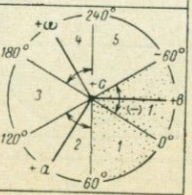
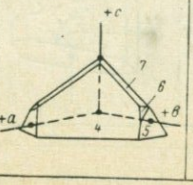
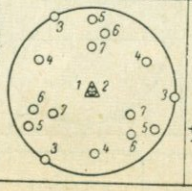


$$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 \\ 180^\circ - \varphi_2 \\ \varphi_3 - 180^\circ \\ 360^\circ - \varphi_4 \end{cases}$$

$$\rho \frac{+}{+}$$

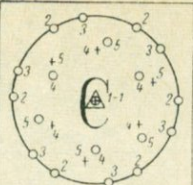
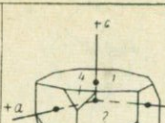
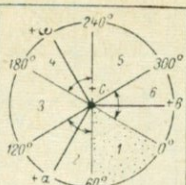
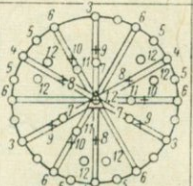
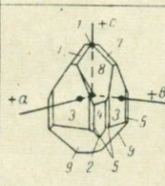
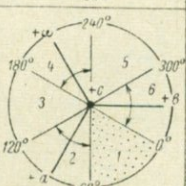
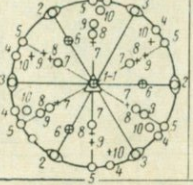
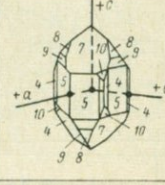
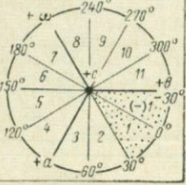
Тригональная

9. Тригонально-пирамидальный (примитивный);  $3; C_3$   
 Моноэдры (1, 2)  
 Тригональные призмы (3)  
 Тригональные пирамиды (4, 5, 6, 7)



$$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 \\ \varphi_3 - 120^\circ \varphi(-1) \\ \varphi_5 - 240^\circ \end{cases} \begin{cases} \varphi_6 - 360^\circ \\ \varphi_4 - 240^\circ \\ \varphi_2 - 120^\circ \end{cases}$$

$$\rho \frac{+}{-}$$

Синг.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
Тригональная	10. Ромбоэдрический (центральный); 3; $C_{3i} = S_6$ Пинакоид (1) Гексагональные призмы (2, 3) Ромбоэдр (4, 5)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - 180^\circ \\ \Phi_2 - 60^\circ \\ \Phi_3 - 120^\circ \end{cases} \left  \begin{array}{l} \Phi_4 - 180^\circ \\ \Phi_5 - 240^\circ \\ \Phi_6 - 300^\circ \end{array} \right.$ $\rho \frac{\pm}{-} \text{ (для граней 1 } \rho \frac{\pm}{+} \text{)}$
	11. Дитригонально-пирамидальный (планальный); 3m; $C_{3v}$ Моноэдры (1, 2) Тригональные призмы (3, 4) Дитригональные призмы (5) Гексагональная призма (6) Тригональные пирамиды (7, 8, 9) Гексагональные пирамиды (10, 11) Дитригональные пирамиды (12)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - \Phi_2 \\ \Phi_3 - 120^\circ \end{cases} \left  \begin{array}{l} 240^\circ - \Phi_4 \\ \Phi_5 - 240^\circ \\ 360^\circ - \Phi_6 \end{array} \right.$ $\rho \frac{\pm}{-}$
	12. Тригонально-трапецоэдрический (аксиальный); 32; $D_3$ Пинакоид (1) Тригональные призмы (2, 3) Дитригональные призмы (4) Гексагональная призма (5) Тригональные дипирамиды (6) Ромбоэдры (7, 8, 9) Тригональные трапецодры (10)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - \Phi_2 \\ \Phi_3 - 120^\circ \\ \Phi_4 - 240^\circ \\ \Phi_5 - 240^\circ \\ \Phi_6 - 300^\circ \\ \Phi_7 - 180^\circ \\ \Phi_8 - 120^\circ \\ \Phi_9 - 60^\circ \\ \Phi_{10} - 360^\circ \end{cases} \Psi(-)1 = \begin{cases} 60^\circ - \Phi_3 \\ \Phi_4 - 120^\circ \\ 180^\circ - \Phi_7 \\ \Phi_8 - 240^\circ \\ 300^\circ - \Phi_{11} \\ \Phi_{12} - 360^\circ \end{cases}$ $\rho \frac{\pm}{-} \text{ (для граней 1 } \rho \frac{\pm}{+} \text{)}$

Синг.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
Тригональная	13. Тригонально-скеленоэд- рический (панаксиальный); 3m; D <sub>3d</sub> Пинакоид (1) Гексагональные призмы (2, 3) Дигексагональные призмы (4) Гексагональные дипирамиды (5) Ромбоэдры (6) Тригональные скеленоэдры (7)				$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 & \varphi_7-180^\circ \\ 60^\circ-\varphi_2 & 240^\circ-\varphi_8 \\ \varphi_3-60^\circ & \varphi_9-240^\circ \\ 120^\circ-\varphi_4 & 300^\circ-\varphi_{10} \\ \varphi_5-120^\circ & \varphi_{11}-300^\circ \\ 180^\circ-\varphi_6 & 360^\circ-\varphi_{12} \end{cases}$
	14. Тетрагонально-пирами- дальный (примитивный); 4; C <sub>4</sub> Моноэдры (1, 2) Тетрагональные призмы (3) Тетрагональные пирамиды (4, 5)				$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 & \varphi_5-360^\circ \\ \varphi_3-90^\circ & \varphi_6-270^\circ \\ \varphi_2-180^\circ & \varphi_4-180^\circ \\ \varphi_7-270^\circ & \varphi_8-90^\circ \end{cases} \quad \varphi(-)1$
	15. Тетрагонально-дипира- мидальный (центральный); 4/m; C <sub>4h</sub> Пинакоид (1) Тетрагональные призмы (2, 3) Тетрагональные дипирамиды (4, 5, 6, 7)				$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 & \varphi_8-360^\circ \\ \varphi_3-90^\circ & \varphi_6-270^\circ \\ \varphi_5-180^\circ & \varphi_4-180^\circ \\ \varphi_7-270^\circ & \varphi_2-90^\circ \end{cases} \quad \varphi(-)1$
Тетрагональная					$\rho \frac{+}{-} \text{ (для граней 15 } \rho \frac{+}{+} \text{)}$
					$\rho \frac{+}{-}$
					$\rho \frac{+}{-}$

Синг.

Вид симметрии, простые формы

Проекция

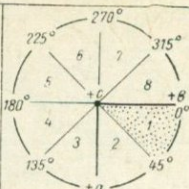
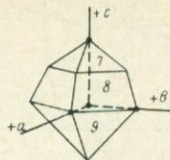
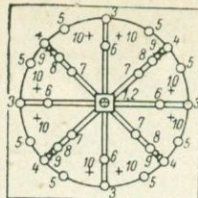
Пример кристалла

Элементарный сектор

Формулы

Тетрагональная

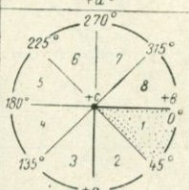
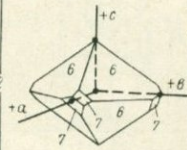
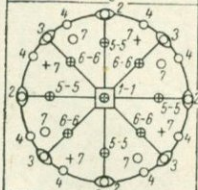
16. Дитетрагонально-пирамидальный (планальный);  
4mp : C<sub>4v</sub>  
Моноэдры (1, 2)  
Тетрагональные призмы (3, 4)  
Дитетрагональные призмы (5)  
Тетрагональные пирамиды (6, 7, 8, 9)  
Дитетрагональные пирамиды (10)



$$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 - 90^\circ \\ \varphi_2 - 90^\circ \\ \varphi_3 - 180^\circ \\ \varphi_4 \end{cases} \left| \begin{array}{l} \varphi_5 - 180^\circ \\ 270^\circ - \varphi_6 \\ \varphi_7 - 270^\circ \\ 360^\circ - \varphi_8 \end{array} \right.$$

$$\rho \frac{+}{-}$$

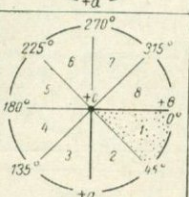
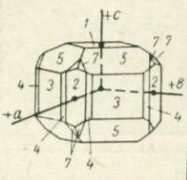
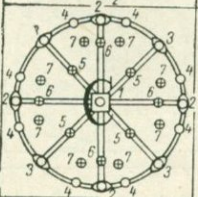
17. Тетрагонально-трапецоэдрический (аксиальный);  
422; D<sub>4</sub>  
Пинакoid (1)  
Тетрагональные призмы (2, 3)  
Дитетрагональные призмы (4)  
Тетрагональные дипирамиды (5, 6)  
Тетрагональные трапецоэдры (7)



$$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 - 90^\circ \\ \varphi_2 - 90^\circ \\ \varphi_3 - 180^\circ \\ \varphi_4 \end{cases} \left| \begin{array}{l} \varphi_5 - 180^\circ \\ 270^\circ - \varphi_6 \\ \varphi_7 - 270^\circ \\ 360^\circ - \varphi_8 \end{array} \right.$$

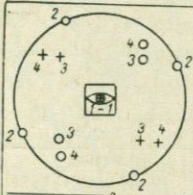
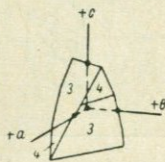
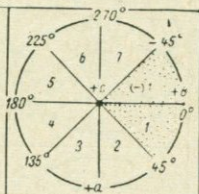
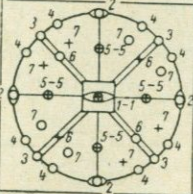
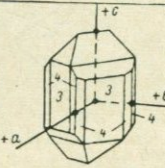
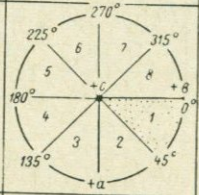
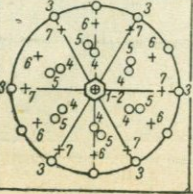
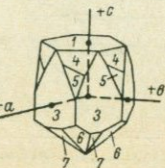
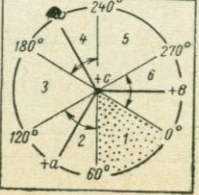
$$\rho \frac{+}{-} \left( \text{для граней } 1, 5, 6 \frac{+}{+} \right)$$

18. Дитетрагонально-дипирамидальный (планаксиальный) 4/mmm; D<sub>4h</sub>  
Пинакoid (1)  
Тетрагональные призмы (2, 3)  
Дитетрагональные призмы (4)  
Тетрагональные дипирамиды (5, 6)  
Дитетрагональные дипирамиды (7)

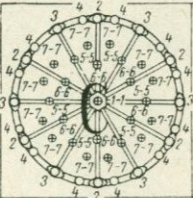
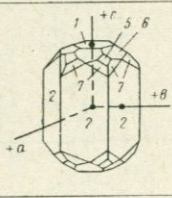
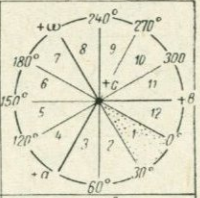
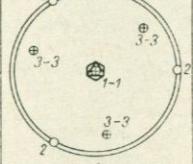
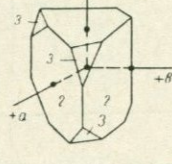
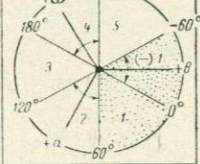
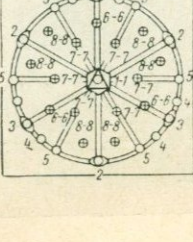
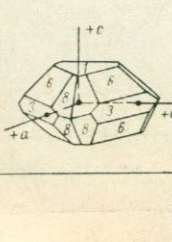
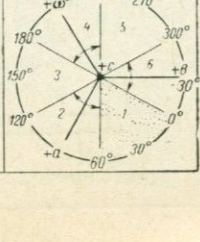


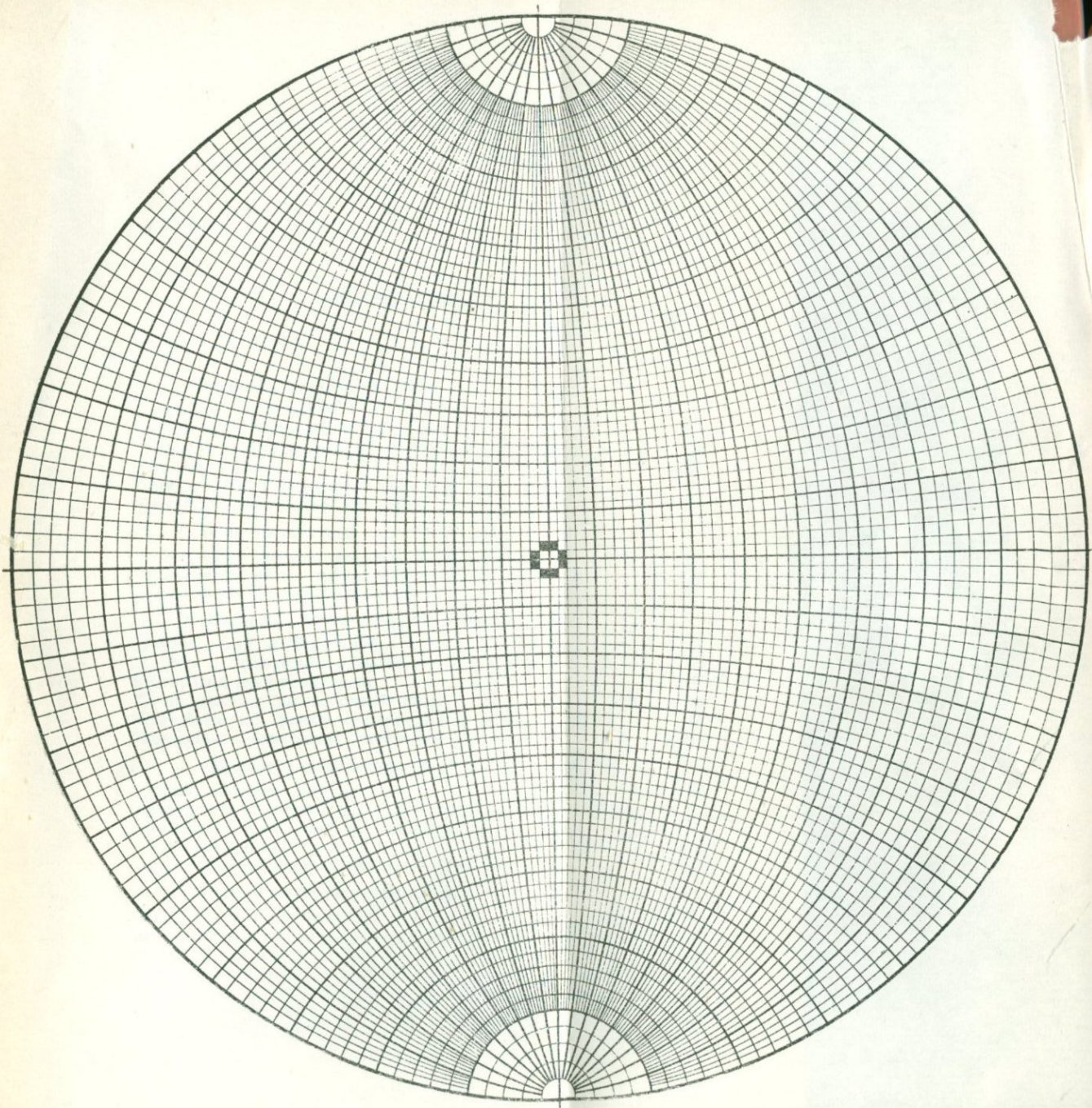
$$\varphi_1 = \begin{cases} \varphi_1 - 90^\circ \\ \varphi_2 - 90^\circ \\ \varphi_3 - 180^\circ \\ \varphi_4 \end{cases} \left| \begin{array}{l} \varphi_5 - 180^\circ \\ 270^\circ - \varphi_6 \\ \varphi_7 - 270^\circ \\ 360^\circ - \varphi_8 \end{array} \right.$$

$$\rho \frac{+}{+}$$

Синг.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
Тетрагональная	19. Тетрагонально-тетраэдрический (инверсионно-примитивный); 4; S <sub>4</sub> Пинакоид (1) Тетрагональные тетраэдры (3, 4)				$\Phi_1 = \left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 - 90^\circ \\ \Phi_3 - 180^\circ \\ \Phi_7 - 270^\circ \end{array} \right. \quad \Phi(-) 1 = \left\{ \begin{array}{l} \Phi_6 - 360^\circ \\ \Phi_5 - 270^\circ \\ \Phi_4 - 180^\circ \\ \Phi_2 - 90^\circ \end{array} \right.$ <hr/> $\rho \frac{+}{-} \left( \text{для граней } 1 \rho \frac{+}{+} \right)$
	20. Тетрагонально-скеленоэдрический (инверсионно-планальный); 42m; D <sub>2d</sub> = V <sub>d</sub> Пинакоид (1) Тетрагональные призмы (2, 3) Дитетрагональные призмы (4) Тетрагональные дипирамиды (5) Тетрагональные тетраэдры (6) Тетрагональные скеленоэдры (7)				$\Phi_1 = \left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 - 90^\circ \\ \Phi_3 - 90^\circ \\ \Phi_5 - 180^\circ \end{array} \right. \quad \left  \quad \begin{array}{l} \Phi_5 - 180^\circ \\ 270^\circ - \Phi_6 \\ \Phi_7 - 270^\circ \\ 360^\circ - \Phi_8 \end{array} \right.$ <hr/> $\rho \frac{+}{-} \left( \text{для граней } 1, 5, \rho \frac{+}{+} \right)$
Гексагональная	21. Гексагонально-пирамидальный (примитивный); 6; C <sub>6</sub> Моноэдры (1, 2) Гексагональные призмы (3) Гексагональные пирамиды (4, 5, 6, 7)				$\Phi_1 = \left\{ \begin{array}{l} \Phi_1 - 120^\circ \\ \Phi_5 - 240^\circ \end{array} \right. \quad \left  \quad \begin{array}{l} \Phi_2 - 60^\circ \\ \Phi_4 - 180^\circ \\ \Phi_6 - 270^\circ \end{array} \right.$ <hr/> $\rho \frac{+}{-} \left( \text{для граней } 1 \rho \frac{+}{+} \right)$

Синг.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
Гексагональная	22. Гексагонально-дипирамидальный (центральный) 6/m; $C_{6h}$ Пинакоид (1) Гексагональные призмы (2) Гексагональные дипирамиды (3, 4, 5, 6, 7)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - 60^\circ \\ \Phi_3 - 120^\circ \\ \Phi_7 - 180^\circ \\ \Phi_9 - 240^\circ \\ \Phi_{11} - 300^\circ \end{cases} \Phi (-) 1 = \begin{cases} \Phi_{12} - 360^\circ \\ \Phi_{10} - 300^\circ \\ \Phi_8 - 240^\circ \\ \Phi_6 - 180^\circ \\ \Phi_4 - 120^\circ \\ \Phi_2 - 60^\circ \end{cases}$ <hr/> $\rho \begin{matrix} + \\ + \end{matrix}$
	23. Дигексагонально-пирамидальный (планальный); 6mm; $C_{6v}$ Моноэдри (1, 2) Гексагональные призмы (3, 4) Дигексагональные призмы (5) Гексагональные пирамиды (6, 7, 8) Дигексагональные пирамиды (9)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - \Phi_2 & \Phi_7 - 180^\circ \\ 60^\circ - \Phi_3 & 240^\circ - \Phi_8 \\ \Phi_5 - 60^\circ & \Phi_9 - 240^\circ \\ 120^\circ - \Phi_4 & 300^\circ - \Phi_{10} \\ \Phi_6 - 120^\circ & \Phi_{11} - 300^\circ \\ 120^\circ - \Phi_6 & 360^\circ - \Phi_{12} \end{cases}$ <hr/> $\rho \begin{matrix} + \\ - \end{matrix}$
	24. Гексагонально-трапецоэдрический (аксиальный); 622; $D_6$ Пинакоид (1) Гексагональные призмы (2, 3) Дигексагональные призмы (4) Гексагональные дипирамиды (5, 6) Гексагональные трапецоэдры (7)				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_3 - \Phi_2 & \Phi_7 - 180^\circ \\ 60^\circ - \Phi_2 & 240^\circ - \Phi_8 \\ 120^\circ - \Phi_4 & \Phi_9 - 240^\circ \\ \Phi_5 - 120^\circ & 300^\circ - \Phi_{10} \\ 120^\circ - \Phi_6 & \Phi_{11} - 300^\circ \\ & 360^\circ - \Phi_{12} \end{cases}$ <hr/> $\rho \begin{matrix} + \\ - \end{matrix}$

Синг.	Вид симметрии, простые формы	Проекция	Пример кристалла	Элементарный сектор	Формулы
	<p>25. Дигексагонально-дипирамидальный (планаксиальный) <math>6/mmm</math>: <math>D_{6h}</math>                      Пинакоид (1)                      Гексагональные призмы (2, 3)                      Дигексагональные призмы (4)                      Гексагональные дипирамиды (5, 6)                      Дигексагональные дипирамиды (7)</p>				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - \Phi_2 & \Phi_7 - 180^\circ \\ \Phi_3 - 60^\circ & \Phi_8 - 240^\circ \\ 120^\circ - \Phi_4 & \Phi_9 - 240^\circ \\ \Phi_5 - 120^\circ & 300^\circ - \Phi_{10} \\ 120^\circ - \Phi_6 & \Phi_{11} - 300^\circ \\ & 360^\circ - \Phi_{12} \end{cases}$ <hr/> $\rho \frac{+}{+}$ <hr/>
Гексагональная	<p>26. Тригонально-дипирамидальный (инверсионно-примитивный): <math>\bar{6}</math>; <math>D_{3h}</math>                      Пинакоид (1)                      Тригональные призмы (2)                      Тригональные дипирамиды (3)</p>				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_1 - 120^\circ & \Phi_6 - 360^\circ \\ \Phi_3 - 240^\circ & \Phi_4 - 240^\circ \\ \Phi_5 - 240^\circ & \Phi_2 - 120^\circ \end{cases} \Phi_{(-)1}$ <hr/> $\rho \frac{+}{+}$ <hr/>
	<p>27. Дитригонально-дипирамидальный (инверсионно-планальный): <math>6m2</math>; <math>D_{3h}</math>                      Пинакоид (1)                      Тригональные призмы (2, 3)                      Дитригональные призмы (4)                      Гексагональная призма (5)                      Тригональные дипирамиды (6)                      Гексагональные дипирамиды (7)                      Дитригональные дипирамиды (8)</p>				$\Phi_1 = \begin{cases} \Phi_3 - \Phi_2 & 240^\circ - \Phi_4 \\ \Phi_5 - 120^\circ & \Phi_6 - 240^\circ \\ & 360^\circ - \Phi_6 \end{cases}$ <hr/> $\rho \frac{+}{+}$ <hr/>



## СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие редактора	3
Введение	7
<b>Глава 1. Элементы кристаллографии</b>	
Установка кристаллов	9
Выбор кристаллографических осей	11
Система отсчета сферических координат граней	15
Единичная грань	18
Геометрические константы кристалла	20
Кристаллографические проекции	21
<b>Глава 2. Типы гониометров</b>	
Двукружные отражательные гониометры	24
Определение места нуля двукружного гониометра	29
Специальные типы гониометров	31
<b>Глава 3. Измерение кристаллов на гониометре</b>	
Задачи и ход исследования	32
Подбор и подготовка кристаллов для измерения	34
Юстировка по одной грани	36
Юстировка по граням одной зоны	36
Юстировка по граням с одинаковым углом наклона	40
Измерение сферических координат граней	42
<b>Глава 4. Обработка результатов измерения кристаллов</b>	
Общий порядок работы	44
Приведение координат $\varphi$ к одному начальному меридиану	47
Приведение координат к элементарному сектору (сводный кристалл)	53
Определение координат сводного кристалла	57
<b>Глава 5. Методы вычисления кристаллов</b>	
Задачи и ход вычислений	58
Выбор единичной грани и определение ее координат	59
Формулы для расчета символов по координатам	61
Расчет геометрических констант	66
Формулы для обратного расчета координат по символам	71
Пример вычисления кристаллов кальциррита	75
Методы графического вычисления кристаллов	77

Форма представления результатов гониометрического изучения кристаллов . . . . .	82
<b>Глава 6. Черчение кристаллов</b>	
Методы изображения кристаллов . . . . .	84
Черчение кристаллов по гномонической проекции . . . . .	85
Черчение кристаллов по стереографической проекции . . . . .	89
<b>Глава 7. Повороты и смена установки кристаллов</b>	
Поворот кристалла и вычисление новых координат граней	91
Смена установки кристаллов, вычисление новых символов и констант . . . . .	94
К методике определения ориентации неограниченных кристаллов . . . . .	95
Литература . . . . .	99
Приложение 1. Таблицы . . . . .	102
Приложение 2. Сетка Вульфа . . . . .	вкл.

БУЛАХ АНДРЕЙ ГЛЕБОВИЧ

ГРАФИКА КРИСТАЛЛОВ

Редактор издательства *В. С. Потапов*. Техн. редактор *Л. Н. Шиманова*  
 Корректор *М. И. Кряковкина*

Сдано в набор 12/VI 1971 г. Подписано в печать 18/XI 1971 г. Т-19310  
 Формат 84×108<sup>1/32</sup> Печ. л. 3,63 с вкл. Усл. печ. л. 6,09 Уч.-изд. л. 6,1 Бумага № 2  
 Индекс 1-4-1 Заказ 398/2827-2 Тираж 4000 экз. Цена 61 коп.

Издательство «Недра». Москва, К-12, Третьяковский проезд, д. 1/19.  
 Московская типография № 6 Главполиграфпрома  
 Комитета по печати при Совете Министров СССР  
 Москва, Ж-88, 1-й Южно-портовый пр., 17.

30

61 коп.

НЕДРА • 1971