

В. А. Моклевский

МОРФОЛОГИЯ КРИСТАЛЛОВ



Методическое
руководство

Недра

В. А. Мокиевский

МОРФОЛОГИЯ КРИСТАЛЛОВ

Методическое
руководство

Под редакцией И. И. Шафрановского,
В. А. Франк-Каменецкого, М. Д. Любалина

4278



ЛЕНИНГРАД «НЕДРА»
ЛЕНИНГРАДСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ 1983



Мокиевский В. А. Морфология кристаллов: Методическое руководство.— Л.: Недра, 1983.— 295 с.

Рассмотрена морфология монокристаллов. Даны приемы описания формы и строения плоскогранных кристаллов, скелетных образований, округлых монокристаллических тел роста и растворения. Изложена геометрическая теория двойникования. Приведена классификация двойников, основанная на их симметрии, рассмотрены сложные двойниковые образования — полисинтетические двойники и двойниковые комплексы. Показано приложение приведенных методов к управлению качеством выращиваемых кристаллов.

Для кристаллографов, минералогов, петрографов, геологов-поисковиков и других специалистов, работающих с природными и искусственными кристаллами.

Табл. 43, ил. 117, список лит. 100 назв.

Рецензент — канд. геол.-минерал. наук
Ю. О. Пунин (Ленингр. гос. ун-т)

ПРЕДИСЛОВИЕ

Владимир Андреевич Мокиевский (1920—1979), автор публикуемой монографии «Морфология кристаллов», является видным представителем Федоровской — в основном ленинградской — кристаллографической школы.

Федоровская научная школа кристаллографов, носящая имя своего великого основателя Е. С. Федорова (1853—1919), имеет характерные особенности, о которых необходимо сказать несколько слов.

Три вершины федоровского творчества — вывод 230 пространственных групп, создание теодолитного гониметрического и кристаллооптического метода, построение кристаллохимического анализа — приобрели мировую славу, вышли далеко за рамки каких-либо школ и нашли свое продолжение и дальнейшее развитие в многочисленных трудах математиков, кристаллографов, физико-химиков и петрографов разных стран. Однако перечисленными достижениями далеко не исчерпывается творчество великого ученого. Нельзя забывать того, что Е. С. Федоров был профессором кристаллографии и петрографии в Петербургском (ныне Ленинградском) горном институте. Своим ученикам — горнякам и геологам — он внушал: «Известно, что эта наука (кристаллография) играет существенную роль как основная дисциплина среди минералогических наук и той части горного искусства, назначением которой является использование минерального сырья».*

После смерти Е. С. Федорова кристаллографическими центрами в Ленинграде стали две кафедры кристаллографии: основанная самим ученым в 1905 г. кафедра в Горном институте, возглавлявшаяся в течение ряда лет его выдающимся учеником проф. А. К. Болдыревым (1883—1946), и кафедра Ленинградского университета, открытая в 1924 г. также учеником и горячим пропагандистом идей Е. С. Федорова проф. О. М. Аншелесом (1885—1957). Принадлежность этих двух кафедр к геологическим и геологоразведочным факультетам наложила характерный отпечаток на их научную деятельность.

* Федоров Е. С. Введение к таблицам для кристаллохимического анализа «Царство кристаллов». — В кн.: Кристаллография. Л., Изд-во ЛГУ, 1955, вып. 3, с. 5.

Здесь, отвечая на запросы современной практики, совершенствовало в основном то направление в кристаллографии, которое часто называют минералогическим. При этом, базируясь на федоровских основах, пришлось развивать новые научные области, лишь намеченные в творчестве Е. С. Федорова. Часто подчеркивается, что XIX в. в кристаллографии был веком идеального кристалла, тогда как XX в. выдвинул на первый план реальный кристалл со всеми его отклонениями от идеала.

Именно реальные кристаллы и чаще всего кристаллы минералов и явились объектом изучения в работах коллективов обеих кафедр. Помимо рентгенометрического определения минеральных веществ и изучения их структур, здесь зародились работы по кристаллогенезису (выращивание практически важных веществ) и углубленной морфологии реальных кристаллов. Последняя особенно нуждалась в развитии, так как после открытия рентгеноанализа она оказалась в тени и длительном пренебрежении.

В начале нынешнего столетия Е. С. Федоров писал: «Пока мы имели дело с совершенным кристаллом, мы находились в области одной из самых точных наук математического характера, так называемой теоретической кристаллографии. Обращаясь к ознакомлению с несовершенствами в кристаллообразовании, мы выходим из области этой науки и входим в области наук более или менее эмпирического характера. Нет сомнения, что со временем из этой области будут выделены отделы, изучающие такие явления, которые подведутся под строгие законы математического характера, и тогда отделы эти перейдут в область теоретической кристаллографии» [Федоров Е. С., 1901, с. 280].

Развитие современной кристалломорфологии полностью оправдывает предвидение Е. С. Федорова. Именно в этом направлении шли и изыскания В. А. Мокиевского, питомца кафедры Ленинградского университета, а затем ассистента — доцента — профессора кафедры Горного института. Включившись в работы коллективов этих кафедр, он сразу же выдвинулся, сперва как замечательный экспериментатор в области роста кристаллов, а затем как тонкий и проникновенный теоретик, уточнявший, углублявший и заново творивший основы современной кристаллографии.

Предлагаемая читателю книга вобрала в себя основные результаты научной деятельности В. А. Мокиевского. Его творческий путь начался еще в студенческие годы на кафедре кристаллографии ЛГУ. Во время Великой Отечественной войны под руководством своих учителей проф. О. М. Аншелеса и В. Б. Татарского он участвовал в создании лаборатории по выращиванию кристаллов сегнетовой соли, необходимых для военной техники. Впоследствии в этой лаборатории при подготовке кандидатской диссертации по теме «Влияние внешних условий на форму роста кристаллов» В. А. Мокиевским был проведен цикл исследований, установивших ряд классических зависимостей скорости роста кристаллических граней от температуры, степени пересыщения и примесей. Найденные результаты получили самую широкую извест-

ность, вошли в учебники по кристаллографии и минералогии. Поэтому они не включены в настоящую книгу, хотя и примыкают к ее проблематике.* Дальнейшие исследования по роевой и морфологической кристаллографии, развиваемые В. А. Мокиевским на кафедре кристаллографии Горного института, отражены в книге достаточно полно. Сюда входят исследования поверхностей растущих и растворяющихся кристаллов, выполненные с помощью сконструированного В. А. Мокиевским оригинального гониометра. Далее следуют работы по выяснению влияния вязкости растворов на форму растущих кристаллов, по морфологии индукционных поверхностей, формам роста и растворения кристаллов, по вопросам, относящимся к твердости и пластичности кристаллов, к явлениям эпитаксии, двойникования, морфологии вынужденных форм округлых кристаллов.**

Огромный методологический опыт, вобравший в себя этот широкий спектр исследований природных и искусственных кристаллов, нашел воплощение в трактовке основ морфологической кристаллографии, в ряде новых фундаментальных результатов, обобщенных в докторской диссертации «Морфология кристаллов» (1970 г.). Эта монография, ставшая основой настоящей книги, характеризуется строгим геометрическим симметричным анализом морфологических проблем в современной кристаллографии. Особого внимания в ней заслуживает вывод всех возможных геометрических законов двойникования.

Проблемы кристалломорфологии реального кристалла занимали центральное место в творчестве последних лет В. А. Мокиевского. Он опубликовал ряд статей по геометрическим и симметричным аспектам несовершенств структуры кристаллов, точечных дефектов, дислокаций, межзеренных границ, эпитаксиальных текстур, полисинтетических и комплексных двойников, форм двойников с входящими углами.*** В. А. Мокиевский работал также над

* См. Мокиевский В. А. Влияние внешних условий на форму роста кристаллов.— В кн.: Кристаллография. Труды Федоровской сессии 1953 г. Л., Изд-во ЛГУ, 1955, вып. 4.

** Укажем несколько работ этого цикла: Скелетный рост кристаллов в вязкой среде.— ЗВМО, 1952, ч. 81, вып. 2 (совместно с С. Н. Семенюк); Симметрия, антисимметрия и псевдосимметрия индукционных поверхностей.— Кристаллография, 1957, т. 2, вып. 2 (совместно с И. И. Шафрановским). Проявление пластической деформации в алмазе и некоторые вопросы, связанные с пластичностью кристаллов.— ЗВМО, 1962, ч. 91, вып. 4 (совместно с В. М. Титовой, З. В. Бартошинским); Геометрический вывод законов двойникования кристаллов.— Кристаллография, 1966, т. 11, вып. 4 (совместно с И. И. Шафрановским, П. К. Вовком, И. И. Афанасьевым); Цветная симметрия, реальный кристалл и сложное двойникование.— Минерал. сб. Львов. гос. ун-та, 1966, № 20, вып. 2; Группы симметрии двойников.— В кн.: Проблемы кристаллохимии минералов и эндогенного минералообразования. Л., Наука, 1967; Обобщение групп симметрии двойников.— Кристаллография, 1968, т. 13, вып. 3.

*** См., например, статьи: Симметрия эпитаксиальных текстур.— Кристаллография, 1969, т. 14, вып. 5 (совместно с Ю. М. Чащиновым); Симметрия двойниковых границ.— Минерал. сб. Львов. гос. ун-та, 1969, № 23, вып. 2 (совместно с Н. Г. Соколовой); Вывод и систематика точечных дефектов структуры кристаллов.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1976, т. 40, № 7.

выводом полиэдров с входящими углами, кристаллографической характеристикой внутренних стенок пирамид роста, выводом предельных простых форм — гранных, реберных, вершинных. Все эти работы он предполагал включить в обобщающий труд «Морфология кристаллов», но не успел этого в полной мере осуществить.

Редакторы данной книги не решились переработывать основной ее текст, подготовленный автором. Поздние работы В. А. Мокиевского, дополняющие соответствующие по тематике разделы монографии, помещены в конце книги (см. Приложения). Всего В. А. Мокиевский опубликовал более 150 работ. Свои публикации он часто готовил вместе с коллегами и учениками-студентами, аспирантами. Такие работы вошли живой тканью в книгу.

Рецензенту Ю. О. Пунину выражается благодарность за участие в создании этой книги. Надо надеяться, что книга принесет большую пользу широкому кругу исследователей морфологии кристаллов — геологам, минералагам, кристаллографам, физикам, химикам, и не только учащейся молодежи, но и специалистам. А всем, кто знал В. А. Мокиевского, она воссоздаст в памяти цельный облик этого крупного исследователя, который всю творческую жизнь посвятил одной увлекательной и актуальной проблеме — симметрии и морфологии кристаллов.

И. И. Шафрановский, В. А. Франк-Каменецкий, М. Д. Любалин

ВВЕДЕНИЕ

Изучение внешней формы кристаллов сыграло большую роль в развитии кристаллографии.* Интерес к формам кристаллов за трехсотлетнюю историю этой науки не был постоянным. До открытия дифракции рентгеновских лучей (1912 г.) морфология являлась одним из главных источников знаний о кристаллах и занимала почетное место в кристаллографических исследованиях. В этот период на основании изучения внешней формы кристаллов были открыты важнейшие законы кристаллографии, выведены простые гранные формы (И. Ф. Гессель, Е. С. Федоров), изобретены гониометры и тщательно описаны многочисленные формы природных и искусственных кристаллов. Более того, в дорентгеновский период развития кристаллографии были заложены основы учения о реальном кристалле (в России М. А. Толстопятов, М. В. Ерофеев, А. Н. Карножицкий). Интуиция гениальных ученых того времени (Р. Ж. Гаюи, О. Браве, Е. С. Федоров) позволила создать основы теории атомной структуры кристаллов и заложила тем самым фундамент современной кристаллографии.

После открытия М. Лауэ центр интересов кристаллографов переместился в структурную кристаллографию и кристаллохимию. Формой кристаллов занимались сравнительно немногие исследователи. Однако и этот период был отмечен существенными достижениями в области кристалломорфологии. Были выведены 146 кристаллографических разновидностей простых гранных форм (Г. Б. Бокий). Аналогично им было найдено 1403 структурные разновидности этих форм (И. И. Шафрановский). Был осуществлен первый вывод реберных форм (И. И. Шафрановский, В. И. Михеев). Много внимания уделялось вопросам связи внешней формы со структурой кристаллов и кристаллообразующей средой (И. И. Шафрановский, И. Д. Донней, Х. Харкер, П. Хартман, А. Ф. Уэлс и многие другие). Эти работы велись в двух направлениях — в теоретическом и экспериментальном.

Большим вкладом в познание реального кристаллообразования явились созданное И. И. Шафрановским представление о так называемых ложных формах и применение принципа симметрии

* Подробная история кристаллографии, в том числе история исследований в области морфологии кристаллов, изложена в работах И. И. Шафрановского [1962, 1978, 1980 гг.]. Здесь мы останавливаемся лишь на основных ее моментах.

П. Кюри к исследованию взаимодействия растущего кристалла с маточной средой.

К этому времени уже были разработаны современные теории роста кристаллов. На помощь классическим построениям Коссея—Странского пришла дислокационная теория роста кристаллов. Эти теории, однако, не учитывают структурных особенностей кристаллообразующей среды и дают возможность предвидеть очень небольшой круг явлений, сопровождающих образование кристалла. Поэтому выращивание кристаллов до сих пор является более искусством, чем наукой. Эмпирический поиск в этом деле играет решающую роль.

За последнее десятилетие в связи с все увеличивающимися потребностями науки и техники в монокристаллическом материале интерес к макрокристаллографии сильно возрос. Число публикаций с описаниями форм кристаллов растет с каждым годом. С большим сожалением приходится констатировать, что часто эти описания по сравнению с описаниями прежних исследователей отличаются меньшей тщательностью, несмотря на то что появились более тонкие методы исследования. Старые и надежно работающие приборы, такие как гониометр и фотогониометр, сравнительно редко применяются при изучении кристаллической поверхности. Между тем эти приборы и сегодня могут принести большую пользу. Экспериментаторы прекрасно понимают, что формой кристаллов обусловлен ряд объемных неоднородностей. Особенно четко эти неоднородности проявляют себя в тонких эпитаксиальных слоях при производстве монокристаллических пленок. Управление формой кристаллов в пределах, возможных на сегодняшний день, требует хорошего знания морфологии.

Кристалл является чутким индикатором кристаллообразующей среды. Тонкий знаток природных и искусственных кристаллов Г. Г. Леммлейн указывал, что все элементы поверхности кристалла при росте оставляют следы в его объеме. Поэтому морфологию кристаллов принято делить на внешнюю и внутреннюю (анатомия кристаллов). Последняя необходима при исследовании генезиса минеральных индивидов (кристаллов) и способствует изучению онтогении минералов (Д. П. Григорьев). Не меньшее значение имеет морфология при изучении роста кристаллов. При выращивании кристаллов весьма желательно заранее, исходя из его формы, знать хотя бы приблизительно, насколько кристалл будет однороден и как неоднородности, обусловленные формой, будут распределены в его теле.

Образование кристаллов в лаборатории и в природных условиях нередко сопровождается возникновением блочности. При выращивании, например, полупроводниковых кристаллов из расплавов и газовой фазы часто образуются переориентированные области, часть из которых является двойниками. Сдвойникованные кристаллы среди минералов распространены очень широко. Знание закономерностей двойникования и форм двойников, закономерностей блочного строения и порождающих его причин несом-

ненно должно принести пользу при получении и использовании реальных кристаллов. Первое, с чем сталкивается исследователь и производственный работник,— это форма кристалла, которая в зашифрованном виде несет значительную информацию об условиях образования и дефектности материала. При выращивании кристаллов кремния методом бестигельной зонной плавки по форме можно определять начало и конец роста бездислокационного кристалла. По внешней форме кристаллов германия и кремния, выращиваемых методом Чохральского, можно судить об отклонении направления вытягивания от задаваемого затравкой, что важно при оценке распределения неоднородностей в объеме. Создавая определенную симметрию в кристаллообразующей среде, можно в некоторых пределах управлять внешней формой кристалла и связанной с ней дефектностью. Таким образом, изучение формы кристалла может иметь большое практическое значение при решении вопросов, связанных с управлением процессом кристаллизации. Особый интерес приобретает морфология при анализе результатов по выращиванию кристаллов способом А. В. Степанова.

В настоящей работе рассмотрены вопросы морфологии плоскогранных и кривогранных кристаллов. На новой основе и с новыми результатами сделан вывод реберных форм с помощью привычных для кристаллографов стереографических проекций. Приведен способ изображения ребер и вершин плоскогранных кристаллов на стереографической проекции и переход от внешней морфологии к внутренней. Даются математические приемы для описания кристаллических монстрозитетов, таких как скелетные кристаллы. Для описания реальных кристаллов предлагается цветная симметрия. Вторая часть работы содержит исследования автора по двойникам и другим кристаллическим сросткам. Материалы теоретических исследований иллюстрируются экспериментальными работами автора, проведенными совместно с сотрудниками и аспирантами кафедры кристаллографии ЛГИ, и некоторых заводов, выращивающих монокристаллы. Часть иллюстративного материала представлена описанием соответствующих минералов. Работа в целом носит методический характер и может быть использована в качестве руководства при решении различных морфологических задач.

За дискуссии и полезные советы автор благодарит профессоров И. И. Шафрановского, В. Б. Татарского, Д. П. Григорьева, В. А. Копчика, В. А. Франк-Каменецкого, своих покойных учителей и друзей профессоров В. И. Михеева, О. М. Аншелеса, Н. Н. Стулова, А. В. Степанова, Н. С. Грейвера. За помощь в работе автор признателен В. Н. Войцеховскому, М. Д. Любалину, Н. Г. Соколовой, Ю. М. Чашинову, В. Н. Третьякову, Г. И. Дольво-Добровольской, С. Н. Самусиной, Д. И. Левинзону, Ю. М. Смирнову, И. Ю. Литвиновой, Н. В. Бессоновой, а также всем сотрудникам кафедр кристаллографии Ленинградского горного института и Ленинградского университета.

СИММЕТРИЯ И МОРФОЛОГИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ

СИММЕТРИЯ ИДЕАЛЬНЫХ И РЕАЛЬНЫХ ФОРМ КРИСТАЛЛОВ

Симметрия идеальных кристаллов описывается 32 классами, приведенными в столбце А табл. 1, где в скобках указан порядок класса. Здесь же в столбце Б перечислены нетривиальные подгруппы каждого класса. Если число неэквивалентных ориентировок этих подгрупп больше единицы, то оно отмечено в скобках.

ТАБЛИЦА 1

Симметрия идеальных кристаллов

Класс симметрии	Нетривиальные подгруппы
А	Б
$1^{(1)}$	
$\bar{1}^{(2)}$	
$m^{(2)}$	
$2^{(2)}$	
$2/m^{(4)}$	$m, 2, \bar{1}$
$222^{(4)}$	$2 (3)$
$2mm^{(4)}$	$2, m (2)$
$mmm^{(8)}$	$222, 2mm (3), 2/m (3), 2 (3), m (3), \bar{1}$
$3^{(3)}$	
$\bar{3}^{(6)}$	$3, \bar{1}$
$3m^{(6)}$	$3, m$
$32^{(6)}$	$3, 2$
$\bar{3}m^{(12)}$	$32, 3m, \bar{3}, 3, 2/m, 2, m, \bar{1}$
$4^{(4)}$	2
$4/m^{(8)}$	$4, \bar{4}, 2/m, 2, m, \bar{1}$
$4mm^{(8)}$	$4, 2mm (2), 2, m (2)$
$422^{(8)}$	$4, 222 (2), 2 (3)$
$4/mmm^{(16)}$	$422, 4mm, \bar{4}2m (2), 4/m, mmm (2), 4, \bar{4}, 222 (2), 2mm (3), 2/m (3), 2 (3), m (3), \bar{1}$

Класс симметрии	Нетривиальные подгруппы
А	Б
$\bar{4}2m^{(8)}$	$\bar{4}, 222, 2mm, 2(2), m$
$\bar{4}^{(4)}$	2
$6^{(6)}$	3, 2
$6/m^{(12)}$	6, $\bar{6}, 3, 2/m, 3, 2, \bar{1}$
$6mm^{(12)}$	6, $3m(2), 2mm, 3, 2, m(2)$
$622^{(12)}$	6, $32(2), 222, 3, 2(3)$
$6/mmm^{(24)}$	$622, 6mm, \bar{6}2m(2), 6/m, \bar{3}m(2), mmm, 6, \bar{6}, 32(2), 3m(2), \bar{3}, 222, 2mm(3), 2/m, 3, 2(3), m(3), \bar{1}$
$\bar{6}^{(6)}$	3, m
$\bar{6}2m^{(12)}$	$\bar{6}, 32, 3m, 2mm, 3, 2, m(2)$
$23^{(12)}$	222, 3, 2
$m\bar{3}^{(24)}$	23, $mmm, \bar{3}, 222, 2mm, 2/m, 3, 2, m, \bar{1}$
$\bar{4}3m^{(24)}$	23, $\bar{4}2m, 3m, \bar{4}, 222, 2mm, 3, 2, m$
$432^{(24)}$	23, $422, 32, 4, 222(2), 3, 2(2)$
$m\bar{3}m^{(48)}$	$432, \bar{4}3m, m\bar{3}, 4/mmm, 23, \bar{3}m, 422, \bar{4}2m(2), 4mm, 4/m, mmm(2), 32, 3m, \bar{3}, 4, \bar{4}, 222(2), 2mm(2), 2/m(2), 3, 2(2), m(2), \bar{1}$
$532^{(60)}$	23, 52, 5, 32, 3, 222, 2
$\bar{5}3m^{(120)}$	532, $m\bar{3}, 23, \bar{5}, \bar{3}, 5, 3, 5m, 3m, 52, 32, \bar{5}m, \bar{3}m, mmm, 222, 2mm, 2/m, 2, m, \bar{1}$

Грани кристаллов по симметрии, как известно, могут отвечать 10 плоским односторонним (пирамидальным) группам: 1, 2, 3, 4, 6*m*, 2*mm*, 3*m*, 4*mm*, 6*mm*. Симметрия ребер кристаллов описывается четырьмя группами, дающими с учетом ориентировки элементов симметрии относительно ребра пять случаев: 1, 2, *m*, $\perp m$ и 2*mm*. Симметрия вершин кристаллов, так же как и граней, описывается 10 пирамидальными группами. Симметрия двусторонних плоскостей (обе стороны эквивалентны) описывается 20 группами (27 некубических минус 7 пирамидальных), дающими 21 случай с учетом ориентировки элементов симметрии относительно плоскости (в записи группы на первом месте указан элемент симметрии, совпадающей с нормалью к плоскости): $\bar{1}$, 12, 1*m*, *m*/2, 2/*m*, *mm*2, 222, *mmm*, $\bar{3}$, 32, $\bar{3}m$, 6/*m*, 622, 6/*mmm*, $\bar{6}$, $\bar{6}2m$, 4/*m*, 422, 4/*mmm*, $\bar{4}$, $\bar{4}2m$. Симметрия направлений в кристаллах описывается 27 некубическими классами, дающими с учетом ориентировки класса относительно направления 31 случай (21 случай для

двусторонних плоскостей плюс 10 случаев односторонних плоскостей), т. е. симметрией пинакоидов и моноэдров. Симметрия направлений, лежащих в двусторонних плоскостях, описывается семью группами низшей категории, дающими также с учетом ориентировки 11 случаев (в записи группы на первом месте указан элемент симметрии, нормальный к плоскости, на втором — параллельный плоскости и направлению и на третьем — ось симметрии 2, перпендикулярная к направлению и лежащая в плоскости): $\bar{1}$, 12, 112, $1m$, $2/m$, $12/m$, $112/m$, $m2m$, $1m2m$, 222 и mmm . Число направлений, вдоль которых проходят оси выше второго порядка, равно 19. Они указаны в группах симметрии односторонних и двусторонних плоскостей.

Для наглядности представления классов симметрии кристаллов, групп симметрии плоскостей и направлений могут быть использованы различные модели и проекции. В качестве образцовой фигуры А. В. Шубников использует тетраэдр с симметрией 1, но иногда отходит от такого моделирования, изображая прямоугольные треугольники с резко различными катетами. Некоторые авторы, например И. Ф. Гессель, использовали штриховку на гранях многогранников. На гномостереографических проекциях для отображения симметрии класса необходимо нанести проекции общей формы или построить стереографические проекции элементов симметрии. Наиболее наглядным нам представляется метод изображения групп симметрии с помощью асимметричных тетраэдров или треугольников, у которых обратная сторона помечена чертой, параллельной одному из катетов. Закрашивание обратной стороны треугольника в черный цвет нежелательно в связи с существующим сейчас понятием об антисимметрии. При необходимости отображения на модели векториальных свойств плоскостей и направлений кристалла очень удобно придать этим образцовым фигурам вид стрелки, для чего следует у тетраэдра или треугольника продлить длинный катет за пределы фигуры. Вообще же может быть использован любой способ, дающий наибольшую наглядность описываемого явления или предмета.

На рис. 1 показаны 32 класса симметрии при помощи параллелепипедов, формы которых отвечают элементарным ячейкам кристаллов. Стрелки отображают симметрию граней, ребер и вершин этих фигур. Раскрашивая треугольники на концах стрелок, можно отобразить двухцветную и многоцветную (по О. Виттке и Д. Карридо) симметрию этих многогранников, что на некоторых примерах показано на том же рисунке.

Симметрия направлений и плоскостей кристаллов показана на рис. 2 в виде стрелок, концы которых венчают шубниковские тетраэдры. Если одна вершина тетраэдра лежит под плоскостью чертежа, то невидимые ребра не изображены. Параллельная чертежу плоскость симметрии отмечается точкой в центре основания тетраэдра. Для 16 направлений, лежащих в плоскости чертежа, в середине стрелки изображены кружки стереографической проекции, на которой точками отмечено то направление, по которому

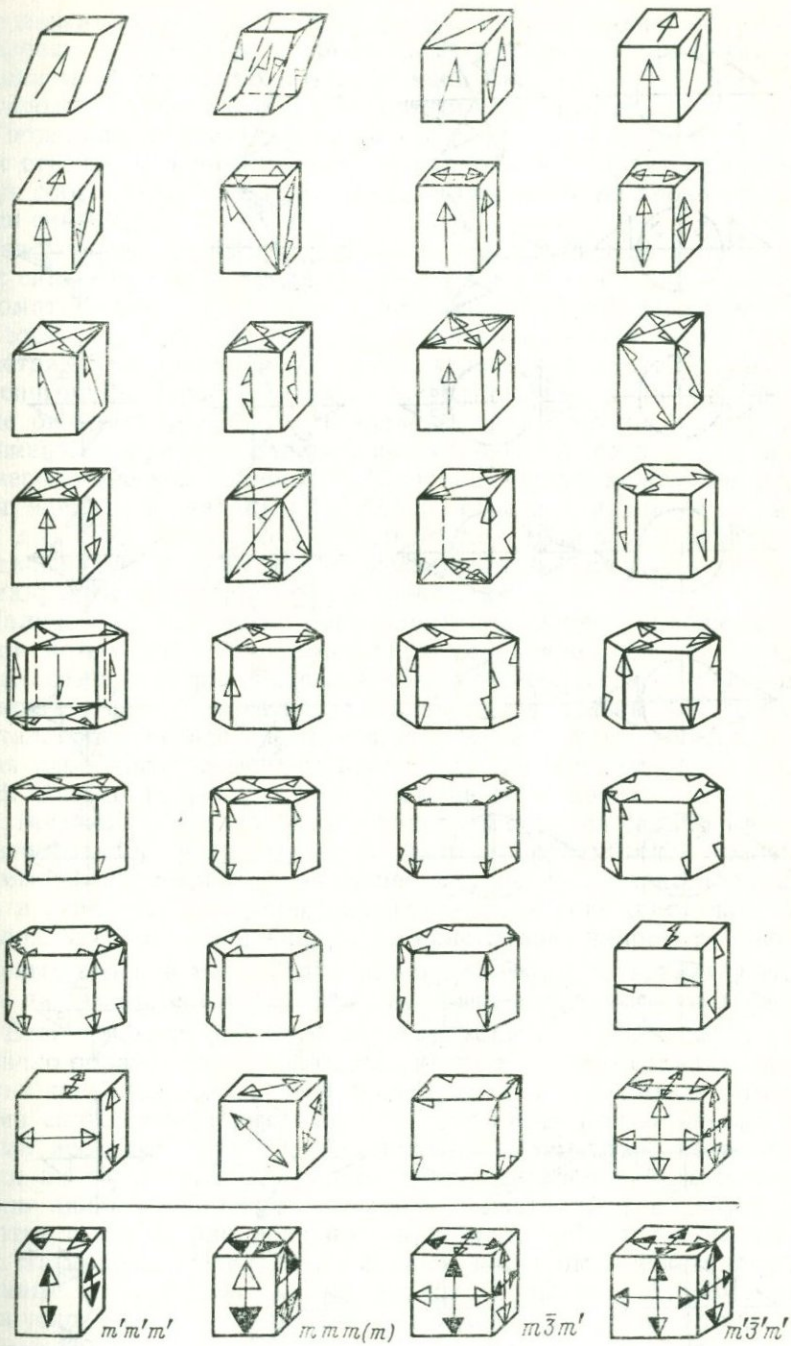


Рис. 1. Модели 32 одноцветных и примеры цветных классов симметрии.

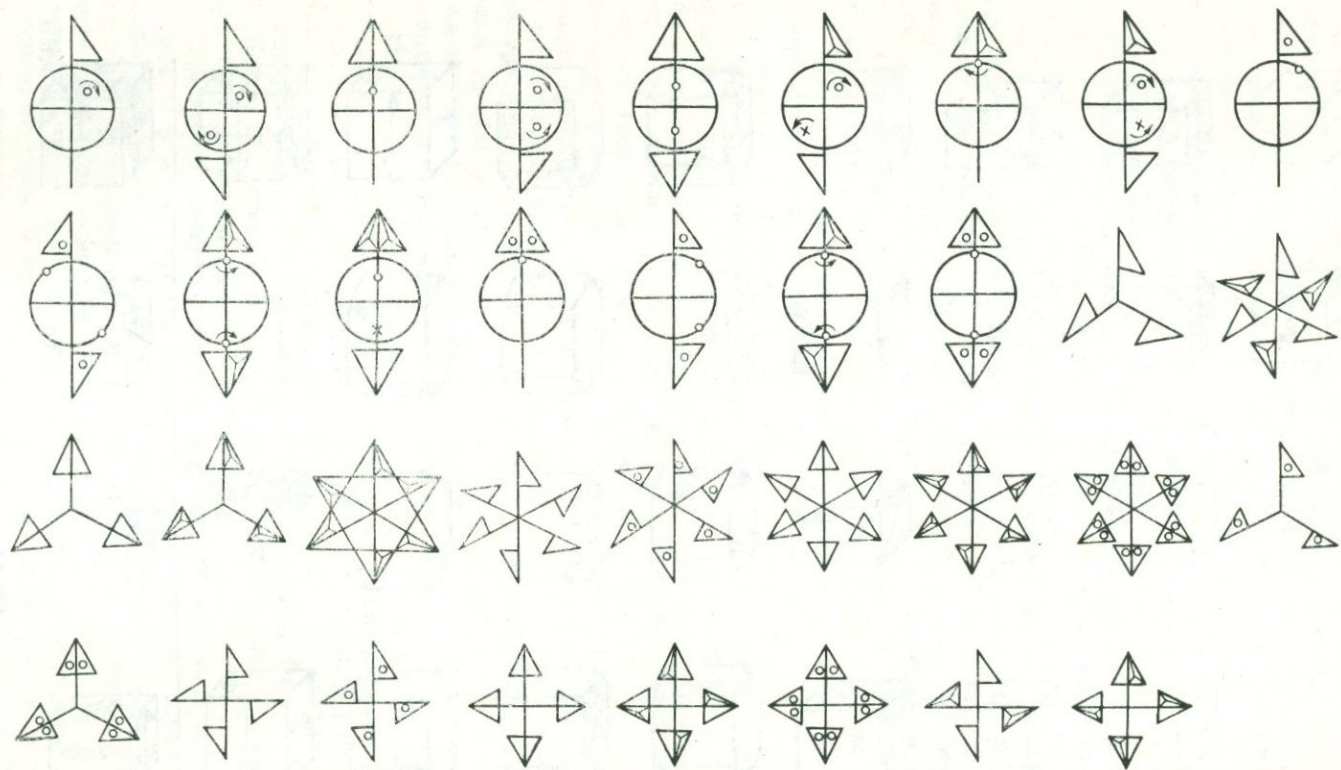


Рис. 2. Модели из стрелок, отображающие симметрию направлений и плоскостей кристаллов.

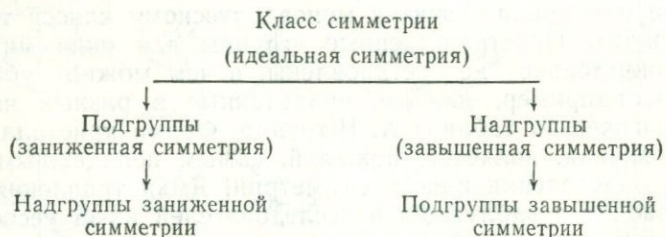
будет двигаться модель такой стрелки, изготовленная, например, из дерева, в изотропной среде. Если движение сопровождается вращением, то это отмечено на проекции дополнительной стрелкой. Остальные 19 направлений, с которыми совмещены оси выше второго порядка, проходят нормально к плоскости чертежа. Модели таких стрелок при движении в изотропной среде будут вращаться вокруг собственной оси, если вдоль направления не проходят плоскости симметрии.

Известно, насколько трудно однозначно определить точечный класс симметрии кристалла. Примером в этом отношении является бихромат калия, тщательно исследованный А. В. Шубниковым. Для этого вещества до сих пор не известно, имеет ли он центр симметрии или принадлежит к моноклинному классу триклинной сингонии. Пространственные группы для ряда минералов также окончательно не установлены, в чем можно убедиться, сравнивая, например, данные, приведенные в разных изданиях «Минералогических таблиц» Х. Штрунца. Форма кристалла, даже почти идеальная, является, пожалуй, самым ненадежным критерием для определения класса симметрии. Ямки травления также нередко вводят в заблуждение исследователей из-за несоответствия их формы симметрии граней кристалла.

Наличие в огранении кристалла форм общего положения не всегда может служить достаточным основанием для установления класса симметрии.* Дело в том, что в классах, содержащих плоскости и центр симметрии, по причинам правизны или левизны кристаллообразующей среды половина граней форм общего положения либо может совсем не проявиться, либо будет слабо развита. В. Клебер [92] назвал это явление гипоморфией. Профессор В. И. Михеев любил показывать кристалл берилла (класс $6/mmm$) со штриховкой, расположенной косо к ребрам гексагональной призмы. Десимметризация внешней формы этого кристалла ставила в тупик специалистов, знающих симметрию кристаллов минералов. При исследовании роста кристаллов, например, алюмокалиевых квасцов мы нередко условно относим их к классу $m\bar{3}m$, когда на самом деле кристаллы этого вещества относятся к классу $m\bar{3}$. Если сфотографировать скульптуру граней достаточно симметрично образованного кристалла кварца, а затем сравнить фотографии граней одной простой формы, то легко убедиться, что они весьма сильно отличаются друг от друга. Чем более тонкими методами исследуются реальные кристаллы, тем ниже может оказаться их симметрия. Очевидно, что предельное понижение симметрии любого реального кристалла может дойти до группы 1. Понятие о симметрии реального кристалла является относительным. Наиболее близкими к идеальным могут быть кристаллы, полученные из очень чистых материалов (например, полупроводники) в условиях, максимально исключающих искажения структуры.

* Вопрос о симметрии общей формы подробно рассмотрен в работе [25].—
Ред.

При изучении симметрии формы реального кристалла необходимо учитывать две возможности ее изменения. Первое — понижение симметрии до всех возможных подгрупп точечного класса (заниженная симметрия) (табл. 1) и второе — повышение симметрии формы, которое может быть описано надгруппами точечного класса, включая предельные группы (завышенная симметрия). Кроме того, искажение формы реального кристалла по сравнению с идеальной может зайти довольно далеко в том смысле, что симметрия формы будет описываться надгруппами «заниженной симметрии» или подгруппами «завышенной симметрии» и т. д. Эти изменения симметрии внешней формы кристаллов можно показать в виде схемы:



Запись симметрии реальных форм кристаллов может быть различной. Наиболее удобно для заниженной и завышенной симметрии на первом месте записывать класс идеальной симметрии, а на втором месте в скобках указывать группу заниженной или завышенной симметрии. В более сложных случаях группу симметрии реальной формы можно ставить в скобках на втором месте после группы заниженной или завышенной симметрии. Так, для кристалла кварца, внешняя форма которого имеет видимую плоскость симметрии (рис. 3, а), проходящую, например, вдоль ребра между положительным и отрицательным ромбоэдрами, следует произвести запись в таком порядке: $32 (6/m\bar{3}m, m)$. В этой записи отражен класс симметрии кварца, его возможная группа завышенной симметрии, подгруппой которой является симметрия реальной формы. Если плоскость видимой симметрии проходит вдоль ребра между большими гранями положительного ромбоэдра (рис. 3, б), то запись следует изменить так: $32 (\bar{3}m, m)$. Смысл записей такого типа поясним еще на примере симметрии реальных кристаллов KDP, принадлежащих точечному классу $\bar{4}2m$. На этих кристаллах присутствуют грани дипирамиды $\{101\}$ и призмы $\{100\}$. Тетраэдры исчезают на ранних стадиях регенерации. Поэтому видимая симметрия кристаллов может повыситься до класса $4/m\bar{3}m$. Реально же из-за наличия ребра вместо вершины при пересечении гранями дипирамиды главной оси симметрии видимая симметрия может понизиться до группы $\bar{4}2m$ (рис. 3, в) или до $m\bar{3}m$ (рис. 3, г). Тогда запись для первого случая будет $\bar{4}2m (4/m\bar{3}m, \bar{4}2m)$, причем ориентировка группы видимой симметрии не будет полностью совпадать с ориентировкой точечной

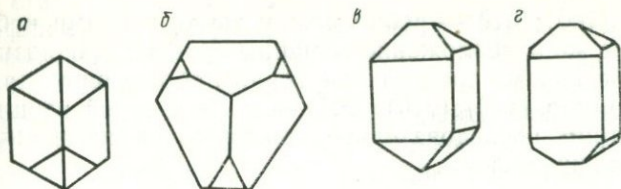


Рис. 3.

a — кристалл кварца с плоскостью симметрии, проходящей через ребра положительного и отрицательного ромбоэдров (вид вдоль главной оси); *б* — кристалл кварца с плоскостью симметрии, проходящей вдоль ребра между гранями положительного ромбоэдра; *в* — кристалл KDP с видимой симметрией $42m$; *г* — кристалл KDP с видимой симметрией $3m$.

группы идеальной симметрии. Для второго случая запись будет выглядеть так: $\bar{4}2m$ ($4/mmm$, mmm). Поскольку искажения внешней формы кристалла сказываются на внутренней морфологии и распределении некоторых дефектов, такая запись симметрии реальной формы кристалла может быть полезной.

Сказанное о симметрии реального кристалла относится и к граням и направлениям, видимая симметрия которых подчиняется той же схеме. Ребра реального кристалла могут изменить свою идеальную симметрию только в пределах пяти групп симметрии ребер. Направления, лежащие в односторонних и двусторонних плоскостях, могут изменить свою симметрию только в пределах 16 групп — 5 групп симметрии ребер плюс 11 групп симметрии направлений в двусторонних плоскостях.

В дальнейшем будет показано, как рассмотренные с позиции симметрии искажения идеальной формы кристаллов находят свое отражение не только на внешней, но и на внутренней морфологии и как это отражается на распределении некоторых дефектов в кристаллах.*

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ

В современной кристалломорфологии [56, 58] различают простые гранные, реберные и вершинные формы. Простой формой называют совокупность симметричных элементов ограничения кристалла (граней, ребер и вершин). Эти формы могут быть охарактеризованы символами. Как известно, расположение в пространстве грани, принадлежащей к одной простой форме, описывается миллеровским символом. Пространственное расположение ребра, принадлежащего к одной реберной форме, может быть описано символами двух граней, пересекающихся по этому ребру. Двоеточие между символами граней указывает на их пересечение,

* Ряд моментов, относящихся к этим вопросам, рассмотрен в статьях И. И. и Г. И. Шафрановских [ЗВМО, 1977 г., и Зап. ЛГИ, 1977 г.], а также в работе М. Д. Любалина, опубликованной в 1980 г. в Калининне (сб. Физика кристаллизации). — *Ред.*

например, $(100):(010)$ — ребро между двумя гранями куба. Пространственное же расположение вершины кристалла однозначно описывается символами трех и более граней, образующих данную вершину, например, $(100):(010):(001)$ — символ одной вершины куба.

Рассмотрим последовательно кристаллографию гранных, реберных и вершинных форм.

Гранные формы

Из элементарной кристаллографии известны 47 простых форм. Автором теоретического вывода простых форм является создатель первого вывода всех классов конечной симметрии (в том числе и кристаллографических) И. Ф. Гессель [1830 г.]. Параллельно с теоретическим выводом простые формы были установлены на реальном кристаллическом материале. Н. И. Кокшаровым [1863 г.] даны все простые формы кубической сингонии. В 1891 г. Е. С. Федоров в «Кратком руководстве по кристаллографии» параллельно с систематическим описанием 32 классов симметрии привел полный перечень всех простых форм, соответствующих тому или иному классу симметрии, и дал их изображение. Федоровскую трактовку простых форм с успехом использовал впоследствии П. Грот в руководствах по кристаллографии, а далее она была повторена в учебниках, пособиях и наглядных таблицах во всем мире.

Несмотря на имевшийся полный вывод простых форм, вопрос о числе их долгое время не был выяснен до конца. Кристаллографы длительное время смешивали понятия о геометрически и физически различных простых формах. Хорошо известен спор о том, являются ли осевой диэдр (сфеноид) и плоскостной диэдр (дома) одной простой формой или же они представляют собой две различные формы. В письме к Е. С. Федорову, относившему оба диэдра к одной геометрической простой форме, П. Грот писал: «Если принимать во внимание содержание, то «сфеноид» и «дома» — две различные формы, которые нельзя идентифицировать» [Переписка Е. С. Федорова с П. Гротом, 1955 г., с. 198—199]. Спор о диэдрах возобновился в 1936 г. Американский кристаллограф А. Роджерс высказался в пользу существования не 47, а 48 простых форм на том основании, что «сфеноид» и «дома» — две различные формы. Окончательную ясность в этот вопрос внес А. К. Болдырев. Он сформулировал определение простой формы и показал чисто геометрический характер этого понятия [78]: две простые формы различны, если они различаются числом граней, или их очертаниями, или их взаимным расположением; формы, обладающие одними и теми же указанными свойствами, принадлежат к одной простой форме. При этом симметрия граней не принимается в расчет, учитывается только геометрия формы. Так, например, диэдрами называются простые формы, состоящие из двух пересекающихся граней. Все эти диэдры тождественны геометрически и принадлежат к одной простой форме.

После статьи А. К. Болдырева было установлено, что в кристаллографии существует только 47 простых форм. Однако и приведенное высказывание П. Грота о том, что «сфеноид» и «дома» различны по своему содержанию, в основе правильно. П. Грот и А. Роджерс не увидели, что все одинаковые геометрически, но различные по симметрии, а следовательно, и по физическим и кристалломорфологическим свойствам простые формы (не только диэдры) различны по своему содержанию. Это обстоятельство подметил А. В. Шубников [66]: «Кристаллография различает между собой пять кубов, в то время как геометрия имеет дело только с одним кубом». Сказанное было иллюстрировано пятью типами штриховки, характеризующей различную симметрию граней кубов, принадлежащих к пяти классам симметрии кубической сингонии. Отметим, что пять разновидностей куба с помощью штриховки были уже продемонстрированы И. Ф. Гесселем в 1862 г. На эти разновидности, однако, никто не обратил внимания. А. В. Шубникову рисунки из работы И. Ф. Гесселя, по-видимому, были не известны.

Вывод всех кристаллографически различных простых форм принадлежит Г. Б. Бокию [8]. В основе вывода лежит следующее определение: две одинаковые простые формы являются кристаллографически различными (т. е. принадлежат к двум различным кристаллографическим разновидностям), если они различаются элементами симметрии или расположением последних относительно граней. В результате пересмотра форм всех 32 классов симметрии Г. Б. Бокий вывел 146 кристаллографических разновидностей простых форм и 193 разновидности с учетом правых и левых форм. Выведенные разновидности он характеризовал с помощью специальных «формул кристаллографического различия», которые содержат перечисление элементов симметрии, расположенных перпендикулярно, параллельно и косо относительно граней характеризующей формы.

Кристаллографические разновидности простых гранных форм по Г. Б. Бокию можно наглядно продемонстрировать с помощью упомянутых выше стрелок, которые отображают симметрию направлений, расположенных в гранях простых форм, что показано в табл. 2. Если простая форма состоит из параллельных граней (22 простые формы), то стрелками изображается двусторонняя симметрия, причем, как было сказано выше, обратная сторона флажка стрелки помечена чертой, параллельной короткому катету. В тех случаях, когда для различия двух разновидностей демонстрации одной грани, совпадающей с плоскостью таблицы, недостаточно, приводится часть развертки их моделей. В первой колонке табл. 2 указан номер разновидности, во второй — вид симметрии, в котором данная форма встречается, в третьей — символ и односторонняя симметрия грани, а в четвертой — стрелками симметрия граней. Для форм с параллельными гранями переворачивающие операции симметрии в записи не отражены, так как они уясняются из расположения стрелок. Модели простых форм с на-

Изображение граней 146 кристаллографических разновидностей простых форм

Номер разновидности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разновидности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
Моноэдр				Пинакоид			
1	1	$\frac{hkl}{1}$		11	$\bar{1}$	$\frac{hkl}{1}$	
2	2	$\frac{010}{2}$		12	2	$\frac{h0k}{1}$	
3	m	$\frac{h0l}{m}$		13	m	$\frac{010}{1}$	
4	2mm	$\frac{001}{2mm}$		14	2/m	$\frac{010}{2}$	
5	4	$\frac{001}{4}$		15	2/m	$\frac{h0l}{m}$	
6	4mm	$\frac{001}{4mm}$		16	222	$\frac{100\ 010\ 001}{2}$	
7	3	$\frac{0001}{3}$		17	2mm	$\frac{100\ 010}{m}$	
8	3m	$\frac{0001}{3m}$		18	mmm	$\frac{100\ 010\ 001}{2mm}$	
9	6	$\frac{0001}{6}$		19	$\bar{4}$	$\frac{001}{2}$	
10	6mm	$\frac{0001}{6mm}$		20	422	$\frac{001}{4}$	

Номер разновидности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разновидности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
21	$\bar{4}2m$	$\frac{001}{2mm}$		33	m	$\frac{hkl}{1}$	
22	$4/m$	$\frac{001}{4}$		34	$2mm$	$\frac{0kl\ h0l}{m}$	
23	$4/mmm$	$\frac{001}{4mm}$		Ромбическая призма			
24	32	$\frac{0001}{3}$		35	$2/m$	$\frac{hkl}{1}$	
25	$\bar{3}$	$\frac{0001}{3}$		36	222	$\frac{0kl\ h0k\ hk0}{1}$	
26	$\bar{3}m$	$\frac{0001}{3m}$		37	$2mm$	$\frac{hkl}{1}$	

27	$\bar{6}$	$\frac{0001}{3}$		38	mmm	$\frac{0kl\ h0k\ hk0}{m}$	
28	$\bar{6}m2$	$\frac{0001}{3m}$		Ромбический тетраэдр			
29	622	$\frac{0001}{6}$		39	222	$\frac{hkl}{1}$	
30	$6/m$	$\frac{0001}{6}$		Ромбическая пирамида			
31	$6/mmm$	$\frac{0001}{6mm}$		40	$2mm$	$\frac{hkl}{1}$	
		Диэдр		Ромбическая дипирамида			
32	2	$\frac{hkl}{1}$		41	mmm	$\frac{hkl}{1}$	
				Тетрагональный тетраэдр			
				42	$\bar{4}$	$\frac{hkl}{1}$	

Номер разновидности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разновидности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
43	$\bar{4}2m$	$\frac{hkl}{m}$		Тетрагональная дипирамида			
44	$\bar{4}$	$\frac{hk0}{1}$		54	422	$\frac{h0l \ hhl}{1}$	
45	4	$\frac{hk0}{1}$		55	$\bar{4}2m$	$\frac{h0l}{1}$	
46	4mm	$\frac{100 \ 110}{m}$		56	4/m	$\frac{hkl}{1}$	
47	422	$\frac{100 \ 110}{2}$		57	4/mmm	$\frac{h0l \ hhl}{m}$	
							Дитетрагональная призма

48	$\bar{4}2m$	$\frac{100}{2}$		58	4mm	$\frac{hk0}{1}$	
49	$\bar{4}2m$	$\frac{110}{m}$		59	422	$\frac{hkl}{1}$	
50	4/m	$\frac{hk0}{m}$		60	$\bar{4}2m$	$\frac{hk0}{1}$	
51	4/mmm	$\frac{100 \ 110}{2mm}$		61	4/mmm	$\frac{hk0}{m}$	
							Тетрагональная пирамида
52	4	$\frac{hkl}{1}$		62	4mm	$\frac{hkl}{1}$	
53	4mm	$\frac{h0l \ hhl}{m}$		63	4/mmm	$\frac{hkl}{1}$	
							Дитетрагональная пирамида
							Дитетрагональная дипирамида

Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
Тетрагональный трапецоэдр				74	$\bar{6}$	$\frac{h\bar{k}l}{1}$	
64	422	$\frac{hkl}{1}$		Тетрагональный скаленоэдр			
65	$\bar{4}2m$	$\frac{hkl}{1}$		75	$\bar{6}m2$	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{2h \cdot \bar{h} \cdot \bar{h} \cdot l}$ m	
Тригональная призма				Ромбоэдр			
66	3	$\frac{h\bar{k}0}{1}$		76	32	$\frac{h0\bar{k}l \quad 0k\bar{k}l}{1}$	
67	3m	$\frac{11\bar{2}0 \quad 2\bar{1}\bar{1}0}{m}$		77	$\bar{3}$	$\frac{h\bar{k}l}{1}$	

68	32	$\frac{11\bar{2}0 \quad 2\bar{1}\bar{1}0}{2}$		78	$\bar{3}m$	$\frac{h0\bar{h}l \quad 0k\bar{k}l}{m}$	
69	$\bar{6}$	$\frac{h\bar{k}0}{m}$		Тригональный трапецоэдр			
70	$\bar{6}m2$	$\frac{11\bar{2}0 \quad 2\bar{1}\bar{1}0}{2mm}$		79	32	$\frac{h\bar{k}l}{1}$	
Тригональная пирамида				Дитригональная призма			
71	3	$\frac{h\bar{k}l}{1}$		80	3m	$\frac{h\bar{k}0}{1}$	
72	3m	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{2h \cdot \bar{h} \cdot \bar{h} \cdot l}$ m		81	32	$\frac{h\bar{k}0}{1}$	
Тригональная дипирамида				Дитригональная пирамида			
73	32	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{2h \cdot \bar{h} \cdot \bar{h} \cdot l}$ 1		82	$\bar{6}m2$	$\frac{h\bar{k}0}{m}$	
				83	3m	$\frac{h\bar{k}l}{1}$	

Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
Дитригональная дипирамида							
84	$\bar{6}m2$	$\frac{h\bar{k}l}{1}$		96	$6/mmm$	$\frac{10\bar{1}0}{1}$ $\frac{11\bar{2}0}{2mm}$	
Тригональный скаленоэдр				Гексагональная пирамида			
85	$\bar{3}m$	$\frac{h\bar{k}l}{1}$		97	$3m$	$\frac{h0\bar{h}l}{1}$	
Гексагональная призма							
86	$3m$	$\frac{10\bar{1}0}{1}$		98	6	$\frac{h\bar{k}l}{1}$	
87	32	$\frac{10\bar{1}0}{1}$		99	$6mm$	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{h \cdot 0 \cdot \bar{h} \cdot l}$ m	
				Гексагональная дипирамида			
88	$\bar{3}$	$\frac{h\bar{k}0}{1}$		100	$\bar{3}m$	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{1}$	
89	$\bar{3}m$	$\frac{11\bar{2}0}{2}$		101	$\bar{6}m2$	$\frac{h \cdot 0 \cdot \bar{h} \cdot l}{1}$	
90	$\bar{3}m$	$\frac{10\bar{1}0}{m}$		102	622	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{h \cdot 0 \cdot \bar{h} \cdot l}$ 1	
91	$\bar{6}m2$	$\frac{10\bar{1}0}{m}$		103	$6/m$	$\frac{h \cdot i \cdot \bar{k} \cdot l}{1}$	
92	6	$\frac{h\bar{k}0}{1}$		104	$6/mmm$	$\frac{h \cdot h \cdot 2\bar{h} \cdot l}{h \cdot 0 \cdot \bar{h} \cdot l}$ m	
93	$6mm$	$\frac{10\bar{1}0 \ 11\bar{2}0}{m}$		Гексагональный трапецоэдр			
94	622	$\frac{10\bar{1}0 \ 11\bar{2}0}{2}$		105	622	$\frac{h\bar{k}l}{1}$	
95	$6/m$	$\frac{h\bar{k}0}{m}$					

Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
Дигексагональная призма				Тетрагон-тритетраэдр			
106	$\bar{3}m$	$\frac{hi\bar{k}0}{1}$		116	23	$\frac{hhl\ \bar{h}hl}{1}$	
107	6mm	$\frac{hi\bar{k}0}{1}$		117	$\bar{4}3m$	$\frac{hhl\ h\bar{h}l}{m}$	
108	622	$\frac{hi\bar{k}0}{1}$		Пентагон-тритетраэдр			
109	6/mmm	$\frac{hi\bar{k}0}{m}$		118	23	$\frac{hkl\ h\bar{k}l}{1}$	
Дигексагональная пирамида				Гексатетраэдр			
110	6/m	$\frac{hi\bar{k}l}{1}$		119	$\bar{4}3m$	$\frac{hkl\ h\bar{k}l}{1}$	

Дигексагональная дипирамида				Гексаэдр			
111	6/mmm	$\frac{hi\bar{k}l}{1}$		120	23	$\frac{100}{2}$	
Тетраэдр				121	$m\bar{3}$	$\frac{100}{2mm}$	
112	23	$\frac{111\ 1\bar{1}1}{3}$		122	$\bar{4}3m$	$\frac{100}{2mm}$	
113	$\bar{4}3m$	$\frac{111\ 1\bar{1}1}{3m}$		123	432	$\frac{100}{4}$	
Тригон-тритетраэдр				124	$m\bar{3}m$	$\frac{100}{4mm}$	
114	23	$\frac{hkk\ h\bar{k}k}{1}$		Тетрагексаэдр			
115	$\bar{4}3m$	$\frac{hkk\ h\bar{k}k}{m}$		125	43m	$\frac{hk0}{1}$	
				126	432	$\frac{hk0}{1}$	

Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками	Номер разно- видности	Вид симметрии	Символ и плоскостная симметрия граней	Изображение граней с соответственными стрелками
127	$m\bar{3}m$	$\frac{hk0}{m}$		137	432	$\frac{hkl}{1}$	
		Октаэдр				Гексаоктаэдр	
128	$m\bar{3}$	$\frac{111}{3}$		138	$m\bar{3}m$	$\frac{hkl}{1}$	
129	432	$\frac{111}{3}$		139	23	$\frac{110}{1}$	
130	$m3m$	$\frac{111}{3m}$		140	$\bar{4}3m$	$\frac{110}{m}$	

		Тригон-триоктаэдр		141	$m\bar{3}$	$\frac{110}{m}$	
131	$m\bar{3}$	$\frac{hhl}{1}$		142	432	$\frac{110}{2}$	
132	432	$\frac{hhl}{1}$		143	$m\bar{3}m$	$\frac{110}{2mm}$	
133	$m\bar{3}m$	$\frac{hhl}{m}$				Пентагон-додэкаэдр	
134	$m\bar{3}$	$\frac{hkk}{1}$		144	23	$\frac{hk0}{1}$	
135	432	$\frac{hkk}{1}$		145	$m\bar{3}$	$\frac{hk0}{m}$	
136	$m\bar{3}m$	$\frac{hkk}{m}$		146	$m\bar{3}$	$\frac{hkl}{1}$	
		Тетрагон-триоктаэдр				Дидодэкаэдр	

несенными на их гранях стрелками приближают идеальную модель кристалла к ее реальному прообразу. С помощью стрелок наглядно отображаются векториальные свойства поверхности кристалла.*

Помимо гранных простых форм в виде 47 выпуклых многогранников различают гранные пучки, представляющие собой грани простых форм, перенесенные в одну точку, что наглядно изображается на стереографической проекции. Число и названия простых гранных пучков отвечают числу и названиям простых гранных форм [58]. Гранные пучки будем в дальнейшем называть по простым формам, которым они соответствуют. Среди пучков удобно выделить два типа. К первому отнесем пучки, плоскости которых содержат переворачивающие операции симметрии (двусторонние плоскости), а ко второму — плоскости односторонние (черно-белые), не содержащие переворачивающих операций симметрии. Такое деление почти аналогично делению простых форм на голоэдрические и гемиэдрические. Число пучков первого типа отвечает числу простых гранных форм в 11 центросимметричных классах: 1) пинакоид, 2) ромбическая призма, 3) ромбическая дипирамида, 4) тетрагональная призма, 5) дитетрагональная призма, 6) тетрагональная дипирамида, 7) дитетрагональная дипирамида, 8) гексагональная призма, 9) дигексагональная призма, 10) гексагональная дипирамида, 11) дигексагональная дипирамида, 12) ромбоэдр, 13) тригональный скаленоэдр, 14) куб, 15) октаэдр, 16) ромбододекаэдр, 17) пентагон-додэкаэдр, 18) тетрагексаэдр, 19) дидодэкаэдр, 20) тригон-триоктаэдр, 21) тетрагон-триоктаэдр и 22) гексоктаэдр. Всего в низшей категории сингоний три пучка первого типа, в средней — десять и в высшей — девять. Из них особо следует выделить три кубических пучка, у которых грани параллельны осям третьего порядка.** Это будут пучки: 23) дидодэкаэдрический, 24) тетрагон-триоктаэдрический {112} и 25) гексоктаэдрический.

Пучков второго типа 25. Среди них также особо следует выделить три пучка кубической сингонии с плоскостями, параллельными осям третьего порядка, отвечающих трем простым формам: пентагон-тритетраэдру, гексатетраэдру и пентагон-триоктаэдру (гемиэдрические пучки, отвечающие голоэдрическому — дидодэкаэдрическому и гексоктаэдрическому). Пучки первого и второго типов в ряде случаев могут быть не различимы. Примером этого могут служить системы плоскостей спайности или скольжения, когда пучок второго типа проявляет себя как пучок первого типа. Число различных по симметрии пучков будет равно 146 (число разновидностей простых форм по Г. Б. Бокию), причем пучкам

* Дальнейшее совершенствование изображения разновидностей форм с помощью стрелок приведено в книге И. И. Шаfranовского [63]. — *Ред.*

** Целесообразность выделения таких пучков вытекает хотя бы из того, что, например, плоская группа симметрии дисконтинуума формы {112} в ряде пространственных групп отлична от плоских групп других плоскостей {hhl}, что показано И. И. Шаfranовским [50].

первого типа могут соответствовать строго определенные пучки второго типа. Приведем номера пучков первого типа и названия отвечающих им пучков второго типа: № 1 — моноэдр, № 2 — диэдр, № 3 — ромбический тетраэдр, ромбическая пирамида, № 4 — нет, № 5 — нет, № 6 — тетрагональная пирамида, тетрагональный тетраэдр, № 7 — дитетрагональная пирамида, тетрагональный скаленоэдр, тетрагональный трапецоэдр, № 8 — тригональная призма, № 9 — дитригональная призма, № 10 — тригональная дипирамида, гексагональная пирамида, № 11 — дитригональная дипирамида, дигексагональная пирамида, гексагональный трапецоэдр, № 12 — тригональная пирамида, № 13 — дитригональная пирамида, тригональный трапецоэдр, № 14 — нет, № 15 — кубический тетраэдр, № 16 — нет, № 17 — нет, № 18 — нет, № 19 — пентагон-тритетраэдр, № 20 — тетрагон-тритетраэдр, № 21 — тригон-тритетраэдр, № 22 — пентагон-триоктаэдр, гексатетраэдр.

Реберные формы

Под простой реберной формой аналогично гранной форме понимают совокупность симметричных ребер (В. И. Михеев и И. И. Шафрановский [28]). Эти авторы делят реберные формы на плоские и трехмерные, которые в свою очередь подразделяются на пучки, рамки и каркасы. Плоских реберных форм, выведенных из 10 плоских односторонних кристаллографических групп, 27. Каркасных реберных форм 303 [58]. Эти числа реберных форм получены без учета симметрии самих ребер. Если учитывать симметрию ребер, то будут выведены реберные разновидности, аналогичные разновидностям гранных простых форм по Г. Б. Бокию. Для кристаллов низшей категории эти разновидности приведены в работе В. И. Михеева и И. И. Шафрановского [28]. Для трехмерных реберных форм, как для пучков, так и для каркасов, эти разновидности полностью не выведены. Их вывод в каждом конкретном случае не представляет большого труда. Каркасы и рамки могут быть разорванными и связанными. Примером разорванных каркасов являются две реберные формы кристаллографического пентагон-додекаэдра: одна имеет ребра, параллельные осям $\langle 100 \rangle$, и представляет собой пересечение $(h0l):(\bar{h}0l)$, а другая — пересечение $(10h):(0hl)$. У первой формы ребра могут иметь симметрию 2 и $2mm$, а у второй симметрия ребер 1. Связанный каркас образуют, например, ребра куба, октаэдра и кубического тетраэдра. Каждая из этих реберных форм имеет число разновидностей, равное числу классов симметрии, в которых эта форма может встречаться. Кстати заметим, что из замкнутых простых форм кристаллов только куб, октаэдр, правильный тетраэдр, а некристаллов — платоновский пентагон-додекаэдр и правильный икосаэдр (классы 532 и 53m) имеют по одной гранной, реберной и вершинной форме. Остальные замкнутые гранные простые формы имеют одну, две или три вершинные формы и две или три реберные формы. Комбинации простых гранных форм могут состоять из одной вершин-

ной и одной реберной форм, как, например, кубооктаэдр с квадратными гранями куба и треугольными гранями октаэдра.

Остановимся на вопросе о выводе реберных форм. Как известно [58], реберные пучки — это совокупности простых реберных форм, перенесенных параллельно самим себе в одну точку, т. е. реберные пучки аналогично гранным представляют собой совокупность симметричных прямых, пересекающихся в одной точке. Вывод реберных пучков осуществляется при помощи стереографических проекций совершенно аналогично выводу гранных простых форм, что послужило основанием считать число реберных пучков равным 47. Пучки ребер (прямых) также следует аналогично гранным пучкам разделить на два типа. Если внутри кристалла имеется фиксированная точка, то оба типа могут быть различимы. Прямая пучка первого типа будет распространяться в противоположных направлениях от фиксированной точки, т. е. будет иметь операции симметрии, совмещающие концы прямой, а прямая пучка второго типа этих операций симметрии не имеет и от фиксированной точки будет проходить только в одном направлении. Число пучков прямых первого типа $22+3$ особых, у которых прямые перпендикулярны к осям третьего порядка в кубической сингонии. Число пучков прямых второго типа $25+3$ особых. Названия реберным пучкам следует давать те же, что и гранным пучкам. Число кристаллографических разновидностей реберных пучков будет также 146.

Вывод каркасных реберных форм по В. И. Михееву, И. И. Шафрановскому и С. Ш. Генделеву [29] осуществлялся на основе гранных простых форм, на плоскости которых наносились прямые линии во всех возможных положениях относительно элементов симметрии граней. Эти линии размножались при помощи операций симметрии того класса, в котором данная форма встречается. Критерии различия простых реберных каркасных форм определены авторами не очень четко, и поэтому выделение некоторых форм как самостоятельных явилось ошибочным. Признак «разорванности» каркасных форм не является еще основанием для их самостоятельного выделения, ибо на комбинациях гранные простые формы почти всегда образуют «разорванные» многогранники, а пространство замыкается другими простыми формами. В. И. Михеевым и И. И. Шафрановским выделены как самостоятельные формы (рис. 4) № 5, 6, 8 и 11; 3 и 4; 12, 13 и 14; 16, 17 и 18. Нетрудно убедиться, что формы № 17 и 18 представляют собой, по сути дела, одну форму, так как при рассмотрении их по направлениям, указанным стрелками, форма № 17 будет выглядеть как форма № 18 и, наоборот, форма № 18 будет формой № 17. Параллельное перемещение ребер этих форм вдоль граней ромбической дипирамиды приведет к форме № 16.

Указанными авторами, как они отмечают, вывод реберных форм проводился на уровне вывода 47 гранных форм. Это значит, что было необходимо установить критерии одинаковости форм, аналогичные критериям, выработанным для гранных форм. Только

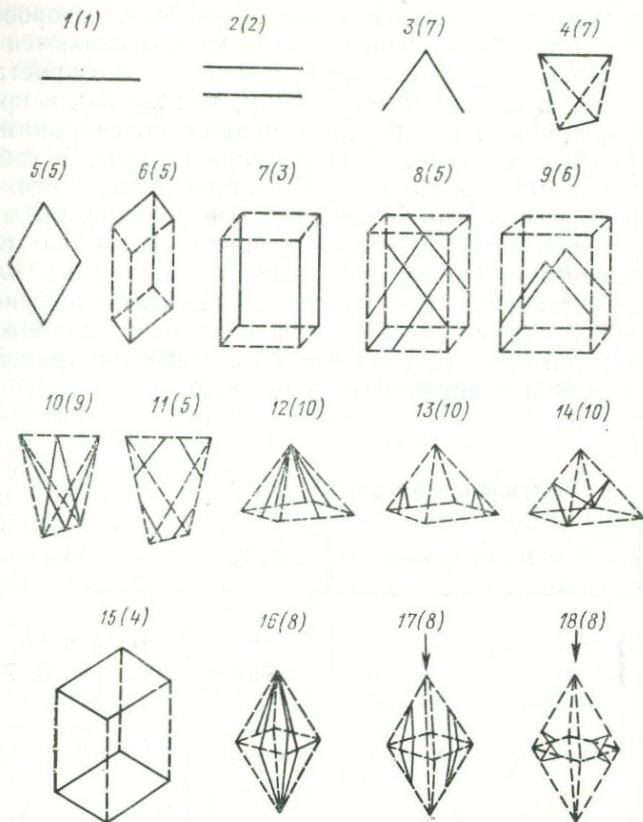


Рис. 4. Реберные формы кристаллов низшей категории (по В. И. Михееву и И. И. Шаfranовскому [28]).

В скобках указаны порядковые номера форм, отвечающие табл. 38 в прил. 1.

в этом случае при выводе можно было бы избежать повторений и пропусков. В основу такого критерия для реберных форм следует положить реберные пучки как первого, так и второго типов. Совершенно очевидно, что критерии одинаковости гранных форм, предложенные А. К. Болдыревым и Г. Б. Бокием (цит. выше), для реберных форм применимы только частично. Поэтому идентифицировать реберные формы на уровне 47 простых гранных форм можно при соблюдении следующих условий: 1) равное число ребер, 2) принадлежность ребер к одному пучку и 3) возможность описания пространственного расположения ребер одной группой симметрии в одинаковой ориентировке относительно прямых пучка. Заметим, что если бы пучки (гранные и реберные) были выведены раньше простых гранных форм, то аналогичные критерии были бы применимы и для вывода 47 форм.

Первое условие в пояснениях не нуждается. Второе условие вытекает из того, что все ребра данной формы являются проявлением на поверхности определенных направлений в кристалле. Поскольку при выводе реберных форм, так же как и при выводе гранных форм, симметрия ребер не принимается во внимание, достаточно учитывать только 22 пучка первого типа. В табл. 3 указано, какие пучки первого типа возможны в различных классах симметрии. Третье условие введено по той причине, что вывод как реберных, так и гранных форм осуществляется на основании классов симметрии. Пространственное расположение плоскостей диэдра без учета симметрии граней может быть описано, например, группой 2, причем ось 2 расположена косо относительно граней. При другой ориентировке оси 2 относительно граней возникнут другие формы — пинакоид или моноэдр.

ТАБЛИЦА 3

Реберные пучки в различных классах симметрии

Класс симметрии	Номера пучков	Класс симметрии	Номера пучков
1	} 1	$\bar{4}$	1, 4, 6
$\bar{1}$		$\bar{4}2m$	1, 4, 5, 6, 7
2	} 1, 2	6	} 1, 8, 10
m		$6/m$	
$2/m$	} 1, 2, 3	$6mm$	} 1, 8, 9, 10, 11
$2mm$		622	
222		$6/mmm$	
mmm	} 1, 8, 12	$\bar{6}$	1, 8, 10
3		$\bar{6}2m$	1, 8, 9, 10, 11
$\bar{3}$	} 1, 8, 9, 10, 12, 13	23	} 14, 15, 16, 17, 19, 20, 21
$3m$		$m\bar{3}$	
32		$\bar{4}3m$	
$\bar{3}m$	} 1, 4, 6	432	} 14, 15, 16, 18, 20, 21, 22
4		$m\bar{3}m$	
$4/m$	} 1, 4, 5, 6, 7		
$4mm$			
422			
$4/mmm$			

Поясним сказанное на примере реберных форм. Форма № 5 (рис. 4) в виде ромба состоит из четырех ребер, принадлежащих к ромбо-призматическому пучку, состоящему из двух пересекаю-

щихся направлений. Максимальная симметрия формы mmm , но взаимное расположение ребер этой формы может быть описано и группами 222 , $2mm$ и $2/m$. Следовательно, все формы, принадлежащие к этому пучку и расположенные в пространстве так, что могут быть описаны одной из этих групп симметрии, являются одной и той же формой. Таким образом, в одну форму (ромб) объединятся и выделенные В. И. Михеевым и И. И. Шафрановским как самостоятельные формы № 6, 8 и 11 (рис. 4). Форма № 9 в этот список не попадает, так как, хотя она и состоит из четырех ребер, принадлежащих к тому же пучку первого типа, но их расположение в пространстве отвечает группе $2mm$ в другой ориентировке (ось 2 расположена не перпендикулярно к ребрам пучка). Смысл указания ориентировки группы симметрии относительно ребер заключается в следующем. При одинаковой ориентировке элементов симметрии группы относительно прямых пучка одна форма (по Михееву В. И., Шафрановскому И. И. [28]) может быть переведена в другую без изменения числа ребер и класса симметрии путем параллельного переноса ребер вдоль граней кристалла. Если же ориентировки групп симметрии различны, то этого сделать нельзя, что можно обнаружить по рисункам указанных авторов (рис. 4), но более ясно будет видно ниже на гномо-стереографической проекции.

Может показаться, что формы № 6 и 11 (рис. 4) следует считать разными, так как первая описывается группой $2/m$, а вторая — группой 222 . Однако поскольку они порознь равны форме № 5, то они равны и между собой. Параллельным переносом ребер вдоль граней, показанных на рис. 4 штриховыми линиями, они сводятся к форме № 5.

Просмотр реберных форм низших сингоний, выведенных В. И. Михеевым и И. И. Шафрановским, показывает, что права на самостоятельность имеют формы № 1—3, 5, 7, 9, 10, 12, 15 и 16, т. е. всего 10 форм из 18. Такое сокращение числа простых реберных форм логично по той причине, что в каждом классе симметрии аналогично гранным формам будет одна общая простая реберная форма. Для класса 1 это будет форма № 1, для класса $\bar{1}$ — № 2, для класса m — № 3, для класса 2 — № 3, для класса $2/m$ — № 5, для класса 222 — № 10, для класса $2mm$ — № 12, а для класса mmm — № 16. Число реберных форм сократится и в средней, и в высшей категориях сингоний.

Вывод реберных форм может быть осуществлен различными способами. Метод, предложенный В. И. Михеевым и И. И. Шафрановским [28], нагляден, но страдает тем недостатком, как было сказано, что он не позволяет достаточно надежно установить идентичность двух или нескольких форм, вид которых как будто различен.

Нам представляется, что наиболее доступным методом, дающим однозначный результат, является такой метод, исходным моментом которого будет реберный пучок (табл. 3). Параллельным переносом ребра данного пучка из точки пересечения в различных

направлениях и дальнейшим размножением их с помощью операций симметрии класса мы получим пространственное расположение ребер — реберную форму. При таком методе сразу ясна принадлежность формы к реберному пучку. Остается установить только число ребер и возможность описания их пространственного расположения другими классами симметрии с учетом ориентировки элементов симметрии класса относительно ребер исходного пучка. Вся задача может быть решена на стереографической проекции (см. ниже), столь привычной для кристаллографов.

Для кристаллов низшей категории пучков первого типа всего три, а каркасов, как было уже сказано, десять. В табл. 38 прил. 1 приведены разновидности каркасов, различающиеся как по симметрии всего каркаса в целом, т. е. по классу симметрии, в котором данная форма может присутствовать, так и по симметрии одного ребра каркаса (отмечено в круглых скобках). Каркасные формы № 1 дают пять разновидностей, № 2 — девять, № 3 — четыре, № 4 — четыре, № 5 — четыре, № 6—10 разновидностей не имеют.

Смысл реберных форм такой же, как и гранных. Все ребра одной формы на данном идеальном кристалле должны обладать одинаковыми физическими и химическими свойствами. Но поскольку ребро появляется на пересечении двух граней, то и свойства его зависят от того, какие грани пересекаются. Например, ребро $(100):(010)$ в кубическом кристалле класса $m\bar{3}m$ будет отличаться по физическим свойствам от ребра $(hk0):(kh0)$, хотя оба ребра дают одну и ту же реберную форму. Общим между этими реберными формами является их принадлежность к одному пучку (кубическому), а различие заключается в том, что набор граней, которые могут притупить ребро $(100):(010)$, отличается от набора граней, притупляющих ребро $(hk0):(kh0)$. Это может сказаться, например, на скоростях растворения граней, на других свойствах.

Обратим внимание на то, что в две одинаковые реберные формы попадут ребра ромбоэдра. Одна форма образует разорванный каркас, а вторая — замкнутый. Это обстоятельство может вызвать сомнение в их идентичности. На самом деле отнесение этих форм к одинаковым имеет тот смысл, что ребра обеих форм параллельны одним и тем же направлениям (пучку), что подчеркивает их общность. Различие же заключается в исключенных этими ребрами гранных формах.

При исследовании роста и растворения кристаллов, механических свойств, например твердости и пластичности, реберные формы могут играть существенную роль в описании результатов процесса. Но простые реберные формы, как следует из вышесказанного, не отражают, какие конкретные грани породили их при пересечении. Этот недостаток реберных форм с физической точки зрения весьма существен. Поэтому кажется полезным отметить элементарный способ определения всех возможных пересечений простых гранных форм для любого класса симметрии. Поскольку число простых гранных форм в каждом классе ограничено, число

возможных пересечений тоже будет ограниченным. Возьмем, к примеру, класс $2mm$, в котором могут быть следующие простые гранные формы: 1) два пинакоида — $\{100\}$ и $\{010\}$, 2) два моноэдра — $\{001\}$ и $\{00\bar{1}\}$, 3) диэдры $\{h0l\}$ и $\{0kl\}$ и 4) ромбические пирамиды $\{hkl\}$. Поскольку в ребре пересекается всегда только две грани, все сочетания этих форм по две определяют все возможные ребра, но не простые реберные формы. Запишем эти сочетания в виде таблички

11	(22)	33	44
12	23	34	
13	24		
14			

в которой цифры 1—4 обозначают порядковые номера простых форм, указанных выше. Сочетание 22 невозможно, так как грани обоих моноэдров в этом классе параллельны.

Очевидно, что когда символ одной из граней, образующей ребро, имеет хотя бы один буквенный индекс, число физически различных ребер равно бесконечности. Если требуется найти все ребра пересечения двух простых гранных форм независимо от того, является ли многогранник выпуклым или имеет входящие углы, отвечает ли он точечному классу симметрии или искажен, то следует пронумеровать точки гномостереографических проекций граней и найти все возможные сочетания по два этих номеров, отбросив те сочетания, которые отвечают параллельности граней.

Решение таких элементарных задач может понадобиться для приготовления затравок определенной ориентировки и формы при специальном, например направленном, выращивании кристаллов или для выращивания кристаллов с заданным распределением дефектов.

Вершинные формы

Простой вершинной формой называют совокупность симметричных вершин. Как уже было показано, расположение вершины в пространстве может быть охарактеризовано минимум тремя символами граней, пересекающихся в одной точке. В этой точке пересекается также минимум три ребра. Для того чтобы в записи отразить не только грани, образующие вершину, но и все ребра, следует записывать на один символ больше, повторяя в конце через двоеточие первый символ. Вершина куба тогда запишется $(100):(010):(001):(100)$ (число двоеточий равно числу ребер, пересекающихся в данной вершине). Число простых вершинных форм (точечников), как известно, равно 47. Плоских простых вершинных форм девять [58]. Число возможных вершинных форм идеального плоскогогранного кристалла ограничено при ограниченном числе гранных форм. На рис. 5 изображено три случая пересечения куба с октаэдром. В первом случае (рис. 5, а) имеется одна вершинная форма из 24 вершин, во втором (рис. 5, б) — тоже одна

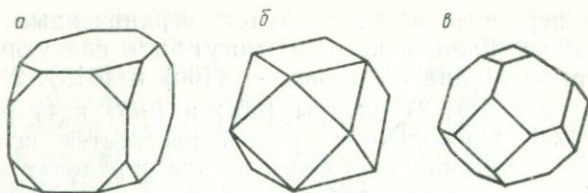


Рис. 5. Три случая пересечения куба с октаэдром.

a — ребра $(100) : (010)$, $(100) : (111)$, вершины $(100) : (010) : (111) : (100)$; *б* — ребра $(100) : (111)$, вершины $(100) : (111) : (001) : (111) : (100)$; *в* — ребра $(111) : (100)$, $(111) : (111)$, вершины $(100) : (111) : (111) : (100)$.

форма, но из 12 вершин, а в третьем (рис. 5, *в*) — новая вершинная форма, опять из 24 вершин. Симметрия этих вершин зависит от класса симметрии кристалла. Ниже будет показано, что и вершинные формы могут быть отображены на гномостереографической проекции. Число простых вершинных форм, различающихся по симметрии самих вершин и их расположению в пространстве, равно 146 (число разновидностей простых гранных форм по Г. Б. Бокию).

Физический смысл вершинных форм аналогичен таковому гранных и реберных форм. Вершины, так же как грани и ребра, вносят свой вклад в образование реального кристалла.

ВНЕШНЯЯ И ВНУТРЕННЯЯ МОРФОЛОГИЯ ПЛОСКОГРАННЫХ КРИСТАЛЛОВ НА СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ

В распространенных гномостереографических проекциях плоскости многогранника изображаются точками, а ребра между ними проектируются обычной стереографической проекцией (также точкой). Вершины многогранников на таких проекциях не находят своего отображения. С помощью предлагаемого здесь способа выпуклый многогранник можно наглядно и достаточно точно показать на гномостереографической и стереографической проекциях, отразив не только его внешнюю морфологию (грани, ребра и вершины), но и внутреннее секториальное строение (пирамиды роста). Кроме того, предложенные проекции пригодны для изображения реальных кристаллов, формы которых искажены. Такие проекции могут заменить подчас трудно выполнимые зарисовки.

Способ практически сводится к задаче разбиения сферы замкнутой сетью дуг больших кругов при заданных точках (узлах) пересечения этих дуг и точечной группе симметрии всего разбиения.* Заданными точками пересечения (узлами) являются гномостереографические проекции граней. Точечная группа симметрии всего разбиения накладывает определенные ограничения на пост-

* Этим предложенный способ разбиения сферы существенно отличается от способа, который применял еще в прошлом веке Грассман и позднее А. М. Гинзбург [11].

роение замкнутой сети дуг. Эти ограничения состоят в том, что дуги больших кругов могут совпадать со стереографической проекцией плоскости симметрии или пересекать ее только под прямым углом, если точка пересечения не является проекцией грани, и не могут проходить через стереографические проекции осей симметрии выше второго порядка, если точки этих проекций не являются также заданными точками пересечения дуг (проекциями граней). При таком разбиении сферы ячейки сети дадут гномостереографические проекции всех телесных углов (вершин) выпуклого многогранника, которые Е. С. Федоров [42] называл гоноэдрами. Дуги между двумя точками проекций граней являются гномостереографическими проекциями ребер. Кроме того, такие проекции показывают еще и следующее. Как известно, плоскогранный кристалл ограничен определенным набором простых гранных, реберных и вершинных форм. Простые гранные формы, которые могут появиться на его поверхности, будут притуплять ребра и вершины. Иначе говоря, возможные гранные формы исключены в его ребрах и вершинах. В ребрах исключены гранные формы, образующие зоны, параллельные ребрам. Остальные гранные формы исключены в вершинах кристалла. Все это находит свое отражение на такой гномостереографической проекции.*

На рис. 6, а изображена гномостереографическая проекция прямоугольного параллелепипеда, например куба. Линиями (зонами) обозначены гномостереографические проекции ребер этого параллелепипеда, в которых исключены грани серии $\{hk0\}$. Каждому ребру отвечает только часть зоны, заключенная между двумя точками (проекциями граней). Сферические прямоугольные треугольники (октанты) соответствуют вершинам куба, где исключены грани, ни один из индексов которых не равен нулю. Таким образом, данная проекция полностью характеризует выпуклый многогранник с его вершинами, ребрами и гранями.** На рис. 6, б, в даны проекции октаэдра и тетраэдра, отвечающие симметрии $\bar{3}m$ и $\bar{4}3m$. Такой способ проектирования представляет еще и то удобство, что им можно показать отклонение формы реального кристалла от идеальной. На рис. 6, г—з приведены проекции реального октаэдра с видимой симметрией $\bar{4}3m$, состоящего из двух ложных тетраэдров, формы октаэдров с видимой симметрией $\bar{3}m$, $3m$, mmm и $2mm$. Поскольку на таких проекциях изображены ребра кристаллов, можно, используя стрелки, отображающие симметрию ребер, показать все разновидности простых гранных, реберных и вершинных форм. На рис. 6, и—л показаны три разновидности октаэдрических граней, вершин и ребер. Наконец,

* Аналогичным способом Г. А. Волф и Д. Г. Гуалтиери [100] изображали грани и ребра идеальных равновесных форм кристаллов.

** В работе А. М. Гинзбурга [11] подобные рисунки не являются гномостереографическими и стереографическими проекциями многогранников. Приведенное нами на рис. 6, а изображение по А. М. Гинзбургу является не кубом, а октаэдром.

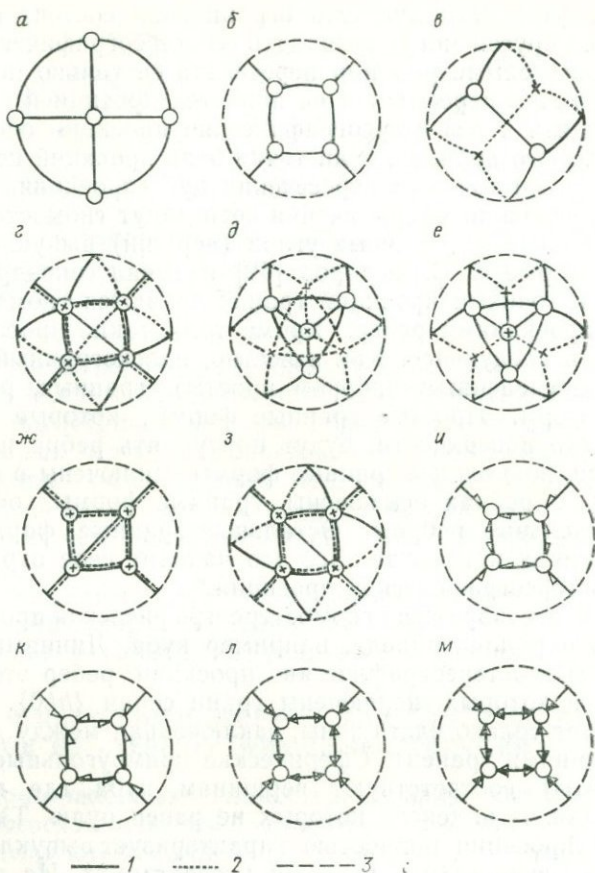


Рис. 6. Гномостереографические проекции граней, ребер и вершин многогранников.

1 — проекции ребер; 2 — проекции ребер в нижней полусфере; 3 — окружности проекций.

раскрашивая или нумеруя точки проекции, проекции ребер, сферические многоугольники или стрелки, можно показать цветовую симметрию многогранника (рис. 6, м). Размеры реальных граней можно отражать кружками разных радиусов. При этом будут показаны и размеры реальных ребер. Чем меньше часть дуги гномостереографической проекции ребра, заключенная между краями двух кружков, тем больше это ребро на кристалле. Исключенные формы данного ребра, разумеется, остаются теми же самыми, что и в идеальном случае.

Внутренняя морфология плоскогранных кристаллов, как известно, складывается из пирамид и зон роста. Зоны роста параллельны граням и могут быть изображены так же, как и выпуклые многогранники. Основанием пирамиды роста является расту-

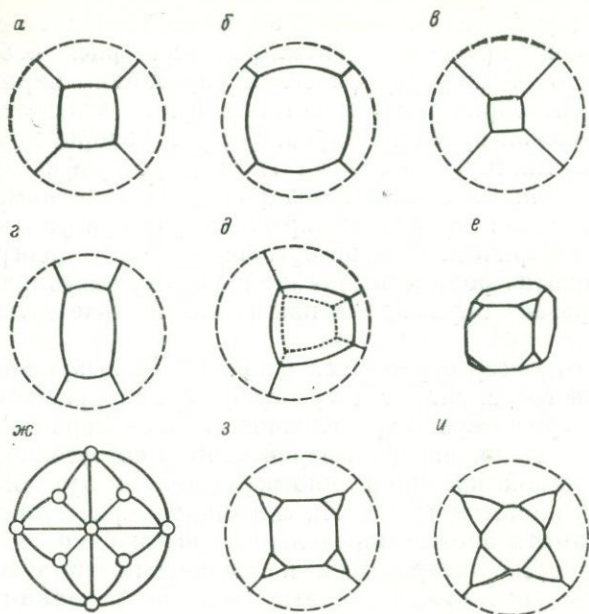


Рис. 7. Стереографические проекции пирамид роста.
Пояснения в тексте. Штриховые линии — окружности проекций.

щая грань, вершина ее помещается в центре кристалла (в точке зарождения). Боковые поверхности пирамид роста образованы перемещающимся параллельно самому себе ребром кристалла и в реальных условиях не являются плоскими. Ребра пирамид роста представляют собой след перемещающейся при росте вершины кристалла. На эти простые особенности внутренней морфологии обращали внимание Г. Г. Леммлейн [24] и И. Т. Бакуменко [5], а позднее Д. П. Григорьев (см. в [14]).

При помощи стереографической проекции может быть показана внутренняя морфология не только в статике, но и в динамике. Начнем с простого случая — роста кристалла какого-либо вещества в идеальных условиях, когда все грани куба в каждый момент роста равны между собой и перемещаются с равной скоростью. В таких условиях граничная поверхность между пирамидами роста будет плоской и должна отвечать пучку $\{110\}$, а ребра пирамид будут направлениями $[111]$. Изобразим это в стереографической проекции (рис. 7, а)*. Здесь, так же как и при проектировании многогранника, дуги, отвечающие проекциям граничных плоскостей, следует проводить только от одной точки проекции ребра до другой. Обратим внимание на то, что стереографическая проек-

* По А. М. Гинзбургу [11] такой рисунок изображает куб, а точнее, стереографическую проекцию пирамид роста куба.

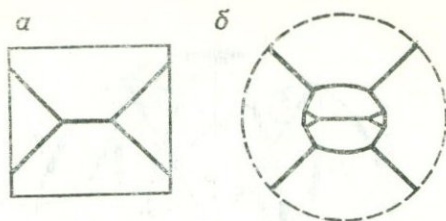
ция пирамид роста идеального куба точно совпадает с гномостереографической проекцией октаэдра (ср. рис. 6, б и 7, а). Очевидно, что и стереографическая проекция пирамид роста идеального октаэдрического кристалла будет совпадать с гномостереографической проекцией куба. Мы уже говорили, что область сферического многоугольника на гномостереографической проекции многогранника является гоноэдром, областью гномостереографических проекций граней, которые могут пригугить вершину. Область же сферического многоугольника на стереографической проекции пирамид роста показывает только ту часть пространства, которую вырезает пирамида в кристалле, и тоже является гоноэдром.

Между гномостереографической проекцией выпуклого кристаллического многогранника и стереографической проекцией его пирамид роста существует определенная связь, которая заключается в следующем. Точки внутри сферического многоугольника гномостереографической проекции многогранника могут быть проекциями ребер пирамид роста. На идеальном кристалле эти точки должны занимать вполне определенные положения (иметь постоянные сферические координаты и симметрию) в течение всего роста. У реального кристалла эти точки могут занимать любое положение как внутри сферического многоугольника, так и за его пределами. При этом должны быть соблюдены два условия: 1) проекции граней пирамид роста обязательно являются дугами больших кругов, нормальных к гномостереографическим проекциям ребер многогранника, и 2) на проекции дуги больших кругов, обозначающие стереографические проекции плоскостей пирамид роста, должны образовывать замкнутую сеть с точечной группой симметрии реального кристалла.

При построении такой сети полезно помнить, что дуги, являющиеся возможными проекциями плоскостей, образованных движением одного ребра, должны иметь одну точку пересечения, представляющую собой стереографическую проекцию этого ребра, т. е. образуют зону, осью которой является данное ребро. Веер проекций этих плоскостей будет органичен стереографическими проекциями граней, пересекающихся по данному ребру, т. е. максимальный угол веера будет равен внутреннему двугранному углу. Очевидно, что стереографические проекции ребер пирамид роста могут располагаться только в пределах стереографической проекции телесного угла (вершины), которые, разумеется, в общем случае не совпадают полностью с их гномостереографическими проекциями. Только для прямоугольного параллелепипеда такие проекции совпадают.

На рис. 7, б—д показаны стереографические проекции пирамид роста кубов с ложной симметрией $4/m\bar{3}m$ (сплющенного и вытянутого вдоль 4), $m\bar{3}m$ и m . В качестве более сложного примера рассмотрим комбинацию куба и октаэдра, изображенную на рис. 7, е, ж. Вершины этой комбинации имеют симметрию m . Поэтому ребра пирамид роста в идеальном случае тоже должны

Рис. 8. *a* — зарисовка свилеподобных дефектов в кристалле KDP (вид вдоль 4); *б* — стереографическая проекция пирамид роста кристалла.



иметь симметрию m и их стереографические проекции должны располагаться на плоскости симметрии внутри треугольника, обозначающего вершину на гномостереографической проекции этой комбинации (рис. 7, з). Соединяя эти точки дугами больших кругов, получим восьмигранные пирамиды роста куба и трехгранные пирамиды роста октаэдра. Если скорости роста граней октаэдра замедлятся, то пирамида роста их расширится, что также может быть отражено на проекции (рис. 7, и). Изменение наклона граней пирамид может быть найдено по сетке Вульфа.

Исследование внутренней морфологии кристаллов с помощью стереографических проекций дает возможность более строго, не только качественно, но и количественно, подходить к изучению роста и растворения кристаллов и к образованию дефектов, возникающих на границах пирамид роста. На рис. 8 в качестве примера такого типа несовершенств показаны свилеподобные дефекты, возникающие в кристаллах KDP по границам пирамид роста граней тетрагональной дипирамиды $\{101\}$.

При помощи описанного способа проектирования выпуклых многогранников можно выводить простые реберные формы, причем вывод осуществляется приемами, аналогичными выводу граничных форм с помощью гномостереографической проекции.* Одним из наиболее простых и удобных является следующий прием. На стереографическую проекцию элементов симметрии класса тонкой или штриховой линией наносится гномостереографическая проекция возможного реберного пучка. Затем на дугах этих проекций жирными отрезками отмечаются симметричные положения ребер простой каркасной формы. На рис. 9 приведен пример вывода всех каркасных реберных форм для класса $2mm$. Нумерация форм соответствует рис. 4. Результат параллельного переноса ребер данной формы можно получить здесь же путем перемещения жирного участка вдоль всей дуги гномостереографической проекции направления пучка. Этим приемом находится переход одной формы в другую. Как видно из рис. 9, форма № 9 не может быть путем параллельного переноса ребер переведена в форму № 5, но она переходит в форму № 3 с потерей половины ребер. Сопровождая жирный участок дуги стрелкой, можно показать симметрию ребер

* Результаты вывода простых реберных форм описаны в прил. 1, где приводится таблица с перечнем всех форм для кристаллографических классов симметрии.

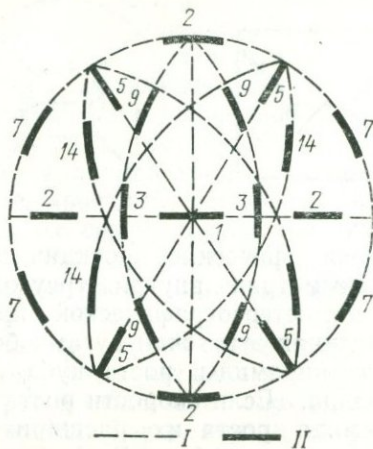


Рис. 9. Пример вывода реберных форм на гномостереографической проекции для класса $2m\bar{1}$.

I — гномостереографические проекции лучков; *II* — гномостереографические проекции ребер. Нумерация форм по В. И. Михееву и И. И. Шафрановскому [28] (рис. 4).

данной формы. Демонстрация реберных форм на гномостереографической проекции удобна по той причине, что сразу легко увидеть, какие грани при пересечении могут образовать данную форму.

Как уже отмечалось, при наличии ограниченного числа простых гранных форм число вершинных и реберных форм тоже ограничено. Это можно доказать с помощью гномостереографической проекции. Разберем для примера рассмотренный выше случай комбинации куба и октаэдра. При наложении проекций куба и октаэдра (рис. 6, *a*, *b*) друг на друга с соблюдением одной ориентировки элементов симметрии видно, что проекции ребер — дуги больших кругов пересекаются. Пересечений же самих ребер не должно быть, так как результатом этого явилось бы появление новых граней. Следовательно, у комбинации граней куба и октаэдра могут быть только три случая их пересечения в ребрах, а именно: 1) присутствуют ребра куба, но отсутствуют ребра октаэдра, 2) присутствуют ребра октаэдра, но отсутствуют ребра куба и 3) отсутствуют ребра и куба, и октаэдра. Рисунки этих случаев уже приведены выше (рис. 5), гномостереографические проекции случаев 2 и 3 показаны на рис. 10, а случая 1 — на рис. 7. Если в комбинации участвует хотя бы одна простая гранная форма, у которой сферические координаты могут быть непостоянными, то число случаев пересечения может зависеть от этих

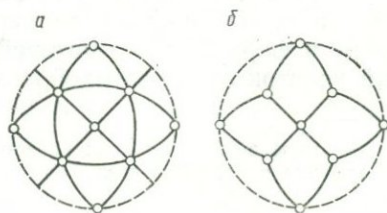


Рис. 10. Гномостереографические проекции комбинаций куба и октаэдра.

a — случай 2 (рис. 5, *a*);
b — случай 3 (рис. 5, *b*).
 Штрихами показаны окружности проекций.

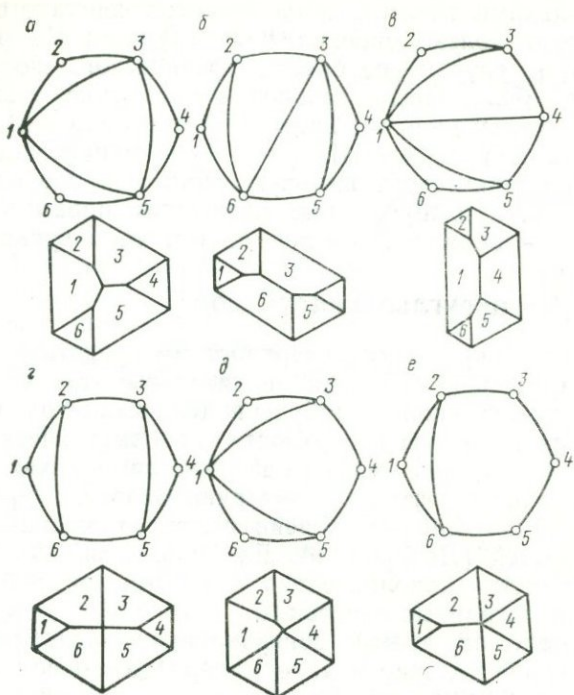


Рис. 11. Примеры разбиения сферического шестиугольника и изображения соответствующих вершин в плане.

координат, но также будет конечным. Нахождение всех возможных пересечений ограниченного числа простых форм (см. прил. 2) может оказаться необходимым при анализе внутренней морфологии реального кристалла и его дефектов. Весьма полезно параллельно с этим строить проекции пирамид роста.

Если вершина идеального кристалла образована из n граней, то нетрудно найти, на сколько вершин она может разложиться у реального кристалла и какая при этом сохранится симметрия. Пусть на проекции задана вершина из шести граней (гексагональной пирамиды или дипирамиды). Поскольку число граней более трех, то возможны случаи пересечения граней в дополнительных ребрах, которые могут быть найдены путем соединения зонами проекций граней. Эти зоны могут пересекаться только в точках проекций граней, так как в противном случае помимо заданных шести граней должны появиться дополнительные плоскости. На основании элементарной геометрии легко показать, что максимальное число ребер, замещающих данную вершину, будет равно числу граней n минус три ($n-3$), а число вершин будет на единицу больше ($n-2$). Разбиение данного сферического n -угольника на $n-2$ неперекрывающихся треугольников может быть осуществ-

влено несколькими путями, причем симметрия такого разбиения может отвечать только определенным группам. На рис. 11, *a—в* показано три случая разбиения сферического шестиугольника с симметрией $6mm$. После разбиения симметрия становится $3m$, 2 и m . Соответствующие вершины в плане приведены под стереографическими проекциями. На рис. 11, *г—е* показано разбиение правильного сферического шестиугольника на треугольники, четырехугольники и пятиугольник. Симметрия пирамид становится $2mm$ и m , что изображено в плане на том же рисунке.

К МОРФОЛОГИИ ОКРУГЛЫХ КРИСТАЛЛОВ

Кристаллы с округлыми поверхностями представляют как при изучении, так и при описании значительные трудности, связанные с тем, что нет сколько-нибудь надежных методов исследования характера кривизны поверхности. Гониометрическим методом в большинстве случаев нельзя различить выпуклую и вогнутую поверхности и определить их геометрию. Вероятно, предложенный недавно метод изучения дисторсии сеток, отраженных от округлых поверхностей [Любалин М. Д., Мокриевский В. А., 1968 г.], даст возможность (дополнительно к гониометрии) более строго описывать кривогранные кристаллы.

Кристаллы с округлыми поверхностями представляют собой распространенное явление в мире минералов и искусственных соединений. Такие кристаллические тела могут возникать как при росте, так и при растворении. «Следует быть осторожным при отнесении округлых кристаллов к продуктам частичного растворения или роста» [4]. При выращивании кристаллов аммонийдигидрофосфата (ADP) и калийдигидрофосфата (KDP), германия и кремния, корунда и шпинелей одновременно образуются кривогранные и плоскогранные поверхности. Аналогичное явление имеет место и при растворении кристаллов. Наличие на кристаллах округлых поверхностей часто «неправильной» формы не может служить основанием для отнесения их к ксеноморфным образованиям. Гониометристам известно, хотя об этом обычно умалчивается, что даже визуально плоскогранные кристаллы, например спайные выколки, в большинстве случаев не дают четких точечных сигналов. Кажущиеся плоскими грани роста кристаллов минералов почти всегда усложнены разнообразной скульптурой, дающей нередко эффектные световые картины в гониометре. Многие авторы [45, 46, 49] пытались связать световые картины с формой поверхности и создать классификацию аксессуарий роста кристаллов [64, 95]. Однако все эти работы базировались только на экспериментальном материале и были лишены обобщений.

Здесь делается попытка создать строгую базу для описания кристаллов с округлыми поверхностями. Будем рассматривать поверхности округлых кристаллических тел как огибающие ступенчатых поверхностей, сложенных мельчайшими гранками. Эти огибающие столь же закономерны, как и плоские поверхности.

Так, например, при регенерации полированных монокристаллических шариков грани появляются только в тех местах, где их поверхность пересекает нормаль к данной грани.

Форму кристалла можно отобразить различными способами. Плоскогранный кристалл легко вычерчивается в аксонометрической проекции. Для изображения кристаллов с округлыми гранями и усложненными различного рода скульптурными образованиями подчас требуется художественное мастерство. Гониометрические и фотогониометрические данные таких кристаллов трудно читаемы без сопровождающих рисунков. Неполное, но достаточно четкое представление о форме кристалла можно получить из формы плоского сечения, к которому прибегают в ряде случаев многие авторы. Такое представление формы кажется удобным по той причине, что всю картину можно воссоздать путем одного или нескольких сечений, размноженных операциями симметрии.

Любое сечение кристалла (или вообще физического тела) представляет собой замкнутый контур, который может состоять из следующих элементов: 1) линий нулевой кривизны (прямых), положительной кривизны (выпуклых кривых) и отрицательной кривизны (вогнутых кривых), 2) точек сопряжения и перегиба (точек изменения знака кривизны) и 3) изломов положительных (выходящие углы) и отрицательных (входящие углы). Кривые линии могут иметь разнообразную геометрическую форму: окружность или часть ее дуги, эллипс или его часть, гипербола, парабола и др. Изломы и точки сопряжения также могут быть различными. Если не вводить характеристик кривых в классификацию изломов, то последние следует разделить (помимо положительных и отрицательных) на симметричные и асимметричные (рис. 12). Точки сопряжения всегда (с позиции классической симметрии) асимметричны. Они также могут быть положительными и отрицательными (кроме перегиба). Симметрия точки перегиба может быть 2¹ (двухцветной).

Односторонняя кристаллографическая симметрия сечений должна отвечать 10 плоским односторонним группам. У реальных кристаллов симметрия сечений может быть понижена или повышена (с. 16). Аксиальные группы односторонней симметрии, как известно, заканчиваются группой ∞ , а планальные — группой ∞m . Обе отвечают круговому сечению, которое показывает отсут-

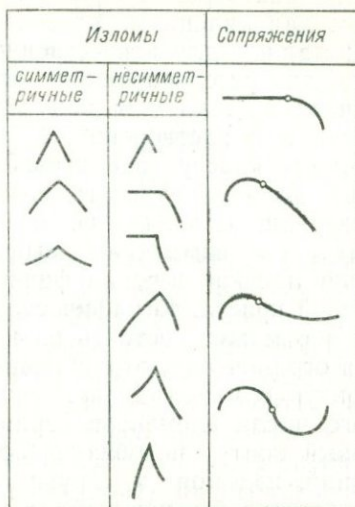


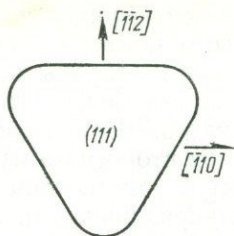
Рис. 12. Изломы и сопряжения прямых и кривых линий.

ствие анизотропии скоростей роста или растворения по радиальным направлениям. Круговые сечения характерны для натечных кристаллов, для искусственно вытягиваемых из расплава кристаллических тел, для конусовидных образований на поверхностях роста или растворения. Если форма кристалла отвечает его точечному классу (идеальный кристалл), то некоторые сечения (не все) должны отвечать симметрии его односторонних точечных подгрупп. Сечения, не отвечающие этим подгруппам, должны быть по симметрии выше этих подгрупп (их надгруппами). Если плоское сечение физического тела отвечает какой-либо точечной кристаллографической или некристаллографической группе, то оно может состоять из какого-то минимального числа элементов ограничения, отражающих в совокупности симметрию сечения. Контур с максимальной симметрией G , состоящий из минимального числа элементов ограничения, назовем образцовым. Образцовый контур не обязан состоять только из симметрично равных линий, изломов и других элементов ограничения. Необходимо только, чтобы каждый элемент контура присутствовал в минимальном числе. Контур в виде неправильного треугольника состоит из трех неэквивалентных друг другу линий и трех несимметричных положительных изломов, а контур в виде дитригона — из шести прямых линий, шести положительных симметричных изломов, равных через один. Симметрия контура $3m$.

Можно сформулировать следующую задачу: построить образцовый контур с симметрией $3m$, имеющий прямые линии, точки положительного несимметричного и отрицательного симметричного изломов. Построение такого контура осуществляется просто. Фигура с симметрией $3m$ и минимальным числом прямых линий — правильный треугольник. Точки отрицательного симметричного излома должны лежать на плоскостях симметрии внутри треугольника, а точки положительного излома нужно расставить в общем положении (не на плоскостях симметрии), например на сторонах треугольника. Затем соединяем последовательно точки положительного и отрицательного изломов прямыми. Такой контур имеет девять прямых и девять изломов. Для построения любого образцового контура удобно исходить из такого образцового прямолинейного контура, который содержит минимум положительных изломов. Кристаллография образцовых прямолинейных контуров описывается с помощью плоских реберных форм [58].

Перейдем к криволинейным контурам. Построим два образцовых криволинейных контура с симметрией $3m$, состоящие из линий положительной кривизны, которые представляют собой части окружности, и пусть один контур имеет положительные симметричные точки излома, а другой — отрицательные. Опять исходим из правильного треугольника, любые две вершины которого будут двумя точками окружности. Третья точка должна лежать вне треугольника на плоскости симметрии. Если центр окружности будет помещен на линии, проходящей от центра треугольника к его

Рис. 13. Форма поперечного сечения кристалла германия, вытянутого из расплава вдоль оси третьего порядка.



вершине, то изломы будут положительными, а если центр окружности будет расположен на линии, идущей от центра треугольника в противоположную сторону, то изломы будут отрицательными. В этом случае отрицательные изломы сохранятся в вершинах треугольника только тогда, когда радиус окружности будет не больше стороны треугольника. Если криволинейный контур из линий положительной кривизны не содержит ось симметрии ∞ и не имеет изломов, то у него обязательно будут точки сопряжения. При заданных условиях число образцовых контуров ограничено. Оно может быть равно единице, двум и более. В ряде случаев вывод образцовых контуров представляет собой трудоемкую задачу.

Все контуры удобно по характеру линий разбить на три категории: 1) прямолинейные, 2) криволинейные и 3) смешанные. Примером последнего контура может служить форма сечения кристалла германия, вытянутого из расплава вдоль $[111]$ (рис. 13). Для того чтобы свести число контуров к минимуму, удобному для описания сечения любой фигуры, введем понятие примитивного (простого) контура, под которым будем разуметь образцовый контур, состоящий из минимального числа линий одного знака кривизны (без точек перегиба) и имеющий минимальное число точек излома одного знака, минимальное число радиусов кривизны и точек сопряжения. Классам ∞ и ∞m отвечает один контур — окружность. Каждому из остальных классов кристаллографической и некристаллографической симметрии будут отвечать пять контуров — четыре с точками излома и один без изломов (рис. 14). Первый прямолинейный контур в пояснениях не нуждается. Он является исходным при выводе криволинейных контуров. Три криволинейных контура с точками излома получаются из прямолинейного путем деформации (изгибания) его сторон при условии

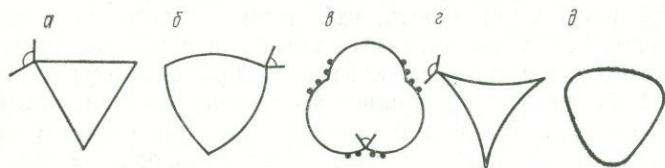


Рис. 14. Примитивные контуры класса $3m$.

Показаны всеы исключенных в изломах ориентаций. У третьего контура (в) отмечено 12 эквивалентных точек.

сохранения симметрии и точек излома или путем замены прямых линий первого контура частями окружности. Очевидно, что если при деформации стороны все время остаются дугами окружности, то в промежутке между вторым и третьим контурами будет полная окружность. Последний, пятый, контур получается путем замены изломов второго контура сопрягающимися дугами.

Все контуры, показанные на рис. 14, топологически неразличимы (как неразличимы пентагон-додекаэдр и пентагон-трететраэдр). Они равны и по симметрии (в отличие от упомянутых додекаэдров), но различаются по числу кристаллографически эквивалентных точек на сторонах контура и изломами. У первого контура все точки на сторонах кристаллографически эквивалентны, т. е. нормали, проведенные в плоскости контура ко всем точкам его стороны, имеют одну и ту же кристаллографическую ориентацию. Такие точки поверхности кристалла будем в дальнейшем называть точками одной ориентации. В вершине этого контура нормали точек исключенных ориентаций образуют веер с углом $360^\circ/n$, где $n (>2)$ — порядок оси симметрии контура. На сторонах криволинейных контуров не все точки кристаллографически эквивалентны. Исключенные ориентации в изломах у второго контура составляют веер с углом меньшим, чем $360^\circ/n$, у третьего контура этот веер может образовать углы в пределах от 0 до 180° , а у четвертого — от $360^\circ/n$ до 180° . Третий контур отличается от второго и четвертого еще и тем, что число некоторых эквивалентных точек на его сторонах должно быть в два или в три раза больше, чем число соответствующих точек на сторонах других криволинейных контуров. Пятый контур отличается от всех остальных тем, что его линия ограничения содержит точки всех ориентаций (исключенных нет).

Криволинейные контуры с изломами могут быть без точек сопряжения (дуги окружности) и с точками сопряжения. Прimitивный контур из линий отрицательной кривизны может иметь только положительные изломы. Контур без изломов представляет собой линию минимум двух радиусов кривизны с точками сопряжения, расположенными в общем положении относительно элементов симметрии, так как точка сопряжения всегда асимметрична. Следует отметить, что примитивные контуры с симметрией 2 и $2m$ из прямых и линий отрицательной кривизны должны иметь минимум четыре такие линии и четыре излома. Формы примитивных контуров осевых классов симметрии с прямыми линиями имеют ту особенность, что линий и изломов у них в два раза больше, чем у аналогичных контуров с плоскостями симметрии. Это относится ко всем контурам, кроме контуров с симметрией 2 и 1. В табл. 4 и 5 приведены характеристики примитивных контуров аксиальных и планальных классов симметрии. Число примитивных контуров для всех кристаллографических классов симметрии равно 50 (5×10). Все остальные контуры, как образцовые, так и более сложные, представляют собой комбинации примитивных контуров или их отдельных элементов.

ТАБЛИЦА 4

Характеристика примитивных контуров осевых классов симметрии

Контур	Минимальное число линий одного радиуса	Минимальное число радиусов кривизны	Число изломов	Минимальное число точек сопряжения
Прямолинейные	Удвоенный порядок оси симметрии (кроме контура с симметрией 1, где три линии)	1	Удвоенный порядок оси (кроме контура с симметрией 1, где три излома)	0
Криволинейные:				
1) кривизна + изломы +	Порядок оси симметрии	Три для контура с симметрией 1 и два для остальных	Порядок оси симметрии	Две для контуров с симметрией 1 и 2 и порядок оси симметрии для остальных
2) кривизна + изломы —	То же	То же	То же	То же
3) кривизна —	Удвоенный порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией 1, где три линии	1	Удвоенный порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией 1, где три излома	Ни одной или порядок оси симметрии (в этом случае точка сопряжения является точкой излома)
4) без изломов	Порядок оси симметрии	Четыре для контура с симметрией 1, для остальных три	0	Удвоенный порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией 1, где четыре точки

Характеристика примитивных контуров планальных классов симметрии

Контур	Минимальное число линий одного радиуса	Минимальное число радиусов кривизны	Число изломов	Минимальное число точек сопряжения
Прямолинейные	Порядок оси симметрии, кроме контуров с симметрией m и $2mt$, где три и четыре линии	1	Порядок оси симметрии, кроме контуров с симметрией m и $2mt$, где три и четыре излома	0
Криволинейные:				
1) кривизна + изломы +	Порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией m , где для одного радиуса кривизны две линии, а для другого — одна	1, кроме контура с симметрией m , где два радиуса кривизны	Порядок оси симметрии	0, кроме контура с симметрией m , где две точки сопряжения
2) кривизна + изломы —	Порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией m , где для одного радиуса кривизны две линии, а для другого — одна	То же	То же	То же
3) кривизна —	Порядок оси симметрии, кроме контуров с симметрией m и $2mt$, где три и четыре линии	1	Порядок оси симметрии, кроме контуров с симметрией m и $2mt$, где три и четыре линии	0
4) без изломов	Порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией m , где три радиуса кривизны (для одного — две линии, а для другого — по одной)	2, кроме контура с симметрией m , где три радиуса кривизны	0	Удвоенный порядок оси симметрии, кроме контура с симметрией m , где четыре точки

Криволинейные контуры 2 и 5 можно нередко встретить у кристаллов германия и кремния, выращиваемых по Чохральскому. Тип третьего контура, но с симметрией m , был встречен нами на кристалле искусственного рубина, выращенного методом Вернейля. Четвертый контур обычно наблюдается в комбинации с другими контурами и был обнаружен на многих кристаллах: на алюмокалиевых квасцах (при растворении), на германии и кремнии (при вытягивании из расплава) и многих других. Прimitивными контурами и их комбинациями могут быть описаны, кроме того, формы ямок травления, фигуры уколов индентором при изучении твердости и т. д. Геометрический и кристаллографический анализ контуров реальных кристаллов может быть полезен при изучении кинетики роста и растворения, при исследовании распределения примесей в кристалле, упругой и пластической деформации и других явлений.

Контур, как было сказано, представляет собой форму сечения, например перпендикулярного к главной оси кристалла средней категории (форму зоны). Формы, которые показаны сечениями, могут быть открытыми. Поэтому следует рассмотреть случаи построения поверхностей, замыкающих пространство, одним из сечений которого является образцовый контур. Эти поверхности назовем надстройкой контура (крышей). Поверхность надстройки либо параллельна (плоскость), либо наклонена к плоскости контура. Но прежде чем перейти к рассмотрению поверхностей надстройки, перечислим элементы поверхностей вообще. Здесь мы воспользуемся сведениями о поверхностях из геометрии и постараемся отметить те их особенности, которые важны в первую очередь для кристаллографии.

Для характеристики округлых поверхностей понятия о граничных, реберных и вершинных формах плоскогранного кристалла неприемлемы. Нам представляется удобным в таких случаях заменить понятие простой формы понятием ориентации поверхности, под которым имеется в виду участок поверхности кристалла, перпендикулярный к данному направлению [Войцеховский В. Н., Доливо-Добровольская Г. И., Мокневский В. А., 1966 г.]. Ориентации поверхностей кристалла будем обозначать символами плоскостей, нормальных к соответствующим направлениям. Эти ориентации могут быть представлены точкой (точечная ориентация, например $\cdot 100 \cdot$, а все семейство симметричных $:100:$), линией (линейная ориентация, например $-100-$, а все семейство симметричных $=100=$) и плоскостью (грань кристалла, обозначаемая обычным способом). Исключение тех или иных ориентаций с поверхности кристалла, как было уже сказано, происходит путем образования точек и линий излома. Вершина и ребро плоскогранного кристалла представляют собой частные случаи изломов. Шар, например, и эллипсоид, вырезанные из кристалла, содержат все ориентации поверхности, представленные точками. Округлые поверхности можно условно разделить на две категории, полезные при изучении их кристаллографии: 1) поверхности, состоя-

щие из прямых и кривых линий (конус, цилиндр, поверхность закрученной ленты, однополостного гиперболоида, гиперболического параболоида и др.), и 2) поверхности, не содержащие прямых (шар, эллипсоид и другие поверхности, любая произвольная выбранная линия на которых не является прямой). Все округлые поверхности, так же как и кривые линии контура, могут быть положительными и отрицательными. Кроме того, следует выделить категорию поверхностей смешанного знака кривизны. Это будут такие поверхности, которые содержат линии положительной и отрицательной кривизны (\pm), положительной и нулевой ($\overset{+}{0}$) и отрицательной и нулевой кривизны ($\overset{-}{0}$) — поверхности конусов.

Переход от поверхности одного знака к поверхности другого знака совершается через линии перегиба (прямые и кривые). Прямые и кривые линии на округлой поверхности кристалла могут состоять из точек одной ориентации, если данная линия является линией касания плоскости к округлой поверхности, как, например, образующие конуса и цилиндра, кривые линии на поверхности тора и др. Линии (прямые и кривые) могут состоять из точек разной ориентации с периодом повторяемости ориентаций и без этого периода. Примером прямой, состоящей из точек разной ориентации, может служить ось закрученной ленты.

Максимальная симметрия прямых и кривых линий на поверхности кристалла — $2mm$. Причем для прямой линии из точек одной ориентации каждая точка может обладать симметрией $2mm$ или симметрией ее подгрупп. Все точки кривой могут иметь симметрию только m и 1 , причем симметрия m может быть только в том случае, если кривая лежит в плоскости симметрии. Группы симметрии $2mm$ и 2 могут быть только у отдельных точек кривой линии. Точки линии сопряжения в отличие от точек сопряжения контура могут иметь максимальную симметрию m (если нормально к линии сопряжения проходит плоскость симметрии кристалла). Максимальная симметрия линии перегиба отвечает группе $2/m$ (если она прямая, причем 2 проходит вдоль линии перегиба).

Линии изломов (пересечение поверхностей) могут быть охарактеризованы исключенными с поверхности кристалла ориентациями. Ребро между плоскими гранями кристалла на всем своем протяжении обладает постоянным веером исключенных плоскостных ориентаций. Кривые линии изломов и некоторые прямые (пересечение плоскости с закрученной лентой вдоль оси закручивания) имеют непостоянный веер исключенных ориентаций. Непостоянными могут быть углы веера и наборы исключенных ориентаций, причем часть ориентаций может быть исключена постоянно на всем протяжении линии излома. Кривые линии изломов могут быть положительной и отрицательной кривизны. Симметрия кривой линии излома на всем ее протяжении не может быть выше m . В отдельных точках ее симметрия может быть $2mm$ и 2 .

Примитивной надстройкой («крышей») контура назовем надстройку, состоящую из поверхностей одного знака кривизны,

все плоские сечения которой проведены параллельно контуру и по мере удаления от него убывают по размеру, оставаясь подобными друг другу. Такое определение приводит к ограниченному числу надстроек для каждого образцового контура. Рассмотрим возможные надстройки для изображенных на рис. 14 образцовых контуров с симметрией 3т. Общей для всех контуров будет крыша в виде плоскости, параллельной плоскости контура. Остальные крыши будут различными. Прямолинейному контуру обязательно должна отвечать такая надстройка, поверхность которой содержит прямые линии, параллельные сторонам контура. Возможны три случая таких поверхностей: 1) плоские, образуют пирамиду, 2) выпуклые (положительной кривизны, например цилиндрические) и 3) отрицательной кривизны (например, также цилиндрические, напоминающие крыши китайских зданий). В первом случае каждая грань пирамиды отвечает одной ориентации и на гониометре вся надстройка даст три точечных сигнала. Во втором и третьем случаях поверхность скатов надстроек будет состоять из определенного набора ориентаций и в зрительной трубе гониометра появятся три сигнала в виде прямых линий определенной протяженности. По гониометрическим сигналам выпуклая и вогнутая поверхности неразличимы. Надстройка второго контура (рис. 14, б) должна состоять из поверхностей положительной кривизны, которые могут быть линейчатыми (поверхности цилиндра или конуса) и нелинейчатыми (части сферы). Гониометрические сигналы будут соответственно двух типов: три кривые линии, обращенные вогнутостью к центру креста нитей и указывающие на линейчатый характер поверхности и ее выпуклость (разрывы линий отвечают ребрам), или три пятна, близкие по форме к треугольникам (просветы между пятнами также отвечают ребрам крыши).

Надстройка третьего контура (рис. 14, в) состоит из линейчатых поверхностей положительной кривизны. Это будут поверхности, например, трех конусов, оси которых пересекаются в одной точке. Гониометрическая картина образована тремя сигналами в виде пересекающихся кривых линий (например, частей окружности). Надстройка четвертого контура (рис. 14, г) состоит из поверхностей отрицательной кривизны, аналогичных поверхностям положительной кривизны крыши второго контура. Гониометрические сигналы в случае линейчатых поверхностей отличимы от таковых для второго контура, так как выпуклой частью они будут обращены к центру креста нитей. Если же поверхность надстройки нелинейчатая (например, часть сферы), то треугольное пятно сигнала в гониометре будет обращено основанием к вершине надстройки контура. Последнему контуру отвечает надстройка из частично линейчатых или нелинейчатых поверхностей положительной кривизны. В случае линейчатой поверхности (например, сопрягающиеся конусы) гониометрический сигнал будет по форме отвечать контуру, повернутому на 180° . Если поверхность нелинейчатая, то сигнал будет пятном, форма которого отвечает форме контура. Наконец, если контур является окружностью

(общий для всех классов симметрии, не показанный на рис. 14), то образцовая надстройка его может быть частично линейчатой поверхностью (поверхность конуса) или нелинейчатой (часть сферы, эллипсоида или других тел вращения). Для конической поверхности сигнал на гониометре будет окружностью, а в остальных случаях будет иметь вид круглого пятна.

Надстройки, так же как и контуры, могут быть положительными и отрицательными соответственно положительным и отрицательным кристаллам. Надстройки контуров, размноженные операциями симметрии класса, будут аналогичны простым формам плоскогранных кристаллов. Отличие от простых гранных форм заключается в том, что симметричные друг другу надстройки, продолженные до пересечения, в большинстве случаев будут замыкать пространство. Незамкнутое пространство дадут только те надстройки, основанием которых являются контуры, лежащие в плоскости моноэдра. По этой причине практически невозможно для большинства случаев однозначно ответить, какие типы надстроек образуют тот или иной округлый кристалл. Так называемый алмазный «октаэдронд» может быть, например, рассмотрен как совокупность надстроек октаэдра или куба. Первое удобнее, так как наблюдаются округлые ребра, лежащие в плоскостях $\{110\}$. Кубонд также удобнее рассматривать как надстройку с симметрией $4mm$ без изломов, так как имеется 12 кривых ребер, аналогичных (но не равных) ребрам куба. Совокупность конусов растворения кварца [51] уже не может быть охарактеризована названиями, аналогичными кубонду, додекаэдронду и т. д. Она представляет собой совокупность трех конических надстроек контуров в виде окружностей, лежащих в плоскостях тригональной призмы. Округлые формы кристаллов могут представлять собой комбинации надстроек. Понятие о крышах контуров, по-видимому, удобно использовать также при описании аксессуарий роста и растворения в виде вициналей, бугорков роста и растворения, фигур травления и т. д.

Округлые кристаллы, имеющие вершины и ребра, весьма разнообразны по форме. Среди этого разнообразия можно выделить по крайней мере два типа. К первому типу мы отнесем такие округлые кристаллические тела, для которых выполняется теорема Эйлера. Образование этих тел можно представить себе путем деформации выпуклых пустотелых многогранников, изготовленных из эластичного материала и подвергнутых всестороннему растяжению («накачиванию») или сжатию («выкачиванию из них воздуха»). Ребра многогранников должны быть более или менее жесткими, чем грани.

Ко второму типу мы отнесем такие округлые кристаллы, для которых теорема Эйлера не выполняется. Сюда относится большинство округлых кристаллов, у которых имеются, например, кривые ребра, не образующие замкнутой сети, или присутствуют только конические образования, переходящие без изломов в округлые поверхности, и др. Для округлых кристаллов первого типа

применяют названия, аналогичные названиям простых форм с окончанием «оид» (октаэдроид, кубоид, додекаэдроид). Простых кривогранных форм с такими окончаниями будет 47×2 , как было показано Е. Б. Трейвусом [41]. Однако здесь нужно сделать следующее уточнение. Ребра и вершины таких форм могут различаться. Как вытекает из рис. 14, кривогранные формы с выпуклыми поверхностями могут иметь ребра прямые и кривые (положительной и отрицательной кривизны). Двугранные углы при этих ребрах могут быть выходящими или входящими. Вершины таких форм также могут быть выходящими или входящими.* Если округлые поверхности простой кривогранной формы выпуклые, то ребра и вершины могут быть как выходящими, так и входящими. При отрицательной кривизне поверхностей ребра и вершины только выходящие. Некоторые кривогранные формы кристаллов могут быть с ребрами, но без вершин. Чечевицеобразные кристаллы гипса [53] имеют одно ребро, представляющее собой линию излома между двумя поверхностями округлого «пинакоида».

ИЗОБРАЖЕНИЕ ОКРУГЛЫХ ФОРМ КРИСТАЛЛОВ НА СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ

Округлые формы кристаллов на стереографической проекции в некоторых случаях изобразить весьма трудно, ввиду того что на этих проекциях ряд геометрических фигур с округлыми поверхностями не может быть отражен однозначно. Линейчатые поверхности (конус, цилиндр и др.) могут быть показаны на проекции достаточно четко. Нелинейчатые поверхности, не имеющие линий и точек изломов (без вершин и кривых ребер), на проекции однозначно отразить нельзя. Так, например, шар и эллипсоид на гномостереографической проекции будут выглядеть одинаково — в виде зачерненного поля всего круга, так как эти фигуры содержат все ориентации поверхности кристалла. Если на округлой поверхности кристалла есть линии и точки изломов (ребра и вершины), то можно воспользоваться весьма простым приемом для отображения этих форм рельефа. Пусть округлое тело кристалла будет «октаэдроидом», поверхность которого дает световое пятно в виде сферического треугольника с симметрией $3m$. Ребра такой фигуры на гномостереографической проекции могут быть показаны областями, заключенными между сторонами треугольников и дугами зон, соединяющих вершины треугольников. Тогда области многоугольников, заключенные между дугами зон, показывают вершины данного округлого тела. Другим примером может служить кристалл КДР с так называемой «округлой призмой». На рис. 15, а и б изображен такой кристалл и показана гномостереографическая проекция его граней (в том числе и округлых),

* Примером перехода кривогранной выпуклой формы с выходящими углами при ребрах и вершинах в форму с входящими углами может служить простой опыт с надуванием камеры футбольного мяча.

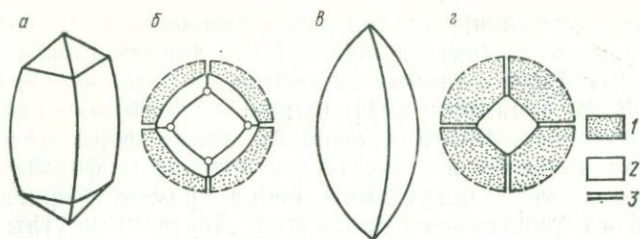


Рис. 15. Кристаллы KDP (а, в) и их гномостереографические проекции (б, г).

1 — проекции кривых ребер; 2 — вершины; 3 — проекции кривых граней.

ребер (прямых и кривых) и вершин. На рис. 15, в изображен кристалл KDP, ограниченный полностью округлыми поверхностями, а на рис. 15, г приведена его гномостереографическая проекция.

В книге А. Е. Ферсмана «Кристаллография алмаза» [46] приведено большое количество великолепных, тщательно выполненных зарисовок кристаллов алмаза с округлыми поверхностями, сопровождаемых прекрасными гномоническими проекциями. Из этих рисунков и проекций можно составить достаточно полное представление о сложности и большом разнообразии проявления округлых поверхностей на кристаллах алмаза. Среди зарисовок легко найти округлые тела, для которых выполняется и не выполняется теорема Эйлера, округлые тела с входящими ребрами, конусовидные поверхности и т. д. По гномоническим проекциям, помещенным в этой работе, также можно судить о выполнении теоремы Эйлера. Если на проекции округлого кристалла поля, не занятые изображениями сигналов (т. е. темные поля в гониометре, отвечающие ребрам и вершинам), образуют замкнутую сеть, то указанная теорема выполняется. Если хотя бы часть темных полей полностью изолирована (окружена) световыми полями, то теорема Эйлера не выполняется.

ОСОБЕННОСТИ МОРФОЛОГИИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Под отрицательным кристаллом понимают ограниченную полость внутри положительного кристалла, обычно заполненную маточной средой (раствором или газом). Следует различать отрицательные кристаллы открытые, сообщающиеся со средой кристаллизации, как, например, углубления на поверхности кристалла в виде ямок травления, штриховки и др., и закрытые, не сообщающиеся со средой, как включения маточной среды, включения другой твердой фазы и др. «Жизнь» отрицательного кристалла второго типа изучалась рядом авторов, так как она представляет большой минералогический интерес (температура гомогенизации газожидких включений, их состав, разбиение крупных включений на более

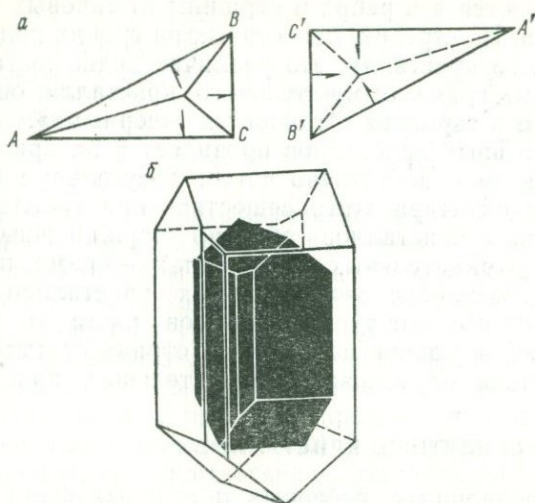


Рис. 16. Схемы положительных и отрицательных кристаллов.

a — на примере шубниковских тетраэдров; *b* — на примере кристаллов эпсомита.

мелкие, равновесная форма и т. д.). Помимо этих интересных и важных вопросов геометрия отрицательного кристалла имеет некоторые особенности, без учета которых их исследование может встретить иногда затруднения.

Если известна форма положительного кристалла, то отрицательный кристалл геометрически может быть построен следующим образом. Пусть начало координатной системы (кристаллографических осей) находится в центре отрицательного (замкнутого) кристалла. Параллельным переносом всех граней положительного кристалла за центр координатной системы получается соответствующий отрицательный кристалл. В символах это проявится переменной знаков индексов на обратные. Описанная операция является антиинверсией $\bar{1}'$, т. е. переводом фигуры из правой белой в левую черную или наоборот. Из рис. 16 видно, что свойства граней отрицательного кристалла будут одинаковы со свойствами соответствующих граней положительного кристалла.* Все ребра отрицательного кристалла будут параллельны ребрам положительного кристалла, но свойства ребер и вершин отрицательного кристалла будут отличаться от таковых положительного кристалла. Помимо того что все углы как при ребрах, так и при вершинах у отрицательного кристалла входящие, есть еще одна особенность,

* Это утверждение автора, по-видимому, неправильно. Свойства граней положительного и отрицательного кристалла различаются не в меньшей мере, чем свойства ребер и вершин. Это четко обнаруживается в процессах роста и растворения кристаллов (см., например, [26]).— *Ред.*

которой отличаются эти ребра и вершины от таковых положительного кристалла. Из стрелок, нанесенных на гранях положительного и отрицательного кристалла, это различие видно достаточно четко. Таким образом, грани отрицательного кристалла остаются «белыми», а ребра и вершины становятся «черными». Эта особенность отрицательных кристаллов проявляется на кристаллах алюмокалиевых квасцов достаточно четко. Треугольные ямки травления на гранях октаэдра этого вещества (при травлении в воде) у положительных кристаллов обратно параллельны очертанию граней, а на отрицательных кристаллах — прямо параллельны. Отмеченные особенности отрицательных кристаллов необходимо учитывать при исследовании процессов роста и растворения. Например, генерирующая роль ребер отрицательного кристалла может отличаться от таковой положительного кристалла.

К ГЕОМЕТРИИ СКЕЛЕТНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Учение о вершинных, реберных и гранных формах дает возможность разрешить с общих позиций вопросы геометрии скелетных кристаллов. Внимательный просмотр минералогических экспонатов в музеях, зарисовок природных кристаллов и образцов из минералогических коллекций показывает, что вершинники, реберники и гранники с входящими углами и также в виде пучков встречаются значительно чаще, чем это может показаться с первого взгляда.

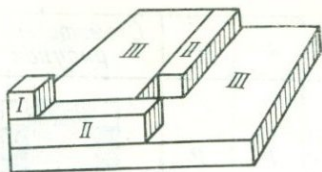
Форма реального кристалла проявляется либо в виде заполненного веществом многогранника (+), либо в виде пустотелого отрицательного кристалла (—). Кроме того, существуют комбинации положительных и отрицательных форм (\pm) и (\mp). Примером формы (\pm) могут служить коробчатые или футлярообразные кристаллы (пример — апатит и др., по В. Д. Никитину [31]). Примером образования (\mp) может служить пустотелый «футляр» (совокупность пересекающихся спайных трещин внутри кристалла).

Далее переходим к вершинным и реберным формам нарастания (растворения). Под положительными вершинными и реберными формами нарастания понимаются не математические точки и прямые, а материальные участки, примыкающие к вершинам и ребрам кристалла. Аналогично отрицательными формами являются углубления возле вершин и ребер. Как указывалось выше, к гранным формам мы относим, помимо обычных выпуклых многогранников, гранные формы с входящими углами и гранные пучки.

Рост кристаллов можно интерпретировать как постепенное развитие форм, начинающихся с вершинных форм нарастания, переходящих к реберным, а затем уже к гранным формам. Сказанное хорошо иллюстрируется рис. 17. На нем видно, что новый слой начинается с вершинной формы (I). Далее за счет трансляции этой формы развивается реберная форма (II). Присоединение все новых реберных форм образует в совокупности поверхностный

Рис. 17. Схема роста кристалла по В. Косселю.

I — вершинное нарастание;
II — реберное нарастание;
III — грань.



слой кристалла (III). Многочисленные примеры скелетных, антискелетных и прочих образований подтверждают указанную выше последовательность форм роста. Итак, в основном рост кристаллов идет за счет нарастания все новых и новых положительных вершинных, реберных и гранных форм. Так как в результате такого процесса заполняются входящие трехгранные и двугранные углы на поверхности кристалла, отвечающие его отрицательным вершинам и ребрам, то при этом происходит как бы «растворение» (стремление к исчезновению) отрицательных форм. Само собой разумеется, что растворение кристалла сводится к разрастанию отрицательных вершинных, реберных и гранных форм при параллельном исчезновении соответственных положительных форм. Отсюда идеальный рост кристалла может быть представлен схемой: (+) вершинные формы, (+) реберные формы, (+) гранные формы (рис. 18, левый столбец). Для идеального случая растворения кристалла схема будет иметь такую же последовательность с переменной знаков на обратные: (—) вершинные формы, (—) реберные формы, (—) гранные формы (рис. 18, правый столбец). Обе схемы (на рис. 18) относятся к росту (растворению) идеального, выпуклого, плоскогранного, прямореберного кристаллического многогранника.

Согласно Г. Г. Леммлейну [1947 г.], кристалл может иметь плоские грани только в состоянии равновесия с кристаллообразующей средой. В реальных условиях роста грани кристалла приобретают скульптурные осложнения, а в предельных случаях возникают характерные формы, называемые скелетами, антискелетами [2] и пр. Последние тоже могут быть охарактеризованы с помощью положительных и отрицательных вершинных, реберных и гранных форм нарастания. Постоянное присутствие положительных

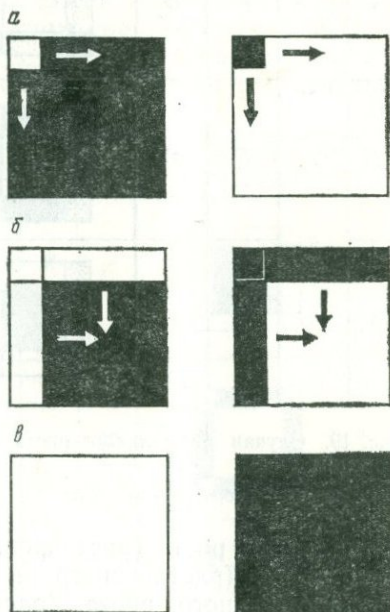


Рис. 18. Схема идеальных роста и растворения кристаллов.

Левый столбец — рост (белый цвет), правый — растворение (черный цвет); а — вершинные формы нарастания; б — реберные; в — гранные формы.

№ пп.	0	+	-	Схематический рисунок
1	Г	В	Р	
2		Р	В	
3	Р	В	Г	
4		Г	В	
5	В	Г	Р	
6		Р	Г	

Рис. 19. Случаи аномального роста и растворения.

Г — грани; Р — ребра; В — вершины.

нормальный рост (растворение) содержит элементы аномального роста (растворения) и наоборот. Будем различать в случае аномального роста (растворения) три относительные степени скоростей роста (растворения) соответственно для вершинных (В), реберных (Р) и граничных (Г) форм нарастания. Это будет усиленный рост (+), средний (0) и замедленный (—). При растворении знаки меняются на обратные. На рис. 19 показаны все случаи аномального роста (растворения) для кристалла, со-

и отрицательных форм на реальных кристаллических телах роста и растворения позволяет сделать вывод: рост (растворение) кристалла представляет собой как бы борьбу между положительными и отрицательными формами. На каждом этапе роста или растворения существование этих форм неизбежно, так как они являются взаимно порождающими друг друга формами. Скелетные и антискелетные кристаллы можно рассматривать как проявление недостаточного питания одних элементов при одновременном недостатке питательного материала для других их элементов. Конечно, здесь не следует понимать вышесказанное так, что одни участки кристалла (например, грани) вовсе не растут, тогда как другие (ребра и вершины) растут. Дело сводится к тому, что одни элементы кристалла не успевают за ростом других элементов. В этих случаях мы будем говорить об аномальном росте кристаллов, противопоставляя ему нормальный рост, в течение которого кристалл остается замкнутым выпуклым многогранником.

Однако, говоря о реальных кристаллах, следует иметь в виду, что любой

стоящего из одной гранной, реберной и вершинной форм. Для наглядного изображения всех возможных случаев мы используем три цвета: белый (+), серый (0) и черный (—). При аномальном росте (растворении) кристаллов часто имеют место случаи, когда два элемента (вершина и ребро, вершина и грань, грань и ребро) имеют одинаковые относительные степени роста (растворения). Всего возможно шесть комбинаций таких случаев (рис. 20): 1) $G+P-B-$; 2) $P+G-B-$; 3) $B+G-P-$; 4) $P+B+G-$; 5) $G+B+P-$; 6) $G+P+B-$. Следует подчеркнуть, что аномальный рост (растворение) тех или иных частей кристалла иногда достигает значительной величины, приводя к образованию так называемых дендритов, скелетов и антискелетов, как положительных, так и отрицательных. Здесь еще раз необходимо подчеркнуть, что реальный рост сопровождается одновременно двумя процессами: ростом положительных форм и растворением отрицательных. При растворении наоборот — растворение положительных форм и рост отрицательных.

В табл. 6 дается общая характеристика форм роста и растворения кристаллов, представляющая собой итог вышеизложенных соображений. Под ростом отрицательного кристалла здесь имеется в виду увеличение объема полости внутри кристалла. Под растворением же отрицательного кристалла подразумевается уменьшение этой полости. Для минералогов важно подчеркнуть большое морфологическое сходство между ростом (растворением) положительных и отрицательных кристаллов. Так, при росте положительных и отрицательных кристаллов получают плоскогранные мно-


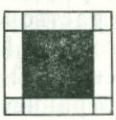




№ пп.	+	—	Схематический рисунок	№ пп.	+	—	Схематический рисунок
1	G	P B		4	P B	G	
2	P	G B		5	G B	P	
3	B	G P		6	G P	B	

Рис. 20. Шесть случаев аномального роста и растворения при наличии двух знаков (+ и —).

Характеристика форм роста и растворения кристаллов

Рост				Равно- весие	Растворение			
положительных кристаллов		отрицательных кристаллов			равновесная форма	положительных кристаллов		отрицательных кристаллов
нормаль- ный	аномаль- ный	нормаль- ный	аномаль- ный			нормаль- ное	аномаль- ное	нормаль- ное
$B (+)$	$B (\pm)$	$B (-)$	$B (\mp)$	$B (0)$	$B (-)$	$B (\mp)$	$B (+)$	$B (\pm)$
$P (+)$	$P (\pm)$	$P (-)$	$P (\mp)$	$P (0)$	$P (-)$	$P (\mp)$	$P (+)$	$P (\pm)$
$\Gamma (+)$	$\Gamma (\pm)$	$\Gamma (-)$	$\Gamma (\mp)$	$\Gamma (0)$	$\Gamma (-)$	$\Gamma (\mp)$	$\Gamma (+)$	$\Gamma (\pm)$

гогранники (положительные и отрицательные). При растворении же положительных и отрицательных кристаллов возникают, как правило, закругления вершин и ребер. Примеры вышесказанного можно найти в работах М. Г. Фриделя [84], К. Шпангенберга [1926 г.] и А. В. Шубникова [66]. Возвращаясь к табл. 6, укажем, что рост (растворение) положительных и отрицательных кристаллов также разделяется на нормальный и аномальный (в вышеприведенном понимании). Нормальный рост не требует специальных пояснений. Аномальный же рост (растворение) поясняют схемы на рис. 19 и 20. В случае, если кристалл состоит из нескольких простых вершинных, реберных и гранных форм, то разные вершинные, реберные и гранные простые формы будут иметь различные степени скоростей роста (растворения), которые можно изобразить различными цветами.

Примеры, иллюстрирующие отдельные случаи аномального роста или растворения кристаллов, приведены в работах В. А. Мокиевского и И. И. Шафрановского [28, 29].

Изложенный материал позволяет охарактеризовать не только формы ограничения кристаллов, но и скульптурные усложнения на их поверхности в виде штриховок, фигур травления, вициналей и т. д.

ПРОЯВЛЕНИЕ БЕСКОНЕЧНОЙ СИММЕТРИИ НА КРИСТАЛЛАХ

Известно, что симметрия кристаллических структур отличается от конечной симметрии кристаллов наличием элементов бесконечной симметрии — трансляций, винтовых осей и плоскостей скользящего отражения. Эти элементы симметрии проявляются и на характере внешнего ограничения кристаллов.

Сейчас остановимся на примерах проявления бесконечной симметрии другого рода, а именно на симметрии кристаллических сростков и других образований, обусловленной не столько внутренней симметрией структуры, сколько многократной повторяемостью деталей роста. Классические примеры именно такой сим-

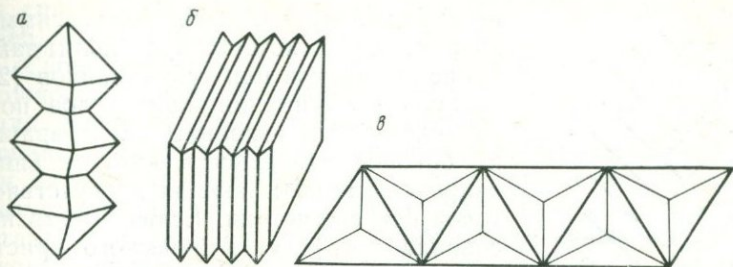


Рис. 21. Полисинтетические сростки кристаллов.

a — параллельный сросток кристаллов аргентита; *b* — полисинтетический двойник альбита; *в* — полисинтетический двойник кальцита.

метрии представляют изображаемые во всех учебниках кристаллографии «четки» из параллельно сросшихся кристаллов или образцы полисинтетических двойников. И в том, и в другом случае мы имеем в реальности как бы обрывки бесконечно протяженных «цепочек» из сросшихся кристаллических индивидов.

Из таких обрывков можно легко построить теоретически бесконечную цепочку, мысленно добавляя к ней все новые и новые индивиды, присоединенные к уже имеющимся по законам симметрии и обуславливающим повторяемость сросшихся кристаллов. Симметрия подобных образований лучше всего характеризуется бесконечной симметрией стержней, наглядно описанной в известной монографии А. В. Шубникова [67].

На рис. 21, *a* изображен параллельный сросток октаэдров аргентита, принадлежащего к планаксиальному виду симметрии кубической сингонии $m\bar{3}m$. Одна из четверных осей октаэдра совпадает с осью стержня, вдоль него же идут четыре плоскости симметрии, а перпендикулярно к стержню сохраняются одна плоскость симметрии и двойные оси. Таким образом, октаэдры в стержне получают тетрагональную симметрию $4/mmm$. Бесконечная симметрия всего стержня из октаэдров $4mm/2m$.*

Рис. 21, *b* изображает полисинтетический двойник альбита, в котором два двойника по альбитовому закону срастаются в один двойник высшего порядка по карлсбадскому закону. Бесконечная цепочка состоит из бесчисленного множества таких сросшихся двойников. Симметрия подобных стержней будет рассмотрена несколько позже.

По сути дела, к таким же бесконечным стержням можно отнести и скрученные кристаллы кварца, в которых с двойной осью кристалла и одновременно с осью стержня совпадает винтовая ось. Порядок этой оси, очевидно, может изменяться в зависимости от степени скрученности образца. Вместе с тем такая ось

* Условимся на первом месте записывать элементы симметрии, параллельные оси стержня, а после косой черты — элементы симметрии, нормальные к оси стержня.

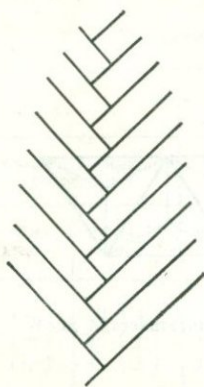


Рис. 22. Ветвь скелета с плоскостью скользящего отражения (по Д. Д. Саратовкину).

всегда совпадает с двойной осью симметрии кварца, вдоль которой происходит закручивание индивидов или субиндивидов [24].

При вытягивании кристаллов по Чохральскому (вытягивание плюс вращение) на боковой поверхности имеется винтовая «нарезка», показывающая присутствие винтовой оси симметрии. Если ось вытягивания совпадает с $[111]$ кубического кристалла, то винтовая ось может быть как 3_1 , так и 3_2 , в зависимости от направления вращения затравки. Наличие такой симметрии формы боковой поверхности, однако, может не сказаться сколько-либо заметно на форме фронта роста, симметрия которого может быть, например, $3m$ или 3 .

Более наглядно проявляется бесконечная симметрия на скелетных кристаллах в виде реберных пучков. На рис. 22 демонстрируется ясно выраженная плоскость скользящего отражения, направленная вдоль ветви скелета (перпендикулярно к плоскости рисунка). Этот мотив лежит в основе обычного узора деревянных паркетов с ромбической симметрией Pba [Белов Н. В., 1956 г.]. Уподобляя ветви скелетного кристалла бесконечным стержням, следует, конечно, учитывать условность такого сравнения. Нарастающая ветвь скелета лишь в пределе роста стремится к стержню. С подобным же явлением мы встречаемся и в случае расположения ветвей на стволах деревьев или листьев на стеблях растений. Винтовые, или спиральные, линии, по которым располагаются ветви и листья, не отвечают идеальным линиям, подчиняющимся винтовым осям симметрии. Эти линии как бы нанесены на очень острый конус, соответствующий стволу или стеблю. В пределе роста такой конус приближается к цилиндру, а винтовая линия на конусе стремится к идеальной винтовой линии, расположенной на поверхности цилиндра. Аналогичное явление может иметь место и в отношении ветвей растущего скелетного кристалла. Во всяком случае, наблюдается, как и на растениях, уменьшение более «молодых» ветвей. Ясно, что для математически точного описания таких образований классической симметрии уже недостаточно.

Новую математическую трактовку упомянутых выше явлений мы находим в статье А. В. Шубникова [72]. Здесь описываются операции симметрии подобия, представляющие собой своеобразные аналоги трансляций, поворотов вокруг осей, отражений в плоскостях и поворотов вокруг винтовых осей с той разницей, что такие операции связаны с одновременным увеличением или уменьшением масштаба подобных частей фигуры и расстояний между ними. По указанию самого А. В. Шубникова, симметрия подобия осуществляется в законах расположения листьев у расте-

ний, в спиральной форме раковин, в конических формах многих деревьев, в скелетных формах и пирамидах роста кристаллов и т. д. Свою статью А. В. Шубников заканчивает указанием на «возможность использования теории симметрии подобия — при изучении разнообразных ритмических явлений, сопутствующих образованию кристаллов». Прекрасными примерами такой симметрии служат ступенчатые нарастания граней от их центров к оконтуривающим их ребрам, зоны кристаллического роста, как бы вставленные друг в друга наподобие игрушечных «матрешек», и, наконец, спирали роста на кристаллах. Хорошим примером проявления симметрии подобия являются отрицательные скелетные кристаллы, возникающие при плавлении напряженных положительных кристаллов фтористого лития [Мокиевский В. А., Афанасьев И. И., 1964 г.]. Плавлению подвергались крупные кристаллы фтористого лития, выращенные из расплава методом Киропулоса. Кристаллы, полученные этим методом, всегда имеют напряжения, легко обнаруживаемые в поляризованном свете. Плавление производилось в обычной тигельной печи с автоматической регулировкой температуры. Во избежание полного расплавления вещества вскоре после начала процесса плавления температура снижалась и кристалл в печи извлекался.

Наблюдения показали, что плавление на самых начальных стадиях происходило только на поверхности кристалла. Затем процесс плавления начинал проникать во внутренние части, в результате чего в кристалле образовались полости, связанные с его поверхностью. После извлечения кристалла из печи было установлено, что эти полости имели строго закономерное расположение. Они образовали серию «каналов», направление которых точно соответствовало [111]. Во многих случаях «каналы» расходились из одной точки сразу в нескольких направлениях (в трех, четырех, пяти, шести, семи и максимум в восьми). В редких случаях направление «каналов» совпадало с [100]. Весьма часто «каналы» имели ответвления в виде более тонких полостей, удлинение которых также совпадало с [111]. Эти вторичные полости могут давать аналогичные ответвления. В целом вся картина напоминает обычный дендрит с ветвями первого, второго и т. д. порядков. Такое образование следует называть отрицательным скелетом или дендритом.

Начальная температура образования отрицательных скелетов несколько ниже истинной температуры плавления фтористого лития (870°C). Однако в связи с некоторыми трудностями нам не удалось точно зафиксировать температуру начала роста этих отрицательных реберных форм.

Весьма своеобразна морфология таких отрицательных скелетных кристаллов. Измерение вскрытых полостей на гониометре показало, что ветви скелетов образованы отрицательной гранной разновидностью октаэдра, ребра и вершины которого закруглены. Эти «ромбоэдрические» октаэдры образуют четкообразные ветви отрицательных скелетов, как бы нанизываясь друг на друга вдоль

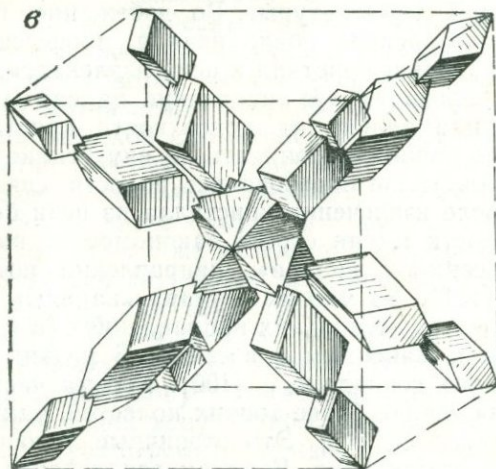
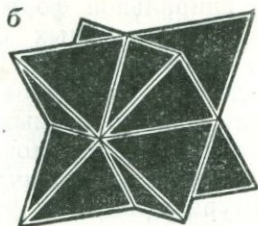
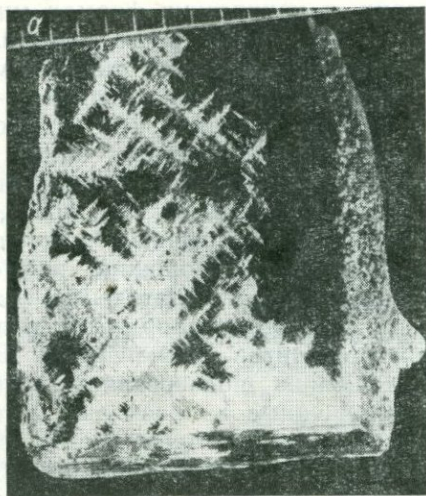


Рис. 23. Отрицательные скелеты фтористого лития.

a — фотография; *b* — форма центра роста; *z* — схема отдельной ветви с симметрией подобия; *v* — схема распространения ветвей вдоль осей третьего порядка.

тройной оси. Как видно из рис. 23, *z*, каждая ветвь представляет собой прекрасный пример симметрии подобия с операцией K . Полная симметрия такой ветви запишется так: $3mK$. Из этого следует, что процесс плавления (выплавления) происходит скачкообразно, так же как и рост положительных скелетов фтористого лития. Своеобразна по форме и центральная часть скелета (рис. 23, *b*, *v*), из которой расходятся отдельные ветви. Эта полость также представлена отрицательной гранной разновидностью октаэдра, но как бы состоящей из двух «тетраэдров».

Из сказанного вытекает, что на кристаллах часто встречаются случаи проявления бесконечной симметрии. В связи с этим следует затронуть вопрос и о бесконечно протяженных простых кристаллографических формах, проявляющихся на образованиях с бесконечной симметрией. Грани, ребра и вершины таких форм выводятся друг из друга с помощью бесконечной симметрии. Здесь имеются в виду не только гранные, но и вершинные и реберные формы кристаллов. Сюда, например, будут относиться повторяющиеся по законам трансляций, винтовых осей и плоскостей скользящего отражения грани, ребра и вершины индивидов, четкообразно «нанизанных» вдоль одной или нескольких бесконечно протяженных осей роста.

Вывод бесконечных форм из отдельно взятых гранных и реберных простых форм может быть легко осуществлен с помощью таблиц и рисунков, изображающих простые реберные формы и разновидности гранных форм.

Наличие скрученных кристаллов с изогнутыми гранями, следующими законам винтовой симметрии, приводит к появлению соответственных бесконечных простых форм с усложненными поверхностями.

Наконец, выдвинутая А. В. Шубниковым симметрия подобия требует вывода соответственных «простых» форм с закономерно уменьшающимися или увеличивающимися подобными деталями кристалла.

ЦВЕТНАЯ СИММЕТРИЯ И ФОРМЫ РЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Предыдущие разделы касались рассмотрения форм идеальных кристаллов, и только попутно отмечались некоторые особенности морфологии реальных кристаллических тел. Ниже мы остановимся более детально на морфологии реального кристалла и способе ее описания с помощью цветной симметрии.

В работе О. Виттке и Д. Карридо [99] было найдено 211 многоцветных групп симметрии путем раскрашивания кристаллических многогранников. Как известно, характерной особенностью всех цветных точечных групп симметрии (включая 58 шубниковских групп) является то, что каждая группа цветной симметрии содержит одноцветную подгруппу исходной одноцветной группы. Поэтому число цветов данной цветной группы есть четное от деления порядка цветной группы на порядок одноцветной подгруппы.

Учение об идеальном кристалле исходит из того, что кристалл однороден, не содержит никаких дефектов, не зонален и не секториален. Такой кристалл должен отвечать идеальному, близкому к равновесию процессу роста, состоянию кристаллообразующей среды, в которой практически нет ни температурных, ни концентрационных градиентов, порождаемых самим кристаллом при росте. Отсюда следует тривиальный вывод, что в неравновесной реальной системе должен образоваться неоднородный кристалл.

Здесь мы рассмотрим только те неоднородности, которые связаны с пирамидами роста. Секториальному строению кристалла посвящено много публикаций [24, 55, 73]. Сейчас после работ И. И. Шафрановского [54, 57] появилась возможность увязать воедино симметрию среды, секториальное строение и цветную симметрию. Кристалл, состоящий из пирамид роста, представляет собой некоторую текстуру [70], единицей которой является пирамида роста одной грани (зональность при этом не учитывается). Кристаллообразующие среды могут иметь любую группу симметрии, включая предельные. Поле тяготения, имеющее симметрию неподвижного конуса ∞m , особенно сильно влияет на рост кристалла из жидких и газообразных сред. При кристаллизации, например, из твердого состояния или в вязких средах это влияние поля тяготения может быть сведено к нулю.

Если симметрия среды кристаллизации известна, то симметрия текстуры реального кристалла (G^T) может быть найдена на основании принципа симметрии П. Кюри [23, 54] как результат пересечения групп симметрии среды (G^{cp}) и кристалла (G^k) с учетом, разумеется, их взаимной ориентировки — $G^k \cap G^{cp} = G^T$. Результат пересечения G^T может быть самым классом симметрии кристалла или его подгруппой. В первом случае одноцветный класс описывает также текстуру реального кристалла. На модели такая текстура может быть продемонстрирована с помощью раскраски граней одной простой формы в один цвет. Грани разных форм раскрашиваются в разные цвета. Из этого следует вывод, что для получения максимально однородного, например по содержанию примесей, кристалла нужно создать такие условия, чтобы симметрия среды приближалась к шару или цилиндру (для кристаллов низшей и средней категорий), а кристалл при росте был бы ограничен плоскостями одной простой формы. Последнее условие уже отмечалось в работе Н. Н. Шефталя [65]. При вытягивании кристаллов из расплава, когда максимальная группа симметрии среды может отвечать только конусу ∞m , следует добиваться таких условий, чтобы на фронте роста была только одна грань.*

Если G^T является подгруппой класса симметрии кристалла, то симметрия текстуры может быть описана цветным классом, у которого G^T является одноцветной подгруппой. Так, например, при пересечении $G^k = m\bar{3}m$ и $G^{cp} = \infty/\infty$, G^T будет отвечать группе 432. Цветная симметрия текстуры описывается шубниковской группой $m'\bar{3}'m'$. Пирамиды роста простых форм будут иметь следующие цвета: $\langle hkl \rangle$ одноцветные, а все остальные двухцветные. Это значит, что гексоктаэдр превратится в два пентагон-триоктаэдра. Пирамиды роста обоих будут отличаться друг от друга, но их однородность будет больше, чем однородность пирамид роста

* При вытягивании кристаллов германия по Чохральскому такие условия были созданы Ю. М. Смирновым. Это способствовало получению бездислокационных кристаллов с минимальным радиальным разбросом удельного электро-сопротивления.— *Ред.*

остальных двухцветных форм. Среды с указанной симметрией (∞/∞) могут быть правыми и левыми. Осуществить их можно путем введения в качестве примеси правых или левых молекул, селективно адсорбирующихся гранями $\{hkl\}$, так как только эти грани на кристаллах класса $m\bar{3}m$ энантиоморфны.

Рассмотрение этого примера вплотную подвело нас к так называемым ложным гранным формам, понятие о которых было введено И. И. Шафрановским [57]. В описанном случае ложными будут только пентагон-триоктаэдры. Ложные формы при помощи цветной симметрии определяются легко, так как они по названиям должны отвечать формам, возможным в одноцветной подгруппе G^r цветного класса. Грани ложных форм должны быть окрашены одинаково, но не обязательно одним цветом. Для определения ложных форм предложенная выше запись симметрии реального кристалла весьма удобна, так как ложными будут те формы, которые возможны в группе, отмеченной в скобках, и не возможны в исходном классе. Поскольку в разобранным примере исходный класс $m\bar{3}m$ отличается по формам от класса 432 гранями общего положения, это значит, что ложными будут только пентагон-триоктаэдры.

Рассмотрим еще один пример. Пусть $G^k = m\bar{3}m$, $G^{cp} = \infty m$ и ось 4 кристалла совпадает с осью ∞ среды (случай, возможный при вытягивании кристаллов из расплава методом Чохральского или способом Степанова). Симметрия текстуры (G^r) при этом будет отвечать группе $4mm$, остальные элементы симметрии класса G^k будут цветными. Поскольку в классах $m\bar{3}m$ и $4mm$ нет равных по названиям форм, то и все формы исходного класса ($m\bar{3}m$) будут ложными. Гексоктаэдр даст шесть ложных дитетрагональных пирамид. Куб распадется на два одноцветных моноэдра и тетрагональную призму, каждая грань которой четырехцветная. Аналогичное произойдет и с другими гранными формами выращиваемого кристалла.

Применение многоцветной симметрии для анализа текстур из пирамид роста имеет еще и тот смысл, что этим методом можно не только предвидеть текстуру, но и по симметрии текстуры, выявленной, например, рентгенометрическим, спектральным методом, измерением удельного сопротивления и т. д., сделать вывод о симметрии среды.

Физико-химический смысл такого подхода к реальному кристаллу мы видим в том, что гидродинамические и тепловые условия при росте кристаллов из жидких или газообразных сред зависят от симметрии этих сред и от ориентировки кристаллов относительно элементов симметрии сред. От этих условий зависит, например, так называемый коэффициент распределения (сегрегации) примесей. Экспериментаторами неоднократно показывалось, что значение этого коэффициента зависит не только от ориентации поверхности кристалла, но и от скорости и условий перемешивания раствора или расплава.

Сказанное о текстурах из пирамид роста целиком распространяется и на текстуры, образованные ребрами и вершинами кристалла, т. е. на текстуры из границ между пирамидами роста. Здесь следует иметь в виду, что если максимальное число цветов, в которые может быть раскрашена грань (или вершина), равно 12, как у грани монокристалла в цветном классе $6mm$ (1), то максимальное число цветов для ребер цветного класса равно только четырем, как в цветном классе $2mm$ (1).

Ложные реберные формы также описываются классическими подгруппами цветных классов и могут быть отображены на гномостереографических проекциях (с. 43). Знание всех возможных ребер и вершин при пересечении простых форм данного класса дает сведения о вероятных реберных и вершинных текстурах кристалла. Пример решения такой задачи с помощью стереографической проекции был продемонстрирован выше (с. 44).

Как было сказано на с. 16, формы реальных кристаллов могут иметь более высокую симметрию, чем сам класс (надгруппы класса), или симметрию, описываемую подгруппами этих более высоких групп. Причем эти подгруппы могут и не быть подгруппами группы симметрии кристалла. Такие кристаллы дают ложные формы (как гранные, так реберные и вершинные). Нами был уже рассмотрен пример с кристаллами KDP (с. 17). Теперь снова вернемся к этим кристаллам и обратим внимание на то, как проявляют себя текстуры из пирамид роста (гранные текстуры), реберные текстуры и вершинные.

Если симметрия среды достаточно близка к группе симметрии цилиндра, то кристалл обычно вырастает (в случае совпадения оси $\bar{4}$ кристалла с осью ∞ цилиндра) высокосимметричным [по нашей записи $\bar{4}2m$ ($4/mmm$)]. Гранная текстура должна также отвечать тетрагональной голоэдри. Однако реберная и вершинная текстуры могут и не совпадать по симметрии с возможной гранной текстурой. Следы, оставляемые перемещающимися ребрами в кристалле, могут оказаться более чутким индикатором условий образования, чем пирамиды роста. Это может произойти по той причине, что на кристалле KDP ребра $(101):(011)$ и $(101):(0\bar{1}1)$ кристаллографически не эквивалентны. Кристалл KDP, ограниченный плоскостями $\{100\}$ и $\{101\}$, имеет четыре реберные и три вершинные формы. Симметрия граней, ребер и вершин этих форм следующая: $(100) — 2$, $(101) — 1$, $(100):(010) — m$ (четыре ребра), $(100):(0\bar{1}0) — 1$ (восемь ребер), $(101):(011) — m$ (четыре ребра), $(101):(0\bar{1}1) — m$ (четыре ребра), $(100):(010):(011):(101) — m$ (четыре вершины), $(100):(0\bar{1}0):(0\bar{1}1):(101) — m$ (четыре вершины), $(101):(011):(\bar{1}01):(0\bar{1}1) — 2mm$ (две вершины). При одной и той же форме кристалла симметрия реберной и вершинной текстур может не отвечать симметрии гранной текстуры. Примеси, например адсорбирующиеся на симметричных ребрах $(101):(011)$, могут не адсорбироваться ребрами другой формы — $(101):(0\bar{1}1)$. В таком случае симметрия реберной текстуры будет

отвечать истинному классу симметрии кристалла. То же самое может произойти с вершинной текстурой. Симметрия реберной текстуры при той же форме кристалла может и значительно понизиться, стать, например, равной $2mm$, если адсорбция произошла на двух ребрах из четырех, или m , если примесь поглотилась одним ребром. Проявление неоднородности кристалла KDP по следу перемещения одного ребра изредка наблюдалось в нашей лаборатории. В большинстве же случаев свилеподобные неоднородности были связаны со всеми ребрами дипирамиды, пересекающими ось $\bar{4}$.

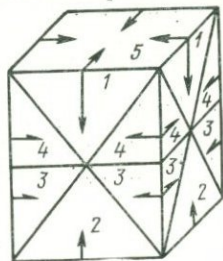
Из сказанного следует, что степень однородности кристалла зависит от числа не только гранных форм, но и реберных и вершинных. Кристалл может быть образован одной гранной формой, но в то же время будет иметь несколько неэквивалентных реберных и вершинных текстур, и, наоборот, при двух, например, гранных формах может наблюдаться одна реберная и вершинная текстура. Напомним, что только три простые гранные формы имеют по одной реберной и вершинной форме (куб, октаэдр и правильный тетраэдр).

Теперь остановимся на расшифровке понятия о многоцветности граней, ребер и вершин. Этот вопрос, вытекающий из цветной симметрии, представляет интерес при изучении, например, образования кристалла. Какой же реальный смысл может быть вскрыт после формальной операции раскрашивания одной грани в несколько цветов и возникновения вследствие этого многоцветных ребер и вершин? Ответ на этот вопрос могут дать только специально поставленные эксперименты. Высказываемые ниже соображения следует рассматривать только как гипотетические.

Классическая теория роста (теория Косселя—Странского) исходит из того, что рост начинается с вершин и ребер кристалла. Возникающие при этом входящие углы являются в дальнейшем местами наиболее устойчивого закрепления частиц. Подобная картина роста наблюдалась на ряде веществ. На кристаллах сегнетовой соли было обнаружено, что источниками нарастающих слоев являются не все ребра кристалла, а только определенные, названные генерирующими [Витовский Б. В., 1949 г.]. Роль генерирующих ребер и вершин может оказаться столь существенной, что она проявится макроскопически в виде реберных и вершинных нарастаний, неоднократно описанных минералогами. Если на

Рис. 24. Многоцветная форма, состоящая из четырехцветной тетрагональной призмы и двух одноцветных моноэдров.

Цифрами отмечены цвета, а стрелками показана различная генерирующая роль ребер между гранями призмы, что может привести к неоднородности пирамид роста этих граней.



основании пересечения G^{ep} и G^k гранная текстура может быть описана цветным классом, в котором хотя бы одна грань является многоцветной, то это значит, что и ребра, ограничивающие данную плоскость, также цветные.

В разобранный выше примере (с. 75) четыре грани куба, образовавшие ложную тетрагональную призму, четырехцветны, ребра двухцветны, а вершины трехцветны (рис. 24). Это значит, что все ребра $[001]$ будут генерировать слои роста одинаково и одна реберная форма правильного куба распадается на три неэквивалентные реберные формы, каждая из которых будет обладать своей генерационной способностью. Скорость движения слоев от ребер по поверхности грани (001) может быть показана четырьмя эквивалентными стрелками, а скорость тангенциального перемещения слоев от ребер по поверхности грани (100) — шестью стрелками, симметричными относительно вертикальной классической плоскости симметрии. От тангенциальной скорости роста слоев зависит и адсорбция примесей. Следовательно, пирамиды роста граней (001) и $(00\bar{1})$ будут более однородными по содержанию примесей, а пирамиды роста граней ложной тетрагональной призмы будут менее однородными. Сказанное распространяется и на кристаллы, у которых имеется несколько вершинных и реберных форм.



ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОРМЫ КРИСТАЛЛОВ *

Помимо таких широко применяемых методов исследования форм кристаллов, как микроскопические и гониометрические, в практике исследований, проводимых школой ЛГИ, используется метод фотогониометрии (метод фиксирования световых фигур на фотопленке или фотобумаге) и метод дисторсий, предложенный автором данной работы совместно с М. Д. Любалиным.

История фотогониометрии изложена в статье В. А. Мокиевского и И. И. Шаfranовского [1953 г.], в которой описано применение двукружного гониометра Е. С. Федорова для фотогониометрических целей. Позднее, в 1959 г., автором настоящей работы был сконструирован новый фотогониометр (рис. 25), описанный в статье В. А. Мокиевского и Ч. Д. Джафарова [1963 г.].

Прибор изготовлен в механической мастерской ЛГИ мастером Е. Е. Сафоновым. Этот фотогониометр отличается от предшествующих моделей других авторов тем, что в нем предусмотрено всестороннее фотогониометрическое исследование как природных, так и искусственных кристаллов. Прибор дает возможность получения фотограмм световых сигналов как на плоской, так и на цилиндрической поверхностях. Кроме того, на приборе имеется устройство, позволяющее юстировать кристалл и проводить обычные предварительные гониометрические исследования. При изучении крупных кристаллов, процессов роста и растворения фотогониометр может быть переведен в вертикальное положение. В комплекте прибора предусмотрены специальные кассеты и кристаллизаторы, дающие возможность фотографировать сигналы при росте и растворении кристалла без извлечения последнего из раствора. Конструкция кассет позволяет производить быструю смену фотопленок и тем самым зафиксировать все стадии вышеуказанных процессов.

Все детали фотогониометра расположены на скамье 1, состоящей из двух металлических стержней. Салазки 2 позволяют перемещать части прибора и производить их юстировку при помощи специальных винтов. На рис. 25 изображена наиболее обычная расстановка деталей, которую можно изменить в зависимости от целей исследования.

* Методы изучения формы кристаллов подробно изложены в книге А. И. Глазова [12].— *Ред.*

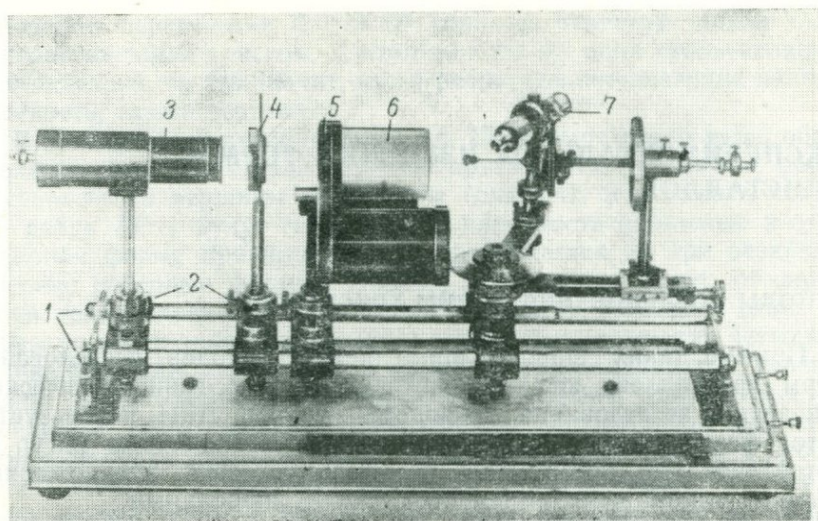


Рис. 25. Фотогониометр.

Прибор состоит из гониометрического устройства 7, цилиндрических кассет, укрепленных на револьверном барабане 5, диафрагмы 4 и осветителя 3. Гониометрическое устройство позволяет юстировать, центрировать кристалл, а также производить предварительное измерение его. Фотопленка (или фотобумага) закладывается в цилиндрические кассеты. Кроме этих кассет на револьверном барабане укреплен полупрозрачный (матовый изнутри) цилиндр 6, который предназначен для просмотра всей световой картины в целом и для юстировки кристалла. В комплекте имеется щелевая диафрагма для исследования деформированных кристаллов. Юстировка прибора осуществляется при помощи специальных приспособлений и сводится к тому, чтобы ось цилиндрической кассеты, оптическая ось осветителя и горизонтальная ось гониометрического устройства лежали на одной прямой.

Значения угловых величин φ и ρ можно получить двумя способами: 1) путем измерения фотограммы и расчета по формуле $I = R \operatorname{ctg} 2\rho$, где I — расстояние от опорной линии ($\rho = 45^\circ$), а R — радиус цилиндра; 2) путем использования трафаретной сетки (палетки).

Для расшифровки фотограмм необходимо знать сферические координаты хотя бы одной грани кристалла (опорная грань). В большинстве случаев эти координаты бывают известны. При произвольной ориентировке кристалла сферические координаты опорной грани могут быть найдены при помощи гониометрического устройства. Для окончательной расшифровки следует прибегать к сетке Вульфа, на которую переносятся данные, найденные по фотограмме.

Определение погрешностей фотогониометрического метода вследствие различного размера кристаллов является сложной задачей, и ее решение в общем виде можно провести только для кубической сингонии при условии идеального развития кристалла, когда все грани касательны к шару. В этом случае

$$\Delta l = r / (2 \cos \rho),$$

где r — радиус шара, к которому грани кристалла касательны. При идеальном развитии кристалла в поправке нуждается только значение l [расстояние от опорной линии ($\rho = 45^\circ$) до сигнала]. Δl при $\rho = 0^\circ$ равно $r/2$, а при $\rho = 90^\circ$ достигает максимальной величины (∞). Δl всегда имеет положительное значение. При $\rho = 45^\circ$, $\Delta l = (r/2)/0,707$.

Для кристаллов средней и низшей категорий и для кристаллов неидеальной формы введение поправок следует производить по стандартному кристаллу, в качестве которого берется идеально развитый кристалл такого же размера, как и изучаемый. Можно, однако, обойтись и без этого, если при помощи гониометрического устройства получить несколько сферических координат (φ и ρ) и ввести на них поправки. Построить кривую поправок можно аналогично тому, как это производится в методе Дебая (см., например, [27]). Необходимо помнить, что для неравномерно развитых кристаллов учет всех поправок является невыполнимой задачей, и направлять свои усилия в эту сторону не следует. Решение этого вопроса при фотогониометрическом методе не является принципиальным. Общая картина световых рефлексов, особенно при хорошем развитии поясов, выявляется достаточно надежно.

Фотогониометрический метод имеет следующие достоинства:

- 1) значительно сокращается время, затрачиваемое на измерение кристалла;
- 2) метод позволяет наблюдать рефлекс от всего кристалла в целом и зафиксировать световую картину на фотопленке;
- 3) расшифровка фотограмм является простой задачей;
- 4) метод позволяет изучать кристаллические образования в виде округлых и кривогранных тел, каковыми являются поверхности растворения, сложные формы роста и деформированные кристаллы.

Наряду с перечисленными преимуществами фотогониометрия имеет некоторые недостатки, главным из которых является невысокая точность метода. Если современные гониометры дают погрешность определения сферических координат $\pm 1'$, то при работе на фотогониометре нельзя претендовать на погрешность меньше ± 20 — $30'$. Поэтому желательно изучать на фотогониометре небольшие кристаллы, расположенные на больших расстояниях от фотопленки. При исследовании кристаллов малейшие искажения формы фиксируются на фотограмме, что является как достоинством метода, так и его недостатком. С одной стороны, это позволяет охарактеризовать реальную форму кристалла, а с другой — затрудняет

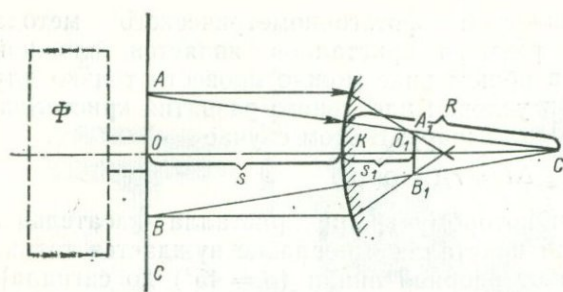


Рис. 26. Схема метода дисторсий.

Φ — фотоаппарат; C — равнопромежуточная сетка; K — кристалл; R — радиус кривизны поверхности кристалла; A_1, B_1 — изображение участка AB сетки.

введение поправок и определение сферических координат. Как показала практика современных гониометрических исследований, в большинстве случаев высокая точность сферических координат не требуется. К тому же фотогониометрию не следует рассматривать как метод, полностью заменяющий обычную гониометрию по точности результатов. Благодаря тому что фотогониометр позволяет увидеть и зафиксировать световую картину от всего кристалла одновременно, прибор чрезвычайно полезен при исследовании кристаллов со сложной поверхностью, характерной для форм роста и растворения кристаллов минералов, деформированных кристаллов и т. д. Описание таких кристаллов должно сопровождаться фотограммами.

При исследовании кристаллов новых минералов или искусственных соединений фотограммы позволяют более достоверно установить класс симметрии. Световая картина от отдельно взятой грани должна независимо от разнообразия штриховки отвечать 10 случаям плоскостной кристаллографической симметрии. Поэтому при помощи фотогониометрии можно легко установить физические разновидности простых форм по Г. Б. Бокию [8]. При этом необходимо учитывать не только яркие точечные сигналы, но и симметрию линейных сигналов.

Интенсивность световых сигналов на фотограмме зависит от ряда обстоятельств. Главным является отражательная способность граней. Размер и форма светового пятна зависят от размера и формы грани. Габитусные грани будут давать сигналы в виде крупных пятен. Прерывистость линейного сигнала свидетельствует о скачкообразном изменении угловых значений торцовых участков ступенчатой поверхности, тогда как сплошная линия показывает непрерывное изменение угловых значений ступенек.

В результате неравномерного развития граней одной простой формы в реальных условиях кристаллообразования нарушится симметрия световой картины, что выявится благодаря частичному отсутствию симметричных сигналов или резкому различию в интенсивности и размерах световых пятен или линий.

Метод дисторсий, кратко описанный в статье М. Д. Любалина и В. А. Мокиевского [1968 г.], состоит в следующем. На объектив фотоаппарата Φ (рис. 26) устанавливается полярная равнопромежуточная сетка AB , освещаемая источником света, который

расположен за кристаллом K . На поверхности кристалла получается изображение A_1B_1 сетки, степень искажения которого зависит от кривизны кристалла. Фокусировка фотоаппарата производится так, чтобы в поле зрения его объектива одновременно находились изображение сетки и контуры кристалла. Если представлять кривую поверхность кристалла как совокупность сфер различного радиуса, то для вычисления кривизны поверхности можно применить формулы сферического зеркала [Урмахер Л. С., 1962 г.]. Имеет место следующее соотношение:

$$\frac{AB}{A_1B_1} = \frac{R+s}{R-s_1} = \frac{R+s}{R-Rs/(R-2s)},$$

где s — расстояние от предмета до поверхности зеркала; s_1 — расстояние от изображения до поверхности зеркала; R — радиус кривизны поверхности.

Измерив расстояние s и определив увеличение AB/A_1B_1 , по фотографии можно решить предыдущее уравнение относительно R (кривизны $K=1/R$). Для получения достаточно четкого изображения кристалла и сетки глубина резкости объектива должна быть близка к s_1 . Для вогнутого зеркала $s_1 = Rs/(2s - R)$. При этом различаются четыре случая расположения сетки относительно кристалла:

1) за центром кривизны кристалла. Из подобия $\triangle ABC$ и $\triangle A_1B_1C$ следует

$$\frac{AB}{A_1B_1} = \frac{s-R}{R-s_1} = \frac{s-R}{R-Rs/(2s-R)} = \frac{2s-R}{R};$$

2) в центре кривизны кристалла —

$$AB/A_1B_1 = 1, \quad s = R;$$

3) между центром кривизны и фокусом кристалла —

$$AB/A_1B_1 = R/(2s - R);$$

4) между поверхностью кристалла и фокусом —

$$\frac{AB}{A_1B_1} = \frac{Rs/(2s - R) + R}{R - s}.$$

Различать эти случаи можно из анализа полученного изображения. Для первого случая будет иметь место действительное обратное уменьшенное изображение. Для второго случая будет обратное, равное по величине предмету изображение. В третьем случае — действительное обратное увеличенное изображение и в четвертом — мнимое прямое увеличенное изображение. Для быстрой оценки этих случаев на равнопромежуточной сетке следует в нескольких местах изобразить асимметричные стрелки.

Описанный метод применялся нами для исследования кривых поверхностей кристаллов германия, которые прекрасно отражают свет (см. ниже). Если же кривогранная поверхность не дает достаточно хорошего изображения дисторсии сетки, как, например, для

случая прозрачных кристаллов, то можно, если это разрешают химические свойства вещества, металлизировать изучаемые участки тем или иным способом. В ряде случаев метод дисторсий дает хорошие результаты в сочетании с гониометрическим или особенно с фотогониометрическим методом.

ФОРМЫ РОСТА И РАСТВОРЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ *

В этом разделе описываются экспериментальные исследования, устанавливающие связь между ростом и растворением положительных и отрицательных кристаллов. Материалом для исследования служили в основном кристаллы алюмокалиевых квасцов и эпсомита ($MgSO_4 \cdot 7H_2O$). С другими веществами опыты носили не систематический характер. Однако, учитывая результаты этих опытов и литературные источники, можно сказать, что данные экспериментов имеют, видимо, общий характер и распространены на рост и растворение в других средах, кроме обычных водных растворов, с которыми мы работали.

По закону образования тел растворения кристаллов, сформулированному В. Гольдшмидтом и Ф. Райтом [86], углы и вершины на теле растворения кристалла соответствуют полюсам граней, присутствующих при его росте, ребра — зонам граней. Этот закон приводит А. Е. Ферсман [46] в качестве правила, по которому следует отличать формы роста кристаллов от форм их растворения.** В 1958 г. Ф. Франк показал [83], что если скорость растворения (роста) есть функция только ориентации его поверхности, то при растворении (росте) кристалла точка на поверхности данной ориентации имеет прямолинейную траекторию, направленную перпендикулярно к поверхности полярной диаграммы обратных скоростей растворения (роста) кристалла в соответствующей точке (рис. 27).

Проведенное нами параллельное изучение процессов образования форм роста и растворения положительных и отрицательных кристаллов позволяет сделать вывод о полном соответствии форм роста кристаллов формам их растворения и их взаимообусловленности. Экспериментальные исследования свидетельствуют о прямой связи между скоростями роста и растворения (при растворении в маточных средах). Каждой простой гранной форме роста отвечает соответствующий вершинник на теле растворения. Как правило, вершинники, отвечающие реальным граням форм роста кристалла, морфологически проявляются при растворении в виде конусовидных возвышений на теле растворения («изолированные вершинники») [Войцеховский В. Н., Мокиевский В. А., 1964 г.], иногда с осложняющими форму элементами (дополнительными

* Данные этого раздела приводятся на основе материалов, полученных автором совместно с В. Н. Войцеховским [Войцеховский В. Н., Мокиевский В. А., 1964 г., 1965 г., 1966 г., 1968 г.].

** Это правило забыто и нигде, насколько нам известно, кроме перечисленных работ, не упоминается.

ребрами, наличием или отсутствием притупления при вершине конуса и т. п.) и определенным углом раствора, указывающим исключенные с тела растворения близлежащие ориентации. Расположение вершинников на телах растворения обычно отвечает выходам нормалей к соответствующим граням форм роста. Сечения вершинников растворения можно описать при помощи пяти примитивных контуров (с. 53) или их комбинаций. Формы самих вершинников являются примитивными надстройками этих контуров или также их комбинациями. Комбинации изолированных вершинников могут давать ребра на теле растворения. Округлая поверхность тела растворения сложена неизолрованными вершинниками. Символ вершинника растворения условимся ставить в двоеточиях [47], например :100:, а конкретной вершины — между двумя точками, например ·100·, кривые ребра на теле растворения будем показывать ограничивающими их вершинниками, например :100:—:111:.

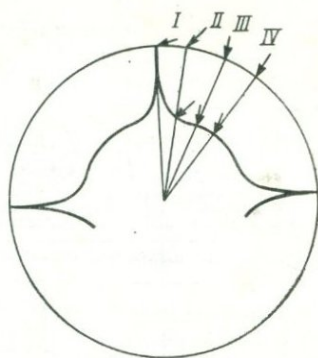


Рис. 27. Диаграмма обратных скоростей растворения по Ф. Франку.

Стрелками показаны направления траекторий участков поверхности различной ориентации.

Рост и растворение кристаллов осуществляли в сравнительно больших объемах раствора (2—2,5 л), чем достигалось незначительное изменение концентрации раствора в течение опыта. Форму полученных кристаллических тел изучали одновременно на кристаллах с различным ограничением, а также на выточенных из них шариках и полусферических углублениях. Кристаллы эпсомита выращивали из растворов с примесью буры (0,06 % от массы растворенной соли). Размер кристаллов не превышал 35 мм по наиболее длинному ребру. Диаметр шариков и размер полостей меняли от 10 до 20 мм. Опыты проводили при 25 °С. Температуру в бане термостата поддерживали с точностью $\pm 0,01$ — $0,02$ °С. Колебания температуры в кристаллизаторе снижались за счет тепловой инерции стеклянных стенок и самого раствора.

Опыты по росту и растворению кристаллов проходили в динамическом режиме при планетарном вращении кристаллоносца (Мокиевский В. А. [1948 г.]; Войцеховский В. Н. [10]). При этих условиях симметрия среды максимально приближается к симметрии шара. Форму кристаллов изучали в условиях, близких к точке насыщения при максимально возможной теплоизоляции раствора с применением стеклянных кристаллоносцев. Для получения необходимого пересыщения (недосыщения), измеряемого в граммах на 100 мл раствора, в определенный объем насыщенного раствора добавляли рассчитанное количество соли (дистиллированной воды). Этот способ исключал влияние температуры на образующиеся формы кристаллических тел. Насыщенные растворы полу-

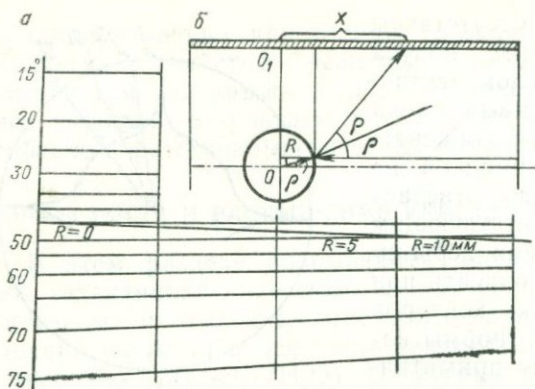


Рис. 28. Схема отражения света от поверхности шарика на цилиндрическую кассету фотогониометра (б) и палетка для определения полярного расстояния по фотограммам для кристаллов разных размеров (а).

чали длительным вымешиванием в присутствии мелко раздробленной соли. Для предотвращения испарения раствор заливали слоем вазелинового масла, которое не оказывает заметного влияния на формы роста и растворения кристаллов. С учетом изменения растворимости соли при возможных колебаниях температуры в бане термостата указанная точность термостатирования недостаточна для получения достоверных значений недосыщений (пересыщений), измеряемых сотыми и тысячными долями грамма на 100 мл раствора. Для решения поставленных задач не было необходимости в получении точных значений недосыщений (пересыщений) $\pm c$, поэтому их брали со значительными интервалами (в 2—10 раз). Постоянство условий в течение опыта контролировали скоростью прироста или потерей массы кристаллов (в граммах на 1 см² за 1 ч).

Поверхность кристаллов исследовали под микроскопом, бинокулярной лупой и на фотогониометре. В некоторых случаях для уточнения фотогониометрических данных кристаллы измеряли на двукружном гониометре. Для сведения к минимуму ошибок измерения координат ρ по фотограммам и для удобства работы с фотограммами на подсвеченное матовое стекло наносили специально вычерченную палетку (рис. 28, а), рассчитанную по формуле $x = R \cos \rho + (OO_1 - R \sin \rho) \operatorname{ctg} 2\rho$ (рис. 28, б).

Для построения палетки определяется расстояние x от опорной линии OO_1 , соответствующее положению световых сигналов от поверхности шарика для значений ρ от 15 до 75° с интервалом 1° для четырех значений $R = 0; 5; 7,5; 10$ мм. Еще раз отметим, что при изучении световых фигур на гониометре и особенно на фотогониометре необходимо обращать внимание не только на световые пятна, но и на темные части этих картин. Последние показывают исключенные кристаллом ориентации, т. е. изломы поверхности (ребра и вершины). Формы темных участков отражают морфологию ребер и вершин.

Растворение положительных кристаллов. Динамика процесса растворения может быть показана с помощью диаграммы обрат-

ных скоростей растворения или роста (рис. 27). Примем за исходное тело растворения шар. В точке *I*, соответствующей выходу нормали к грани кристалла, растворение происходит главным образом по направлениям, касательным к поверхности шара. В точках *II*, *III*, *IV* и т. д., не соответствующих положению реальных граней, преобладают радиальные направления. Соотношение значений векторов *I*, *II*, *III* и т. д., являющееся функцией состояния раствора, будет обуславливать наличие или отсутствие притупления вершинников, кривизну округлой поверхности, форму вершинников и т. д.

В начальных стадиях растворения шарика при условии достаточно больших значений векторов типа *I* наблюдается притупление участков, отвечающих положениям граней кристалла, и фотографии растворяющегося шарика на первых этапах растворения похожи на фотографии регенерируемого шарика. Но в дальнейшем, после того как в достаточной степени проявятся радиальные направления растворения, появляются ребра, и фотографии растворяющегося кристаллического шарика приобретают свой характерный вид (подобный изображенному на рис. 29). Стационарная форма растворения (рис. 31) на шарике появляется через непродолжительное время (от нескольких минут до 1—2 ч, в зависимости от недосыщения, причем при больших недосыщениях стационарная форма устанавливается быстрее).

Процесс растворения ограненного кристалла несколько отличается от растворения шарика, поскольку на кристалле имеется ограниченный набор ориентаций (остальные ориентации заложены в ребрах и вершинах). Для примера рассмотрим случай, когда диаграмма обратных скоростей растворения для данных условий будет такой, как показано на рис. 30, *a*, *I*, а исходная форма кристалла — *ABC*. Так как на исходном теле нет поверхностей другой ориентации, кроме граней, то на первых этапах проявляются только тангенциальные направления растворения. Слои будут перемещаться от ребер и вершин к центру граней. На ребрах и вершинах возникнут закругления и появятся точки новых ориентаций (рис. 30, *a*, *II*). Сразу же начнут проявляться тангенциальные направления растворения для той грани, которая имеет максимум на построенной диаграмме. На теле растворения появится новая грань (рис. 30, *a*, *III* и 30, *b*). Дальнейшая генерация слоев будет происходить от двух ребер. Если полярная диаграмма не имеет других ярко выраженных максимумов, то на части кристалла, изображенной на рис. 30, возникнут только три вершинника. Если же имеются другие максимумы на диаграмме, то появятся новые грани, притупляющие ребра, и новые вершинники, которые могут слиться в ребро на теле растворения. Таким же образом происходит образование граней на шарике в начальные этапы растворения. Из сказанного ясно, что для образования стационарной формы при растворении ограненного кристалла требуется гораздо больше времени, чем для шарика (до 20 ч при малых недосыщениях). Нетрудно заметить, что при растворении

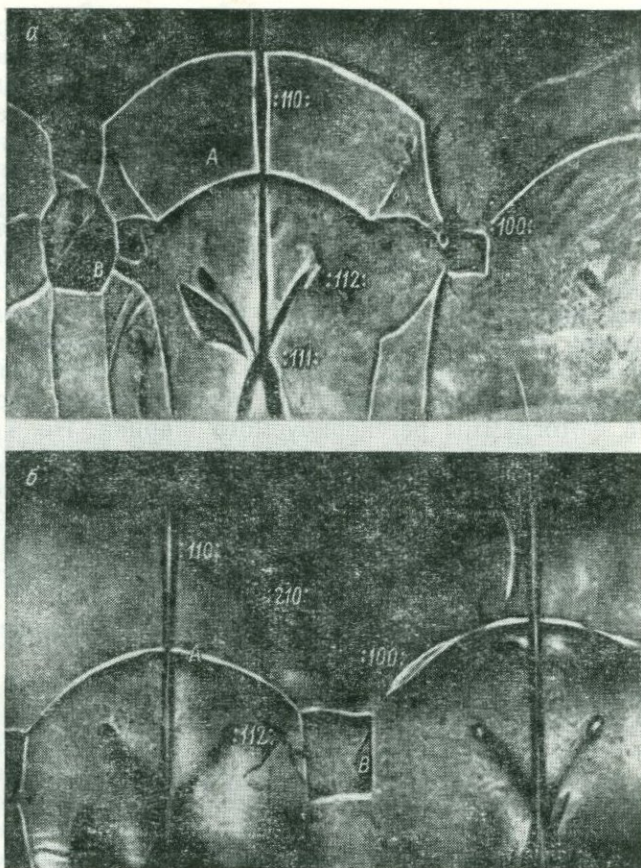


Рис. 29. Фотограммы с растворяющегося шарика из кристалла алюмокалиевых квасцов.

a — при $-\Delta c = 0,01$, 2 ч растворения; *b* — при $-\Delta c = 0,01$, 19 ч растворения; *A* — отрицательные, *B* — положительные формы рельефа.

действует закон complication, который при росте проявляется только с уменьшением пересыщения. При растворении этот закон осуществляется в последовательном проявлении простых форм растворения с более сложными символами. Поэтому формы растворения кристаллов дают возможность более надежно установить класс симметрии.

Растворение алюмокалиевых квасцов проводилось при недосыщениях, г/100 мл раствора: 0,005; 0,01; 0,02; 0,05; 0,1; 0,4; 1,5; 3; 6; 12; 13,8.

При недосыщениях в пределах от 0,1 до 13,8 (дистиллированная вода) тела растворения кристаллов квасцов представляют собой комбинацию форм растворения :100:, :111:, :110:, :112:, всей серии тригон-триоктаэдрических вершинников и серии вершинни-

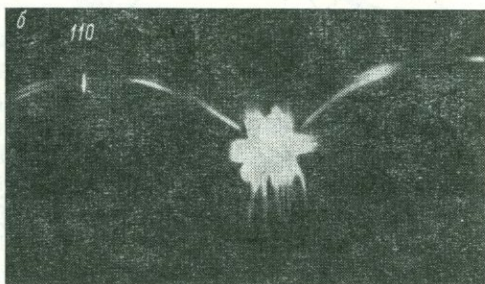
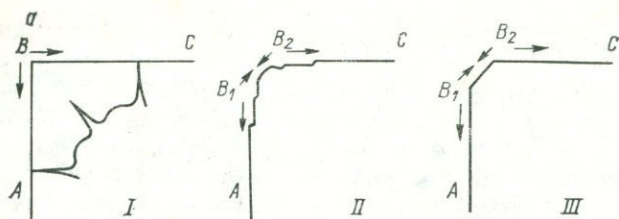


Рис. 30.

a — схема стадий (I—III) растворения ограненного кристалла;
б — фотограмма растворяющегося октаэдрического кристалла квасцов. Сигнал от грани ромбододекаэдра появился в процессе растворения.

ков (ребром), заключенных между $:111:$ и $:112:$ (рис. 31). Форма $:210:$ проявляется нечетко. При недосыщении, меньшем 0,1, на телах растворения отсутствует ребро $:111:—:112:$; вершинники $:210:$ выражены хорошо.

Характер округлой поверхности растворяющегося шарика при малых недосыщениях (доли грамма на 100 мл раствора) меняется незначительно. Только в районе зон тригон-триоктаэдров иногда наблюдаются выположенные участки этой поверхности. При недосыщении 3 и более на шарике начинают появляться неправильной формы впадины, приуроченные главным образом к участкам округлых поверхностей. В процессе растворения ограненных кристаллов ямки травления, первоначально присутствующие на

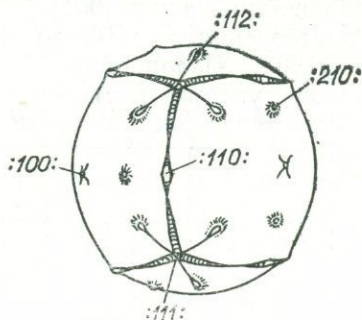


Рис. 31. Тело растворения шарика алюмокалевых квасцов при $-\Delta c=3$.

В двоеточиях показаны символы вершинников растворения.

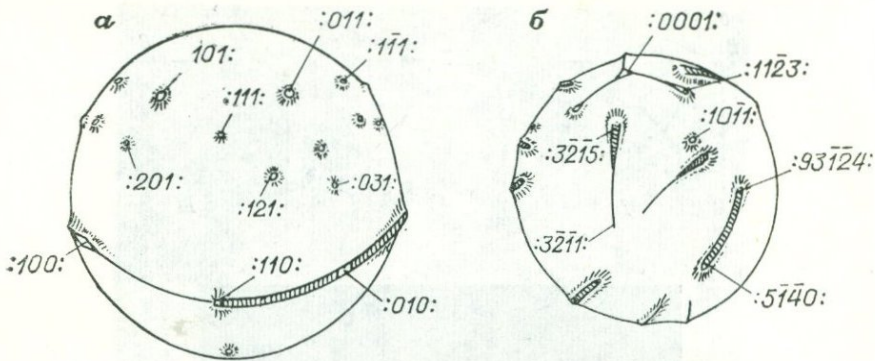


Рис. 32. Тела растворения шариков, выточенных из кристаллов эпсомита (а) и натриевой селитры (б).

Символы вершинников растворения показаны в двоеточиях.

гранях, постепенно уничтожаются двигающимися с ребер слоями и кристалл приобретает округлый вид. При растворении кристалла, представляющего комбинацию форм $\{111\}$, $\{100\}$ и $\{110\}$, при недосыщении более 3 наблюдается образование вогнутых участков округлых поверхностей на местах бывших граней роста исходного тела.

Кристаллы и шарики семиводного сульфата магния (симметрия 222) растворяли при недосыщениях 0,005; 0,05; 0,5; 5,45 и 121,5. Последнее значение недосыщения отвечает дистиллированной воде при 25°C. Кристаллы представляли собой комбинацию форм $\{110\}$, $\{111\}$, $\{010\}$ и редко $\{100\}$. Шарики растворяли до получения стационарной формы. На начальной стадии растворения на шариках появлялись притупления (площадки) в местах, соответствующих выходам нормалей к граням роста (рис. 32, а). При последующем растворении на месте притупленных участков шариков начинают формироваться изолированные вершинники, аналогичные вершинникам на квасцах.

Тело растворения шарика, выточенного из кристалла эпсомита, при левой модификации представляет собой комбинацию изолированных вершинников $:1\bar{1}1:$, $:1\bar{2}1:$, $:2\bar{1}1:$, $:2\bar{2}1:$, $:111:$, $:100:$, $:010:$, $:110:$, $:121:$, $:101:$, $:201:$, $:011:$, $:021:$ и $:031:$. Кроме того, присутствуют вершинники зоны $[001]$, образующие притупленное ребро на теле растворения от $:110:$ до $:010:$ и непритупленное ребро от $:110:$ до $:100:$. Изолированные вершинники характеризуются усредненными углами раствора, показывающими исключенные с поверхности тела кристалла ориентации:

Недосыщение, г/100 мл раствора	$:100:$	$:010:$	$:110:$	$:011:$	$:111:$	$:111:$
0,05	2°15'	3°05'	4°03'	3°40'	4°02'	4°08'
5	3 30	4 10	5 30	1 11	4 15	3 42
45	2 58	3 15	3 19	3 32	5 08	4 00

По приведенным данным видно, что углы растворов вершинников эпсомита от недосыщения не зависят.

Вершинники различных ориентаций эпсомита имеют свои особенности. Тетраэдры и призмы зон $[100]$ и $[010]$ представляют собой, как правило, слабо приподнятые конусовидные образования с хорошо выраженными площадками. Уплощенные участки $\{011\}$ и $\{101\}$ при недосыщениях порядка 0,005 часто достигают на поверхности шарика значительных размеров (0,8—1,2 мм в диаметре). При повышении недосыщения размеры уплощений резко сокращаются. Изолированность вершинников проявляется неодинаково по различным направлениям. Вершинники $:011:$ и $:101:$ в сторону оси $[001]$ имеют, например, больший диапазон исключенных ориентаций, чем со стороны осей $[100]$ и $[010]$. Со стороны последних направлений края уплощенного участка вершинники $:011:$ и $:101:$ часто выражены нерезко и сопрягаются с округлой поверхностью тела растворения. При растворении кристаллов эпсомита влияние их неоднородностей на форму образующихся вершинников проявляется достаточно сильно, что выражается в различных величинах углов раствора у вершинников одной формы и в различном характере уплощенного участка. Непрерывное ребро, образованное вершинниками зоны $[001]$, сложено притупленными вершинниками от $:110:$ до $:010:$ и непритупленными в остальной части, за исключением самого вершинника $:100:$ и прилегающих к нему участков в интервале $2-4^\circ$ в обе стороны. Вершинник $:110:$ является границей между притупленной и непритупленной частями ребра и обладает дополнительными ребрами, направленными в стороны $:111:$ и $:1\bar{1}1:$. Эти ребра представляют собой комбинацию изолированных непритупленных вершинников тетраэдров, близких по положению к $:110:$ (не более $2-4^\circ$ от $:110:$). Различный характер ребра зоны $[001]$ в области первого и второго пинакоидов наряду с развитием зон $[100]$ и $[010]$ и положительных и отрицательных тетраэдров позволяет без труда различать правые и левые формы по телам растворения (по количеству положительных и отрицательных тетраэдров).

Растворение ограненных кристаллов эпсомита согласуется с приведенной ранее схемой. На закругляющихся ребрах и вершинах появляются уплощенные участки, отвечающие реальным формам роста эпсомита, которые впоследствии преобразуются в вершинники. При увеличении степени недосыщения резко усиливается интенсивность растворения по направлениям, радиальным к поверхности кристаллического тела, идет образование обычных вершинников растворения. При недосыщениях выше 0,05 в силу резко увеличивающегося растворения по радиальным направлениям по краям граней $\{1\bar{1}1\}$ и $\{110\}$ образуются углубленные участки.

Опыты по растворению шариков, приготовленных из кристаллов натриевой селитры, не носили систематического характера и

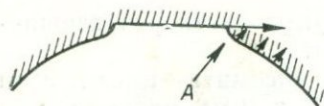


Рис. 33. Схема образования грани отрицательного кристалла.

Стрелками показано направление растворения, а буквой А отмечен бортик, имеющий место при росте положительного кристалла.

проводились с целью изучения только формы растворения вещества. Растворение проходило в чистом водном растворе соли при 25°C . За 24 ч кристалл потерял 0,5 г, что составляет $0,008 \text{ г}\cdot\text{ч}/\text{см}^2$ при диаметре шарика 9 мм. Симметрия тела растворения (рис. 32, б) отвечает группе 32, а не $3m$. Такая картина растворения полностью соответствует данным, полученным при регенерации шариков этого вещества [Войцеховский В. Н., 1966 г.]. Отметим некоторые особенности вершинников кристаллов селитры. Участок ребра, сложенного серией вершинников трапецоэдров от $:3215:$ до $:3\bar{2}13:$, имеет хорошо выраженное притупление с заметной штриховкой. На этом участке угол раствора ребра составляет $10\text{--}11^{\circ}$. В остальной части ребро не имеет притуплений, и угол раствора равен $4\text{--}7^{\circ}$. Подобное строение и у ребра, сложенного «трапецоэдрами»: $11\ 2\ \bar{1}3\ 9\text{---}14\ 7\ \bar{7}\ 6:$.

Понижение симметрии тел растворения наблюдается не только у натриевой селитры. Плоскости симметрии исчезают и на телах растворения кристаллов KN_2PO_4 (KDP), которые в результате приобретают симметрии $\bar{4}$ вместо $42m$. Причины подобной гипоморфии (термин В. Клебера) следует искать, по нашему мнению, в особенностях структуры растворителей.

Рост отрицательных кристаллов (растворение изнутри). Исследование роста отрицательного кристалла выявило полную аналогию этого процесса с растворением положительного кристалла. Грани растущего отрицательного кристалла представляют собой разросшиеся вершинники растворяющегося положительного кристалла. Рост отрицательного кристалла можно рассматривать при помощи того же рис. 27 с той лишь разницей, что направления векторов нужно сменить на обратные. Образование граней отрицательного кристалла обуславливается соотношением значений векторов типа I с векторами соседних положений. Преобразование полусферической формы полости при росте отрицательного кристалла в ограниченную подтверждает высказанное положение. Грань отрицательного кристалла увеличивает свою площадь за счет большой тангенциальной скорости растворения (рис. 33). Как правило, при повышении недосыщения имеет место увеличение значений векторов соседних положений (увеличение радиальной скорости растворения), что приводит к уменьшению бортика А и к исчезновению четкой границы грани. В ряде случаев грань переходит в поверхность близкой ориентации. Дальнейшее увеличение недосыщения приводит к тому, что грани не появляются, а их места занимают поверхности близкой ориентации, имеющие округлые формы. Изменение характера границ для различных граней в зависимости от недосыщения показано в табл. 7 и доста-

ТАБЛИЦА 7

Характер границ граней отрицательных кристаллов квасцов при различных недосыщениях $-\Delta c$, г/мл

Форма	0,005	0,01	0,05	0,1	0,4	1,5	3	6	12	13,8
{111}	++	++	++	++	++	++	++	++	+	+
{100}	++	++	++	++	++	++	++	++	+	+
{110}	++	++	++	++	++	++	++	++	+	+
{112}	++	++	++	++	++	++	+	+	+	-
{122}	++	++	++	++	++	++	+	+	-	-
{210}	++	++	++	++	++	+	-	-	-	-

Характер границ граней отрицательных кристаллов эпсомита при различных недосыщениях $-\Delta c$, г/мл

Форма	0,05	0,5	5	45	121,5
{110}	++	++	++	++	++
{010}	++	++	++	++	++
{111}	++	++	++	++	+
{ $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ }	++	++	+	-	-
{101}	++	++	++	++	-
{100}	++	++	+	+	-
{011}	++	++	+	-	-
{021}	++	-	+	-	-
{221}	++	+	-	-	-
{021}	++	-	-	-	-
{031}	++	-	-	-	-

Примечание. ++ четкая граница, + нечеткая граница, - грань отсутствует.

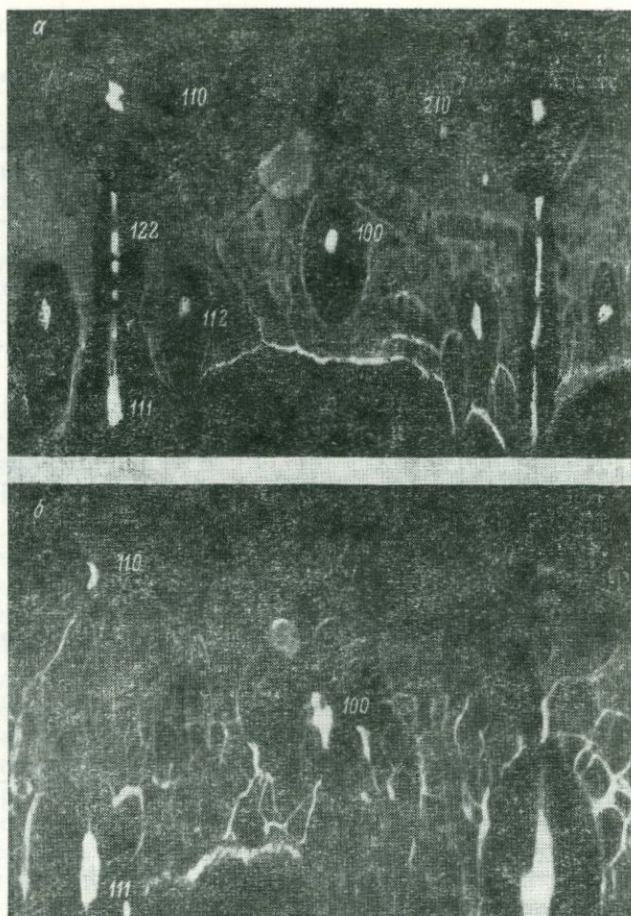


Рис. 34. Фотограммы реплик с отрицательного кристалла квасцов.

a — при $-\Delta c = 0,4$, 1 ч, четкие границы черных полей вокруг рефлексов от граней соответствуют четким границам граней; *b* — при $-\Delta c = 13,8$, 6 мин, границы граней нечеткие.

точно хорошо видно на фотограммах, полученных с реплик отрицательных кристаллов (рис. 34). Отметим, что отсутствие граней $\{210\}$ на отрицательном кристалле квасцов при недосыщении более 4 соответствует неясному проявлению вершинника $\{210\}$ на растворяющемся шарике при тех же недосыщениях. При недосыщениях 1,5 и более растворение полости идет главным образом по радиальным направлениям, и полость полностью не ограничивается.

Максимально ограниченную полость можно получить только при низких недосыщениях. При недосыщении 0,1 в течение 8 ч до полного ограничения полость в квасцах покрыта формами $\{111\}$, $\{100\}$, $\{110\}$, $\{112\}$, $\{122\}$ и $\{210\}$. В период следующих 24 ч

растворения огранка отрицательного кристалла упрощается, и остаются формы $\{111\}$, $\{100\}$ и $\{110\}$. Таким образом, на первых этапах растворения грани образуются преимущественно за счет тангенциального растворения. Но после пересечения граней в ребрах нормальные скорости растворения менее важных граней возрастают. По-видимому, это можно объяснить тем, что при огранении полости увеличение площади граней обусловлено преобладанием векторов типа I над векторами соседних положений. После огранения полости начинают конкурировать векторы типа I различных граней. Грань с меньшим вектором типа I увеличивает нормальную скорость растворения. Нормальная скорость растворения какой-либо грани зависит от соотношения векторов типа I для данной и соседней граней. По этой причине еще до полной огранки исчезают все тригон-триоктаэдры, кроме $\{122\}$.

Отрицательный кристалл эпсомита представляет собой как бы энантиоморфную форму по отношению к положительному кристаллу (рис. 16, б). Растворение шарообразных полостей, выточенных в этих кристаллах, проводилось при тех же недосыщениях, что и растворение положительных кристаллов. Полости вытачивались на гранях $\{\bar{1}\bar{1}\}$. Кристаллы устанавливались на кристаллоносце так, чтобы полость встречала поток раствора. Результаты опытов показали те же закономерности, что и при растворении полостей, выточенных в кристаллах квасцов. Увеличение площади грани отрицательного кристалла идет за счет интенсивного тангенциального растворения. Вследствие этого у грани образуется бортик.

При увеличении недосыщения увеличивается интенсивность растворения по направлениям, нормальным к поверхности полости, ухудшается четкость границы грани. При сильных недосыщениях плоская грань на растворяющейся полости вообще не появляется. Она заменяется округлой поверхностью близкой ориентации, что указывает на преобладание процессов растворения, нормальных к поверхности. Наоборот, при уменьшении недосыщения растворение происходит главным образом за счет тангенциально направленных процессов, и граница грани выражена четко. На отрицательных кристаллах эпсомита наблюдались грани $\{111\}$, $\{121\}$, $\{211\}$, $\{221\}$, $\{1\bar{1}\bar{1}\}$, $\{1\bar{2}\bar{1}\}$, $\{101\}$, $\{201\}$, $\{011\}$, $\{021\}$, $\{031\}$, $\{100\}$, $\{110\}$, $\{010\}$ и пояс призм зоны $[001]$, заключенных между вторым пинакоидом и призмой $\{110\}$. Четкость границ различных граней отрицательного кристалла эпсомита в зависимости от недосыщения — Δc показана в табл. 7.

Как и в случае роста отрицательных кристаллов квасцов, форсы, наиболее важные при огранении кристалла, устойчивы в более широком диапазоне недосыщений.

В участках, соответствующих зоне $[001]$, ориентации, которым при растворении положительного кристалла соответствуют притупленные вершинники (притупленное ребро), при росте отрицательного кристалла образуют непрерывную зону плоских граней,

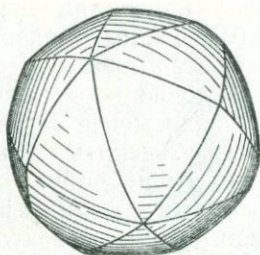


Рис. 35. Тело растворения шарика алюмокалиевых квасцов в виде тетрагексаэдра, полученного в растворе с уксуснокислым аммонием.

а ориентации, отвечающие непритупленному ребру, образуют пояс округлых граней, проявляющийся в виде несколько выположенного округлого участка растворяющейся полости. Здесь плоская грань — только первый пинакоид с более четкими границами граней в направлении $[001]$, чем на направлении к $[110]$.

Форма кристаллов при растворении в средах, не являющихся маточными. Шарик алюмокалиевых квасцов, выточенный из кристаллов, выращенных в чистых растворах, растворялись в уксуснокислом аммонии (100 мл дистиллированной воды на 40 г соли) при 18°C в течение 3 мин. Ребра их (рис. 35), сложенные вершинниками тригон-триоктаэдров, имеют слабые притупления у $:110:$, в то время как ребра, отвечающие положению тетрагон-триоктаэдров, притуплений не имеют. Нечетко выраженные притупления наблюдаются у вершинников $:111:$ и $:100:$. Углы растворов ребер, сложенных вершинниками $:hkk:$ возле $:100:$, достигают $5-6^\circ$. Угол раствора ребра, образованного вершинниками $:hhl:$, близки $:110:$ равен 18° , у $:112:$ — 9° и у $:111:$ — 7° .

Растворение шариков германия проводилось в травителе, состоящем из 5 мл концентрированной азотной кислоты, 3 мл плавиковой кислоты марки ЧДА и 92 мл ледяной уксусной кислоты. Растворение полусферы германия в таком травителе, согласно Р. Эллису [82], должно привести к конечной форме растворения — тетрагексаэдру. Однако небольшой объем растворителя и быстрое его истощение привели к конечной форме, представляющей собой гексаэдр (по определению Р. Эллиса). Полученная форма (кубоид) состоит из комбинаций вершинников $:hhl:$, образующих непритупленные ребра. Углы раствора вершинников различны. Они невелики возле $:110:$ и резко увеличиваются у $:111:$. Поверхность шарика около $:100:$ имеет ямки травления с округлыми краями, а около $:110:$ наблюдается область, сложенная мелкими бугорками травления, не дающая отблеска.

Растворение сферы в смеси, состоящей из 60 мл плавиковой кислоты той же концентрации и 40 мл перекиси водорода, в течение 1 ч 10 мин не привело к образованию плоскогранного ромбодекаэдра, как его называет Р. Эллис. Полученное тело растворения — комбинация непритупленных вершинников $:111:$, $:100:$ и серии $:hkk:$. Кроме того, наблюдаются вершинники $:110:$.

Растворение в полости кристалла квасцов в уксуснокислом аммонии производилось в тех же условиях, что и растворение

шарика. На отрицательном кристалле грани $\{111\}$ и $\{100\}$ плоские. Кроме того, присутствует серия округлых граней тетрагон-триоктаэдров и тригон-триоктаэдров, которые образуют выположенный участок на поверхности полости, соответствующий поясу $[110]$. Это подтверждает соответствие плоских граней отрицательного кристалла притупленным вершинникам на теле растворения положительного кристалла и округлых граней отрицательного кристалла непритупленным вершинникам на положительном кристалле.

Форма кристаллов в пересыщенных растворах. Влияние пересыщения раствора на процессы и форму роста положительных кристаллов изучалось путем регенерации выточенных из кристаллов шариков и выращивания из затравок.

Процесс регенерации шарика можно наблюдать на полярной диаграмме обратных скоростей растворения (рис. 27). При рассмотрении явлений роста кристаллов направления векторов нужно изменить на обратные. В участках, соответствующих положению реальных форм роста, будут проявляться тангенциальные направления, т. е. участок поверхности этой ориентации будет увеличивать свою площадь за счет интенсивного разрастания. Участки, не отвечающие положению реальной грани, должны проявлять главным образом радиальные направления роста.

Опыты с квасцами проводились при пересыщениях 0,005; 0,05; 0,1; 0,4; 1,5; 4; 6; 12. В первые этапы регенерации шариков их поверхности, не отвечающие положению реальных граней, становятся ячеистыми. Когда в этих местах поверхности появляются участки, ориентация которых соответствует реальным формам роста, возникает так называемая матировка поверхности. В местах выхода на поверхность шарика нормалей к реальным граням интенсивно проявляются тангенциальные направления роста, опережающие рост по радиальным направлениям в прилегающих областях. Растущая грань имеет выступающие над поверхностью шарика края, ограниченные торцами. Растущая на шарике грань в первые этапы регенерации по своей форме является как бы отпечатком грани отрицательного кристалла (рис. 33). Таким образом, вершинники на теле растворения являются ориентациями, соответствующими формам роста, так как в процессе регенерации площадь притупления вершинников, преобразующихся в растущую грань, увеличивается (рис. 36).

Устойчивость тех или иных граней зависит от соотношения тангенциальных векторов роста и радиальных векторов в близлежащих участках поверхности. Грани с простыми символами устойчивы в сильно пересыщенных растворах, а грани со сложными символами — при малых пересыщениях. В области очень малых пересыщений (0,005) грани $\{111\}$ и $\{100\}$ практически отсутствуют. На их месте возникают кривогранные и «чешуйчатые» поверхности близкой ориентации.

В начальные стадии регенерации шарика из кристалла квасцов при пересыщении до 0,4 уплощенный участок вершинника $\{111\}$ увеличивает свою площадь и превращается в грань. Анало-

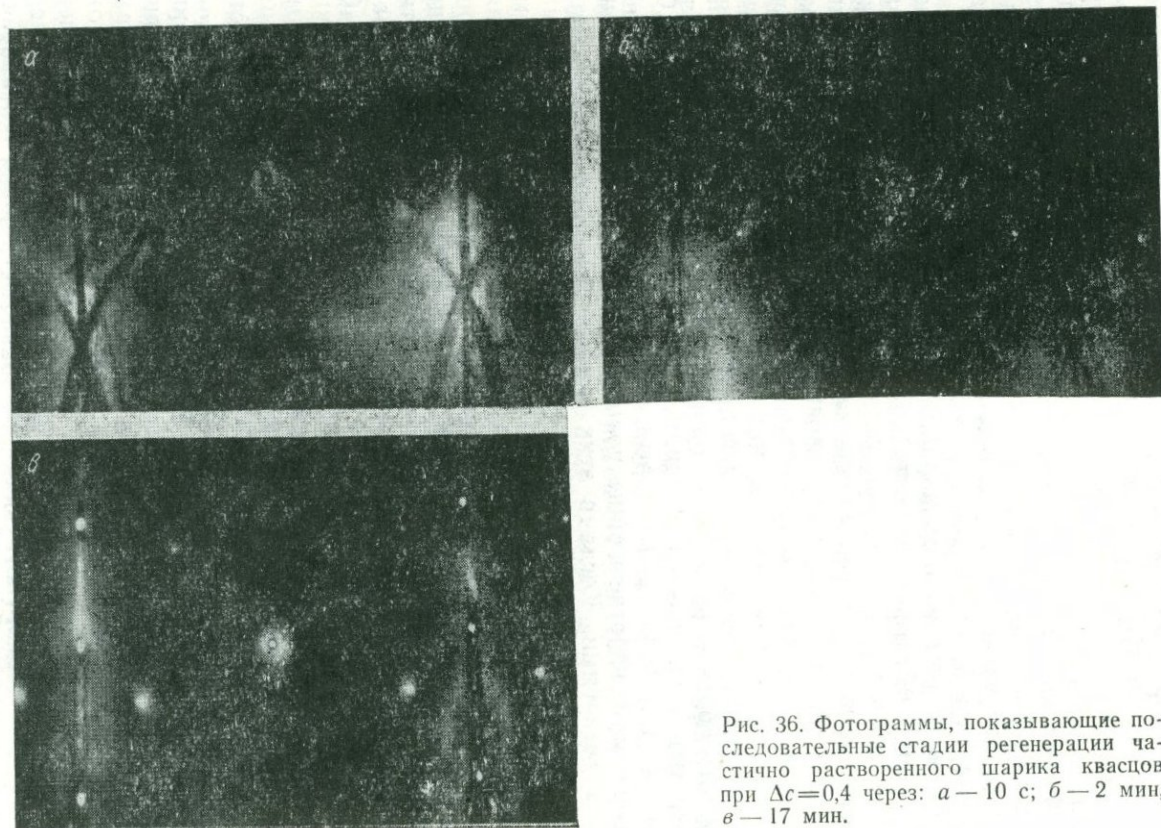


Рис. 36. Фотограммы, показывающие последовательные стадии регенерации частично растворенного шарика квасцов при $\Delta c = 0,4$ через: *a* — 10 с; *б* — 2 мин, *в* — 17 мин.

гичное происходит и с вершинниками тригон-триоктаэдров, слагающих притупленное ребро от $:111:$ до $:110:$. На месте непритупленных ребер вершинника $:111:$ возникают округлые грани тетрагон-триоктаэдров с полярным расстоянием, не превышающим $3-6^\circ$ при юстировке по $[111]$. Следовательно, при регенерации шариков непритупленным ребрам на теле растворения соответствуют округлые грани роста.

У ограненного кристалла скорость нормального нарастания граней зависит от того, какими реберными формами ограничена эта грань. Известно, что винтовые дислокации являются постоянно действующим источником ступеней роста на грани кристалла. Обычно на грани (111) присутствуют одна-две трехгранные вицинальные пирамиды. Если кристалл вынуть из раствора и протереть его грань фильтровальной бумагой, то число вициналей при дальнейшем росте сильно увеличивается. Кажется бы, что скорость нормального нарастания грани (111) должна заметно возрасти, а облик кристалла должен усложниться за счет понижения анизотропии скоростей роста. На самом деле наблюдается обратная картина. Кристалл после такой операции из комбинации $\{111\}$, $\{110\}$ и $\{100\}$ становится чисто октаэдрическим. Грани $\{110\}$ и $\{100\}$ исчезают с образованием включений. На ребрах $(111):(110)$ и $(111):(100)$ образуются «козырьки», нависающие над гранями куба и ромбододекаэдра. Опыты показывают, что увеличение числа винтовых дислокаций не способствует значительному увеличению скорости нормального нарастания грани. Этот вывод согласуется с отмеченным П. Игли [81] фактом присутствия выходов винтовых дислокаций в основном на гранях с небольшими скоростями нарастания и с заключением Р. Кайшева и Д. Ненова [19] о сплюснутости по оси дислокации равновесной формы кристалла с винтовой дислокацией.

На рис. 37 приведена фотография кристалла алюмокалиевых квасцов, выращенных при $\Delta c = 0,4$. Фотографирование производилось на одну пластинку дважды: сначала при пересечении граней куба с гранями октаэдра (после выклинивания граней $\{112\}$), затем через 10 ч. Как видно, включение раствора в пирамиде роста куба образовалось после того, как грань куба пересеклась с $\{111\}$. Формирование включения обусловлено образованием слоев роста грани (100) на ребрах с гранями октаэдра,

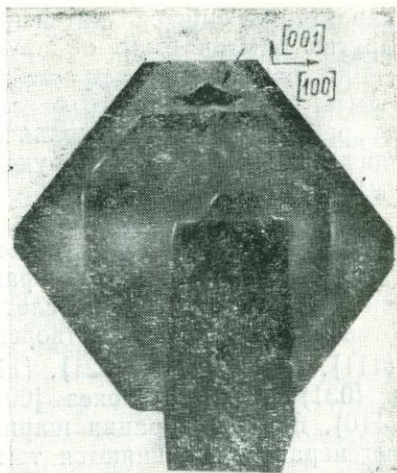


Рис. 37. Стадии роста шарика кристалла квасцов.

Стрелкой показано включение маточного раствора в пирамиде роста грани куба, появившееся после образования ребра $(001) : (111)$. $\times 10$.

характеризующихся интенсивным тангенциальным ростом. Из других опытов было обнаружено, что после пересечения (111): (100) нормальная скорость роста (100) возросла в 1,7 раза. Эти опыты показывают, что механизм и скорость роста грани зависят от реберных форм, ограничивающих грань, что подтверждает представление о генерирующей роли ребер [Витовский Б. В., 1949 г.].*

Формы роста кристаллов эпсомита изучались при пересыщениях 0,05; 0,5; 5; 15, а также в условиях, близких к точке насыщения (0,005). При регенерации кристаллических шариков эпсомита были установлены следующие гранные формы, полностью отвечающие формам растворения: {100}, {110}, {120}, {130}, {010}, {111}, {121}, {211}, {221}, {111}, {121}, {101}, {201}, {011}, {021} и {031}. Призмы пояса {001}, расположенные между {100} и {110}, при регенерации шариков отсутствуют. Начальные этапы регенерации подчиняются тем же закономерностям, что и этапы регенерации шариков квасцов. Округлые поверхности шариков образуют ячеистую поверхность, стенки которой в дальнейшем покрываются плоскими участками, становясь матовыми. В местах, отвечающих положению реальных форм, в начальные стадии регенерации проявляются преимущественно только тангенциальные направления роста. Грани увеличивают свою площадь и как бы приподнимаются над прилегающими участками, образуя торцы. Изучение показало, что в области больших пересыщений устойчивы грани с наиболее простыми символами, а при малых пересыщениях становятся устойчивыми грани и с более сложными символами. Та же закономерность отмечена при росте отрицательного кристалла. Регенерация шариков эпсомита подтвердила соответствие притупленных вершинников растворения плоскогранным формам роста, а непритупленных — округлым граням.

Для эпсомита наиболее развитая форма {110} не образует замкнутой фигуры и должна комбинироваться с гранями {111} либо {111}. Ребра (110):(111) являются источниками новых слоев роста на грани (111). При больших пересыщениях (5 и 15) скорость тангенциального разрастания грани (110) резко увеличивается и кристалл растет в виде трубки. При изменении пересыщения изменяются главным образом скорости тангенциального разрастания граней. Вблизи точки насыщения (0,005) на шарике эпсомита отсутствуют плоские грани {110} и другие грани пояса [001]. Грань (110) замещается кривогранной поверхностью, представляющей собой совокупность граней, положение которых отвечает форме вершинника растворения :110:. Кривогранная область представляет собой серию граней призмы и тетраэдров, близких к {110}. Отклонение их от {110} не превышает 4°. Грани, положе-

* Недавно при рентгенотопографическом исследовании процесса роста *in situ* было показано, что колебания скоростей роста граней, различная «генерирующая роль» граней обусловлены дислокациями [Чернов А. А., Смольский И. Л. и др., 1980 г.]. — *Ред.*

ние которых соответствует непритупленным ребрам вершинника растворения, округлые. Грани, отвечающие притупленному ребру зоны [001], плоские. Грани призм зоны [001], ориентация которых соответствует непритупленным вершинникам (непритупленное ребро между вершинником :110: и :100:), в данных условиях роста на шарике отсутствуют. Призмы зоны [001], расположенные между вершинниками :010: и :110: и отвечающие притупленному ребру, присутствуют на шарике в виде несколько более уплощенных вершинников, слагающих ребро. Остальные формы роста: $\{1\bar{1}1\}$, $\{121\}$, $\{2\bar{1}1\}$, $\{2\bar{2}\bar{1}\}$, $\{111\}$, $\{121\}$ и призмы зон [100] и [010] — присутствуют в виде плоских граней размером до 2—3 мм в диаметре. Кроме того, при таком пересыщении на шарике эпсомита наблюдается образование новых дополнительных зон округлых, нечетко выраженных граней. Одна из зон соответствует дополнительному ребру вершинника :110: и соединяет $\{1\bar{1}0\}$ с $\{1\bar{1}1\}$. Соответственно с симметрией кристалла зона, соединяющая $\{110\}$ с $\{111\}$, заметно себя не проявляет. Наблюдается также образование зоны округлых граней между $(1\bar{1}1)$ и $(1\bar{2}1)$. Подобную форму шарик эпсомита приобрел за 76 ч при суточном привесе, не превышающем 0,02 г.

Выводы. Проведенные исследования показывают соответствие между формами роста кристаллов и формами их растворения. По наличию или отсутствию притупления у вершинника на теле растворения можно судить о грани на теле роста: притупленному вершиннику (или ребру) соответствует плоская грань (или зона плоских граней), непритупленному вершиннику (или ребру) — искривленная поверхность близкой ориентации (или зона искривленных граней), которая присутствует или может присутствовать на теле роста кристалла. Эта взаимообусловленность соблюдается для форм роста положительных и отрицательных кристаллов. Комбинация простых форм растворения не зависит от исходной формы тела растворения. Простые гранные формы, которым соответствуют вершинники растворения сложной конфигурации, при определенных условиях роста могут замещаться кривограмными поверхностями, представляющими собой комбинацию форм, отвечающих данному вершиннику растворения (рис. 38). Знание этой взаимообусловленности позволяет предвидеть по формам растворения кристаллов формы их роста и наоборот.

Изучение тел растворения кристаллов квасцов, эпсомита, натриевой селитры, хлористого натрия, германия и молибдена показало, что возникающие на них ребра не являются результатом пересечения округлых поверхностей, а представляют собой самостоятельные образования, связанные с анизотропией скоростей растворения кристалла. Следовательно, ребра на теле растворения кристалла могут отсутствовать или образовывать замкнутую и незамкнутую сеть. Аналогично и вершины на теле растворения кристалла могут не являться следствием пересечения ребер, а также представлять самостоятельные образования. Поэтому при-

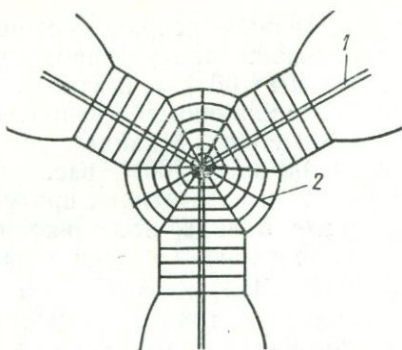


Рис. 38. Схема соотношения форм роста и растворения шарика алюмокалиевых квасцов в области октаэдра с притупленными (1) и неpritупленными (2) ребрами растворения.

Притупленным ребрам тела растворения соответствуют плоские грани, а неpritупленным — округлые поверхности.

вычные наименования округлых форм (октаэдронид, додекаэдронид и т. д.), для которых выполняется теорема Эйлера, хотя и удобны, но не характеризуют полностью тело растворения кристалла, в результате чего ряд их морфологических особенностей игнорируется. Проведенное исследование показало целесообразность введения понятий об ориентации криволинейных поверхностей. Идеальный кристаллический шар содержит все ориентации, которые представлены на поверхности точками. Это неизолированные ориентации, т. е. такие, которые без перерыва переходят в соседние. Поле зрения гониометра при наблюдении таких поверхностей не состоит из отдельных (дискретных) пятен, а равномерно освещено. Если ориентация переходит в соседние скачком (через темное поле на гониометре), назовем ее изолированной (например, изолированные вершинники). Тогда соседние с ней ориентации исключены с поверхности кристалла в ее изломах.

Поверхность цилиндра, вырезанного из кристалла, представляет собой совокупность линейных неизолированных ориентаций поверхности. Плоскостные ориентации — это плоские грани кристаллов. Они могут быть полностью изолированными (многогранник). В остальных случаях плоские грани могут постепенно переходить в округлые через линии сопряжения.

Ориентации поверхности кристаллического шарика, соответствующие резко выраженным изолированным максимумам на полярной диаграмме (рис. 27), характеризуются по меньшей мере двумя тангенциальными векторами, которые показывают перемещение ориентации при процессах роста (растворения). Такие ориентации при росте и растворении проявляют себя в виде плоского участка. Если на полярной диаграмме имеется резко выраженный неизолированный максимум, то отвечающие ему ориентации будут характеризоваться только одним тангенциальным вектором. Каждая ориентация здесь будет представлена линией. Если ориентация не отвечает резко выраженным максимумам на полярных диаграммах обратных скоростей роста (растворения), то они не характеризуются тангенциальными векторами. Эти ориентации характеризуются только нормальным вектором. Подобная трактовка ориентаций аналогична граням F , S и K по

Рис. 39. Тело растворения шарика эпсомита и некоторые сечения полярной диаграммы скоростей роста (растворения).

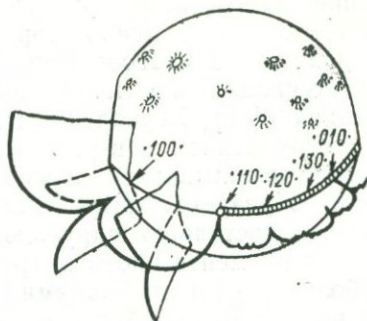


Рис. 40.

а — фигуры медленного растворения (штриховка) поверхности куба каменной соли, сложенные формами {023}; б — бугорки медленного роста на грани октаэдра кварцов, образующие «штриховку». $\times 10$.

П. Хартману [87], но, увязанная с полярными диаграммами, она позволяет по формам растворения строить качественную и, возможно, количественную картину полярной диаграммы в объеме. Пример качественного построения полярной диаграммы по морфологии тела растворения эпсомита показан на рис. 39.

Рассматривая систему кристалл—раствор при постоянных температуре и давлении, но при различных концентрациях раствора, приходим к выводу, что в недосыщенных растворах поверхность кристалла образована максимально возможным числом ориентаций. Ориентации с простыми символами сводятся к минимуму. При переходе в область пересыщенных растворов на кристалле остаются только грани форм роста, число которых при увеличении степени пересыщения уменьшается. Остальные грани исключаются в ребрах и вершинах. Иначе говоря, в пересыщенных растворах кристалл покрывается плоскостями с простыми символами, а в недосыщенных — поверхность кристалла покрыта в основном ориентациями со сложными символами.

На основании проведенных исследований можно расширить понятие о регенерации* и распространить его на процессы

* Регенерации кристаллов посвящена недавно вышедшая монография А. М. Асхабова [4].— *Ред.*

растворения. Регенерация кристаллов — это процесс превращения кристаллического тела любой формы в стационарную для данных условий. Одним из способов приспособления поверхности кристалла к изменившимся условиям является образование штриховки на его гранях ([89]; Вернадский В. И. [1907 г.]), которую иногда называют огрублением поверхности. Если плоская грань не отвечает условию минимальной поверхности энергии в данной среде, то на ней образуется штриховка, сложенная гранями, более отвечающими состоянию окружающей среды. При повышении пересыщения на менее плотных гранях возникает штриховка, сложенная более плотными гранями. При понижении концентрации раствора на более плотных гранях образуется штриховка, сложенная менее плотными гранями (рис. 40).

МОРФОЛОГИЯ ВЕРШИННИКОВ И ИХ СВЯЗЬ С ФИГУРАМИ РОСТА И ТРАВЛЕНИЯ *

В предыдущем разделе были рассмотрены тела растворения кристаллов, для описания которых использовались вершинники растворения. Здесь мы остановимся более детально на форме самих вершинников.

Конусовидные возвышения на телах растворения, названные вершинниками, могут иметь различные формы в зависимости от приуроченности вершинника к тому или иному участку поверхности, т. е. в зависимости от симметрии этого участка.

Сечения вершинников могут отвечать пяти примитивным контурам (с. 53) или их комбинациям. Форма самого вершинника может быть описана примитивными надстройками этих контуров или их комбинациями. Симметрия вершинника также может отвечать симметрии участка поверхности, к которому он приурочен, или быть более высокой или более низкой.

Остановимся на трех примерах. Вершинник :100: квасцов отвечает по симметрии группам $2m$, $4m$ или близок к o (рис. 41). Как видно из рис. 41, сечение вершинника с симметрией $4m$ отвечает примитивному контуру с линиями положительной или отрицательной кривизны и положительными изломами. Поверхность вершинника (надстройка контура) образована комбинацией плоской крыши с четырьмя пересекающимися по ребрам коническими поверхностями. Поверхность вершинника с симметрией $2m$ также образована коническими поверхностями с плоской крышей. Вершинник :112: квасцов (рис. 41) близок по симметрии к m , т. е. показывает несколько завышенную симметрию по сравнению с той, которая должна быть для класса симметрии квасцов ($m\bar{3}$). Вершинник :111: является комбинационным и состоит из притупленных и непритупленных ребер и плоской грани октаэдра. Сечение такого вершинника состоит из линий отрица-

* [Войцеховский В. Н., Мокиевский В. А., 1966 г.; Войцеховский В. Н., Дольво-Добровольская Г. И., Мокиевский В. А., 1966 г.]

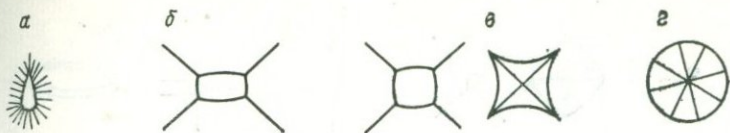


Рис. 41. Вершинники :112: (а) и :100: (б—г) кристаллов алюмокальневых квасцов с симметрией m (а), $2mm$ (б), $4mm$ (в) и ∞m (г).

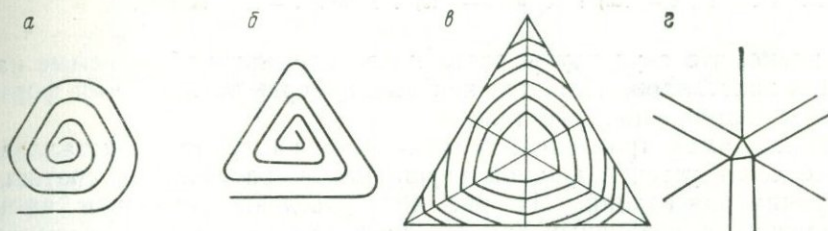


Рис. 42. Участки поверхности растущей (а, б) и растворяющейся (в) грани (111) квасцов.

У вершинника :111: (г) двойной линией показаны притупленные ребра, а одинарной — непритупленные. Зарисовка по фотографии.

тельной и положительной кривизны, прямых линий и точек излома.

Отмеченное выше соответствие притупленных вершинников растворения плоским граням роста и непритупленных вершинников — округлым «граням» прослеживается также на спиральях роста и ямках травления. На рис. 42, а приведена спираль роста на грани (111) квасцов при пересыщении 0,4 г/100 мл раствора. Спираль состоит из прямолинейных и чередующихся с ними округлых участков ступеней. При большем пересыщении величина округлых участков уменьшается (рис. 42, б). Прямолинейные торцы слоев спирали отвечают по своему положению ориентациям тригон-триоктаэдров и соответствуют притупленному ребру вершинника :111: (рис. 42, г) на теле растворения. Округлые торцы слоев по своему положению соответствуют непритупленному ребру вершинника :111:. В начальные стадии медленного растворения на грани (111) кристалла квасцов наблюдается скульптура, изображенная на рис. 42, в. В плане эта скульптура состоит из подобных друг другу дитригонов с округлыми сторонами. Вершины этих дитригонов расположены на ребрах вершинника :111:. Отметим, что ребра этого вершинника сложены вершинниками :hkk: и :hhl:, отклоняющимися от ориентации октаэдра не более чем на 5—6°. Поэтому в начальных стадиях растворения, когда кривизна округлой поверхности невелика, наблюдаемые ребра растворения могут доходить до вершин и ребер исходного кристалла. На конечном теле растворения ребра, состоящие из вершинников :hkk:, обрываются на :112:. Из сравнения рис. 42, а

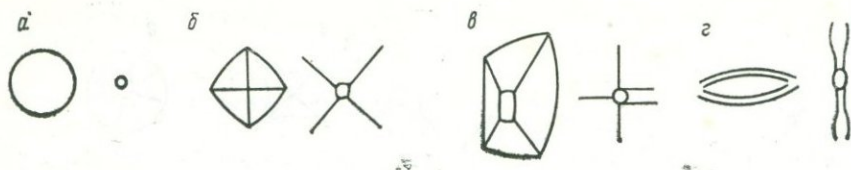


Рис. 43. Ямки травления (левая часть каждой зарисовки по фотографии) и соответствующие им вершинники растворения (правые зарисовки) положительных кристаллов.

a — $\{111\}$ эпсомита; *б* — $\{100\}$ kwasцов; *в* — $\{110\}$ эпсомита; *г* — $\{110\}$ kwasцов.

и *в* видно, что скульптуры роста и растворения, наблюдаемые на гранях кристаллов, являются как бы двумерными моделями форм роста и растворения кристаллов.

Форма ямок травления, возникающих на гранях кристаллов, также согласуется с формой вершинников растворения соответствующих ориентаций. На рис. 43 приведены зарисовки ямок травления на различных гранях кристаллов kwasцов и эпсомита и зарисовки соответствующих вершинников растворения. Точечному вершиннику соответствует округлая форма ямки травления (рис. 43, *a*). Ямка в виде округлой четырехугольной пирамидки на грани куба kwasцов (рис. 43, *б*) отвечает форме вершинника $\{100\}$. Округлые грани, образующие ямку, отвечают формам, вершинники которых слагают непритупленные ребра вершинника $\{100\}$. Плоские грани на ямках травления призмы $\{110\}$ эпсомита (рис. 43, *в*) отвечают формам, слагающим притупленное ребро вершинника $\{110\}$. Искривленные грани отвечают непритупленным ребрам этого вершинника. Подобное соответствие наблюдается при образовании ямок на грани октаэдра kwasцов. Отсутствие во многих случаях округлых «граней» тетрагон-триоктаэдров у этих ямок травления обусловлено их выклиниванием за счет расширения плоских граней тригон-триоктаэдров. Округлые «грани» удлиненной ямки травления на $\{110\}$ kwasцов также соответствуют слабо притупленным вершинникам тригон-триоктаэдров, слагающих соседние с $\{110\}$ участки ребра (рис. 43, *г*). Подобная закономерность соблюдается и для ямок травления на грани $\{221\}$ kwasцов.

Отмеченное соответствие формы ямки травления форме вершинника растворения позволяет построить ямку травления исходя из формы соответствующего вершинника (и наоборот) по правилу построения отрицательного кристалла. Необходимо указать, что такое соответствие соблюдается только при растворении в травителях одного состава. При смене травителя изменение формы ямки травления соответствует изменению вершинника растворения.

Анализируя формы ямок травления на различных гранях кристалла, можно судить об общем виде тела растворения. Такое исследование будет тем детальнее, чем больше число граней, для которых известны формы ямок травления. Например, судя по фигурам травления на гранях $\{111\}$, $\{100\}$ и $\{110\}$ куприта [98],

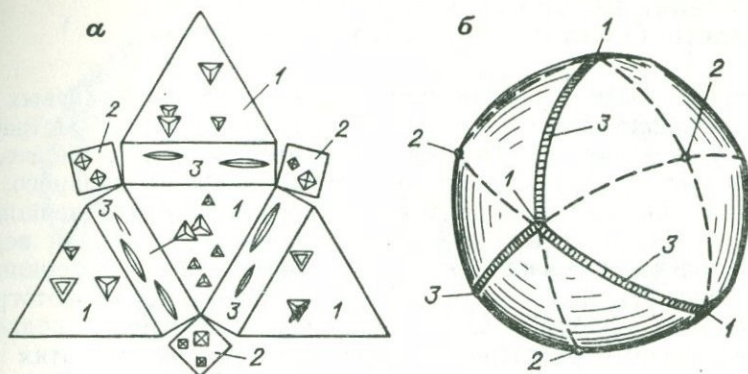


Рис. 44.

а — ямки травления на гранях октаэдра (1), куба (2) и ромбододекаэдра (3) кристаллов куприта; *б* — предполагаемый вид растворяющегося в сходных условиях шарика, выточенного из кристалла этого минерала. Цифрами обозначены изолированные вершинники: 1 — :111, 2 — :100, 3 — :110.

можно предположить, что на теле растворения будут присутствовать ребра и вершинники (рис. 44). Штриховые ребра на теле растворения достоверны в том случае, если ямки травления шестиугольные. Так, например, на кристаллах квасцов ямки травления на гранях {111} имеют обычно треугольную форму, сложенную плоскими гранями тригон-триоктаэдров. Но встречаются и округлые «границы» тетрагон-триоктаэдров, соответствующие непритупленным ребрам вершинника :111:. Эти грани наблюдаются в ямках травления значительно реже, так как обычно быстро вытесняются разрастающимися плоскими гранями тригон-триоктаэдров. Аналогичные предсказания формы тела растворения по фигурам травления можно сделать и относительно других кристаллов, в том числе и алмаза. Присутствие на октаэдрических гранях алмаза треугольных и шестиугольных ямок травления и четырехугольных — на гранях куба хорошо увязывается с формой округлых кристаллов алмаза, получивших название «додекаэдроидов».

В атласе книги А. Е. Ферсмана «Кристаллография алмаза» [46] можно найти среди гномонических проекций округлых кристаллов множество примеров вершинников различной формы. Среди них имеются вершинники притупленные и непритупленные, притупленные вершинники, слагающие притупленные ребра, и многое другое. Так, например, фиг. 5 из этого атласа изображает гномоническую проекцию додекаэдроида с непритупленными вершинами и ребрами, фиг. 6 — тот же додекаэдроид, но с притупленными ребрами и вершинниками :100: и :111:. Хотя кристалл № 14 в атласе не похож на додекаэдроид, но между тем его гномоническая проекция (фиг. 42) показывает, что этот кристалл близок к додекаэдроиду с притупленными ребрами и притупленными вершинниками :100: и :111:. Из проекции можно установить и формы сечений указанных вершинников.

ПРОЯВЛЕНИЕ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ КРИСТАЛЛА ПРИ РАСТВОРЕНИИ И ОБЕЗВОЖИВАНИИ *

При медленном растворении кристаллов алюмокалиевых квасцов (выращенных из соли марки ЧДА) в маточном растворе на теле растворения образуются положительные и отрицательные формы рельефа, не связанные с анизотропией идеального кристалла. Положительные формы располагаются около вершинника куба, а отрицательные (в виде канав) протягиваются от вершинника куба через вершинник ромбододекаэдра снова к вершиннику куба (рис. 45, I). Эти образования хорошо видны на фотограмме ограненного кристалла или кристаллического шарика, подвергнутого частичному растворению (рис. 29). Положение этих форм рельефа кристаллографически не строго определенное. В процессе растворения они как бы перемещаются по поверхности кристалла, сохраняя, однако, общую закономерность в своем расположении. Глубина отрицательных форм рельефа колеблется от 4,5 до 4,7 мкм, а высота положительных форм $\sim 2,8$ мкм. С увеличением недосыщения четкость этих образований уменьшается, и при недосыщениях, больших 0,02 г/100 мл раствора, они исчезают. Аналогичные образования наблюдаются на подвергнутого частичному растворению кристаллах семиводного сульфата магния (эпсомита), выращенных из раствора с примесью 0,06 % буры от массы растворенной соли (рис. 45, II). На этих кристаллах отмеченные формы рельефа поверхности присутствуют даже при больших недосыщениях раствора, причем четкость их также уменьшается по мере увеличения недосыщения. При недосыщении 40 г/100 мл раствора они отсутствуют.

При частичном обезвоживании на поверхности шлифованных шариков, изготовленных из кристаллов эпсомита, образуются узоры, обусловленные различной степенью обезвоживания (рис. 46, а). Фигура, соответствующая черной области, равна по величине, конфигурации и положению отрицательной форме рельефа, получающейся при частичном растворении этого же шарика (рис. 45, II). При медленном обезвоживании ограненных кристаллов семиводных сульфатов магния и никеля наименьшая скорость обезвоживания наблюдается на гранях тетраэдра $\{1\bar{1}\}$ (рис. 46, б).

Образование описанных форм рельефа на растворяющихся кристаллах и фигур обезвоживания обуславливается различными скоростями растворения и обезвоживания пирамид роста граней разных форм, что доказывается их морфологией. В самом деле, очертания положительных и отрицательных форм рельефа на телах растворения и узоры обезвоживания могут быть поняты, если рассмотреть пересечение пирамид роста с поверхностью шарика (рис. 47, а). Для доказательства высказанных положений были выращены кристаллы тех же веществ, но в других усло-

* [Войцеховский В. Н., Моклевский В. А., 1965 г.]

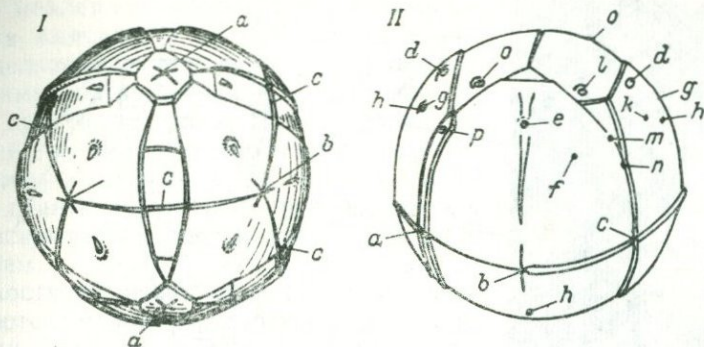


Рис. 45. Положительные и отрицательные формы рельефа на шариках квасцов (I) и эпсомита (II).

Вершинники растворения на квасцах: $a - :100$, $b - :111$, $c - :110$; на эпсомите: $a - :100$, $b - :110$, $c - :010$, $d - :111$, $e - :111$, $f - :121$, $g - :211$, $h - :221$, $k - :121$, $l - :011$, $m - :021$, $n - :031$, $o - :101$, $p - :201$.

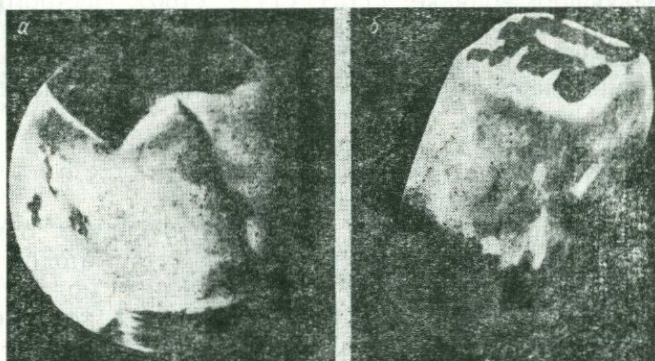


Рис. 46. Поверхность шарика (а) и ограненного кристалла (б) эпсомита, подвергнутых частичному обезвоживанию.

виях: кристаллы семиводного сульфата магния тетраэдрического облика — из раствора с большой примесью буры, кристаллы квасцов октаэдрического облика — при большом пересыщении. Выточенные из этих кристаллов шарики подвергались растворению и обезвоживанию. Формы рельефа и фигуры обезвоживания отвечали пирамидам роста кристаллов данного облика. Поскольку на кристаллах квасцов отсутствовали пирамиды роста $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$, то и на шариках при растворении не было положительных и отрицательных форм рельефа. Таким образом, для семиводного сульфата магния выявляется бóльшая скорость растворения пирамид роста тетраэдра $\langle 111 \rangle$ и меньшая скорость их обезвоживания по сравнению с другими частями кристалла. У кристаллов квасцов скорость растворения пирамид роста убы-

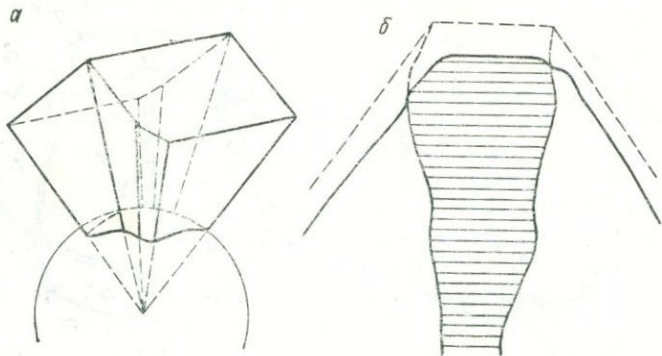


Рис. 47.

a — схема пересечения пирамид роста граней $\{1\bar{1}1\}$ эпсомита с поверхностью шарика; *b* — схема, иллюстрирующая нестрогое положение формы рельефа на растворяющемся кристалле.

ваит в следующем порядке: $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, $\langle 100 \rangle$. Нестрогое расположение форм рельефа на телах растворения и фигур обезвоживания, изменчивость их морфологии связаны с изменчивостью форм пирамид нарастания различных граней в процессе роста (рис. 47, б). Очертания этих фигур зависят от наличия тех или иных граней (пирамид нарастаний) на кристалле в процессе роста. При растворении на ограненных кристаллах и на шариках происходит препарирование пирамид роста.

Различие свойств пирамид роста неоднократно отмечалось в литературе. Здесь нам хочется отметить, что методом медленного растворения и медленного обезвоживания можно вскрыть многие тонкости в строении реального кристалла, которые трудно уловимы другими методами исследования. Например, на шарике из кристалла семиводного сульфата магния при медленном растворении выявляются следующие неоднородности кристалла.

На границе между пирамидами роста $\langle 1\bar{1}1 \rangle$ и $\langle \bar{1}11 \rangle$ наблюдается тонкий желобок (рис. 45, II). Растворение вдоль границы пирамид роста этих граней протекает быстрее, чем в прилегающих областях. Кроме того, в виде положительной формы рельефа проявляет себя пирамида роста $\langle 100 \rangle$ и отрицательной формы рельефа — пирамида роста $\langle 010 \rangle$. Пирамида роста $\langle 110 \rangle$ разделена нечеткой бороздкой на две части. Приняв за нулевой уровень основную площадь поверхности шарика, отвечающую пирамиде роста $\langle 110 \rangle$, и опустив вершинники растворения, можно описать положительные и отрицательные формы рельефа на растворяющемся шарике эпсомита следующим образом: $\langle 110 \rangle - 0$, $\langle 100 \rangle - 1+$, $\langle 111 \rangle - 1-$, $\langle 010 \rangle - 1-$, $\langle 1\bar{1}1 \rangle - 2-$, $\langle \bar{1}11 \rangle : \langle 1\bar{1}1 \rangle - 3-$; канавка в средней части пирамиды роста $\langle 110 \rangle - 1-$. Аналогичные образования наблюдаются при растворении кристалла изнутри.

При медленном обезвоживании шарика эпсомита выясняется, что пирамиды роста $\langle 110 \rangle$ делятся на две части с неравными скоростями обезвоживания. Оказывается, что на кристалле грани $\{110\}$ делятся на две очень близкие по положению грани, угол между которыми равен $\sim 35'$. Каждая из этих граней имеет свою пирамиду роста, что и вскрывается обезвоживанием и растворением.

Тонкости строения реального кристалла выявляются и при растворении монокристалльных шариков квасцов. Отрицательная форма рельефа, отвечающая пирамиде роста $\langle 110 \rangle$, имеет две ступеньки, обращенные к пирамидам роста $\langle 100 \rangle$ (рис. 45, 1). Концентрические дуги, расположенные в пирамиде роста октаэдра (рис. 48), выявляют ее зональное строение.

Спектральные анализы вещества из пирамид роста $\langle 110 \rangle$ эпсомита не обнаружили бора, а в пирамидах роста $\langle 1\bar{1}1 \rangle$ (независимо от количества буры в маточном растворе) показали присутствие 0,001—0,003 % бора. Анализы вещества из пирамид роста разных граней кристаллов квасцов не обнаружили разницы в их составе. Содержание примесей ванадия и кремния оказалось одинаковым ($\sim 0,001$ %).

Из приведенных материалов видно, что при растворении кристаллов могут быть выявлены все неоднородности, связанные с его формой. К таким неоднородностям относятся границы пирамид роста и зоны роста. Для выявления этих неоднородностей можно использовать при растворении шары, выточенные из монокристаллов. Напомним, что использование шаров для изучения роста кристаллов было предложено Е. С. Федоровым и подробно разработано его учеником Д. Н. Артемьевым [3]. Если учесть и то, что селективным травлением выявляются дислокации и точечные дефекты, то приходим к выводу о том, что эксперименты по растворению кристаллов доставляют значительную информацию о строе-

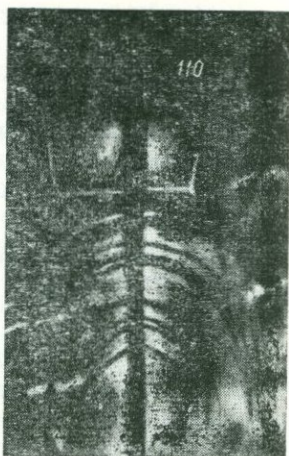
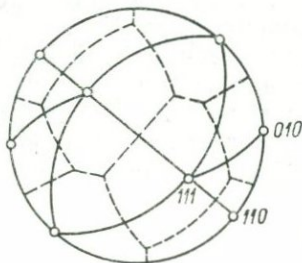


Рис. 48. При недосыщении 0,005 г/100 мл раствора на фотограмме в виде концентрических дуг проявляется зональное строение кристалла.

Рис. 49. Гномостереографическая проекция граней, ребер и вершин эпсомита (точки, сплошные линии и сферические многоугольники) и стереографическая проекция его пирамид роста (прерывистые линии).

Нижняя полусфера не показана. На проекции правая форма.



нии реального кристалла. Для анализа возможного распределения дефектов, связанных с границами пирамид роста, следует использовать предложенный выше (с. 45) метод построения пирамид роста на стереографической проекции. На рис. 49 показана стереографическая проекция пирамид роста эпсомита. С помощью такой проекции легко расшифровываются дефекты этого кристалла, выявленные растворением (ср. рис. 49 с рис. 45 и 46).

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМ КРИСТАЛЛОВ ПРИ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ *

В настоящее время выращивание совершенных полупроводниковых кристаллов осуществляется в основном двумя способами — Чохральского и бестигельной зонной плавки. Совершенствуется и внедряется в производство также способ Степанова. Для всех этих способов характерна направленная кристаллизация вещества, при которой процесс роста осуществляется только в одном кристаллографическом направлении, обычно задаваемом специальной затравкой.

У кристаллов, образованных при свободной направленной кристаллизации, морфологически следует различать фронт кристаллизации (поверхность, нормальную к направлению роста) и боковую поверхность, на которой проявляется симметрия бесконечных стержней.

Обычно при выращивании по методу Чохральского кристалл и тигель с расплавом вращаются в противоположных направлениях, а способ Степанова осуществляется без вращения кристалла и тигля. Поэтому при методе Чохральского могут проявиться на боковой поверхности винтовые оси симметрии и плоскости скользящего отражения, проходящие вдоль оси вытягивания. При выращивании кристаллов по способу Степанова проявятся только трансляции. При небольшом шаге винта, имеющем место на практике, вклад элементов бесконечной симметрии в морфологию боковой поверхности невелик и нами учитываться не будет.

Здесь мы остановимся только на результатах изучения форм кристаллов германия, выращенных методом Чохральского. Исследованию форм кристаллов германия, полученных способом Степанова, посвящен ряд работ, опубликованных в сборнике «Материалы первого совещания по получению полупроводниковых монокристаллов способом Степанова...» [Л., 1968 г.].

Выращенные по Чохральскому кристаллы германия обычно характеризуются направлением вытягивания и формой поперечного сечения (округлой и многоугольной). Фронт кристаллизации делят на выпуклый, плоский или вогнутый. Такая характеристика не дает представления о более тонких особенностях морфологии этих кристаллов. Между тем известно, что непосредственно с фор-

* [Любалин М. Д., Мокиевский В. А., 1968 г.; Доливо-Добровольская Г. И., Мокиевский В. А., Литвинова И. Ю., Любалин М. Д., 1969 г.]

мой кристаллов германия связаны их некоторые физические свойства.

Боковая поверхность и фронт кристаллизации взаимосвязаны, и разница между ними состоит только в том, что боковая поверхность разграничивает три, а не две фазы. При выращивании кристалла по методу Чохральского некоторые кристаллографически эквивалентные элементы его поверхности находятся в неравных условиях по отношению к потокам тепла, лимитирующим рост. Кристаллы вытягивались по семи различным кристаллографическим направлениям. Исходным материалом был зонноочищенный германий n -типа проводимости с $\rho > 40$ Ом·см. Получались кристаллы с заданными размерами: диаметр описанной вокруг поперечного сечения окружности — 8—10 мм, длина цилиндрической (псевдопризматической) части кристалла — 70—80 мм. Скорости вытягивания v_v в сериях опытов изменялись от 0,35 до 4,3 мм/мин, а скорости вращения затравки (30 об/мин) и тигля (10 об/мин) были постоянными.

Для исследования форм кристаллов была использована фотогониометрия. Чтобы получить рефлексы одновременно от фронта кристаллизации и от боковой поверхности, кристалл устанавливался так, чтобы угол между направлением вытягивания и осью светового пучка был ~ 20 — 60° , что позволяло фиксировать все световые сигналы. Для полного индирования поверхностей кристаллов, вытянутых по низкосимметричным направлениям, одной установки может оказаться недостаточно.

Для оценки кривизны фронта был использован метод дисторсии, описанный на с. 82.

Ниже приводятся результаты для всех исследованных направлений вытягивания. Наиболее подробно описываются кристаллы, выращенные в направлениях $[00\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$.^{*} Наряду с фотограммами для некоторых кристаллов показаны стереографические проекции.

Направление вытягивания $[00\bar{1}]$. Видимая симметрия кристаллов $4mm$. Фронт роста кристаллов, вытянутых при $v_v = 0,35$ мм/мин, выпуклый. Кривизна его $K_{ср} = 0,085$ мм⁻¹ и изменяется в зависимости от кристаллографического направления. Так, кривизна линии пересечения фронта с плоскостью (110) больше, чем с плоскостью (010) (рис. 50, а и б). В плоскостях $\{110\}$ наблюдаются изломы поверхности. При переходе к боковой поверхности фронт приподнят и образует бортик, световой сигнал от которого напоминает по форме мальтийский крест. С наружной стороны бортика имеются плоские грани $\{111\}$. Пять крупных конусовидных капель на фронте, образованные при отрыве кристалла, расположены закономерно: наиболее крупная с симметрией $4mm$ находится в центре фронта, а остальные с симметрией m

* Для удобства индирования символы направления вытягивания (вверх) даны с отрицательными индексами.

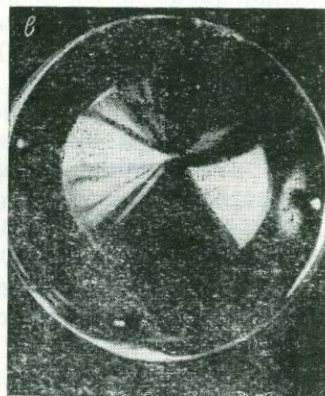
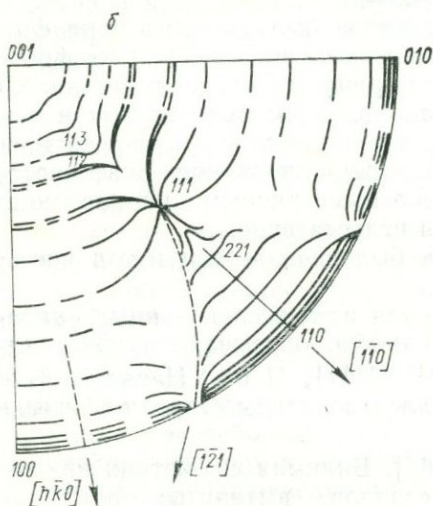
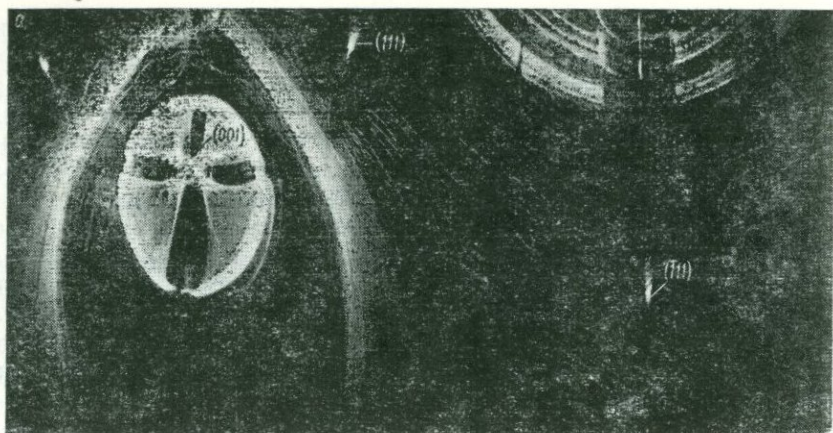


Рис. 50.

a — фотограмма, полученная от кристалла, выращенного вдоль $[001]$ при скорости вытягивания $0,35$ мм/мин. Внизу — округлый сигнал от фронта роста. Остальное — поле сигналов от боковой поверхности; *б* — стереографическая проекция сигналов. Здесь и в дальнейшем стрелками показаны зоны, к которым приурочены максимумы сигналов и разрывы в полях рефлексов; *в* — фотография фронта роста.

располагаются у выхода на поверхность раздела плоских октаэдрических граней и отвечают направлениям $[hhl]$.

Боковая поверхность кристалла разделяется на две области — цилиндрическую, состоящую из правильно чередующихся винтовых поверхностей с шагом, равным отношению скорости вытягивания кристалла к скорости его вращения, и конусообразных поверхностей, приподнятых над цилиндрической на $75-100$ мкм и образующих при вытягивании (трансляции) округлый валик.

Непрерывные сигналы от цилиндрической поверхности, отвечающие $\{hk0\}$, изламываются у положений $[210]$, а сигналы от округлого валика на месте граней $\{110\}$ образуют дуги, вкрест которым расположены рефлексy от серии граней тригон-триоктаэдров и ромбододекаэдра, притупляющих валик и появляющихся периодически. Переход от боковой поверхности к фронту кристаллизации на фотографии фиксируется полем сигналов $\{hkl\}$, которые изламываются в зоне $[110]$ и вытянуты в направлении граней октаэдра. Максимумы рефлексов отвечают формам $\{112\}$ и $\{113\}$ (рис. 50).

Кривизна выпуклого фронта кристаллов, вытянутых при $v_b = 1,5$ мм/мин, почти постоянна ($K_{cp} = 0,035$ мм⁻¹), а характер излома поверхности в плоскостях $\{110\}$, расположение капель расплава такие же, как у описанных выше кристаллов. Округлые валики приподняты над цилиндрической поверхностью меньше, чем в предыдущем случае (30—50 мкм), и на всем протяжении притуплены серией хорошо развитых граней тригон-триоктаэдров и ромбододекаэдра.

При скорости подъема 4,3 мм/мин кристаллы принимают псевдотетрагональный облик, фронт роста вогнутый. Кривизна линии пересечения фронта плоскостью $(110) - K_{cp} = -0,04$, плоскостью $(010) - K_{cp} = -0,05$ мм⁻¹. Бортик около боковой поверхности почти не проявлен. Кривизна боковой поверхности в направлении $[110]$ меньше, чем в направлении $[100]$, а излом поверхности соответствует $[210]$. Серии граней $\{hkk\}$ и $\{110\}$ проявлены очень четко, также хорошо развиты грани октаэдра, в направлении которых изогнуты сигналы из зоны $[110]$, обнаруживающие на фотограммах максимумы у положений $\{112\}$ и $\{113\}$.

Направление вытягивания $[\bar{111}]$. Видимая симметрия кристаллов $3m$. Кривизна фронта при $v_b = 0,35$ мм/мин равна $K_{cp} = 0,04 \div 0,05$ мм⁻¹ и наибольшего значения достигает на линии пересечения с плоскостями $\{112\}$. При переходе от фронта кристаллизации к боковой поверхности на бортике присутствуют грани $\{111\}$. В поле сигналов на фотографии выделяются максимумы в зонах $[110]$, а изломы приурочены к зонам $[321]$ и $[211]$. Округлые валики на месте граней $\{211\}$ приподняты над остальной поверхностью на 30—50 мкм.

При вытягивании с $v_b = 1,5$ мм/мин фронт роста кристаллов близок к плоскому. На некоторых кристаллах значительные участки поверхности фронта являются зеркально гладкими гранями (111) (рис. 51), а в общем кривизна фронта изменяется в пределах $K_{cp} = 0,01 \div 0,3$ мм⁻¹. Максимумы сигналов на фотограммах наблюдаются от тригон-триоктаэдров, иногда и от тетрагон-триоктаэдров, из зон, перпендикулярных к направлению подъема, причем кривизна фронта всегда больше в направлении зоны тригон-триоктаэдров. Поперечные сечения кристаллов представляют собой контур из совокупности линий положительной и отрицательной кривизны (табл. 8) или треугольник со скруглен-

Формы кристаллов при направленной кристаллизации

Направление вытягивания и его симметрия	Скорость вытягивания, мм/мин	Вид поверхности раздела		Символы форм и направлений
		Фронт роста	Боковая поверхность	
100 4mm	0,35			{111} {110} {hhl} {hkl} <110> <121>
	1,5			
	4,3			
111 3m	0,35			{111} {112} {110} {hkk} {hhl} {hkl} <110> <111> <112> <123>
	1,5			
	4,3			
110 2mm	0,35			{111} {hhl} {hkk} {hkl} <111> <112> <110> <113> <122>
	1,5			
	4,3			

<p>112</p> <p>m</p>	<p>0,35</p> <p>1,5</p> <p>4,3</p>			<p>$\{111\}$ $\{hkk\}$ $\{hhl\}$ $\langle 110 \rangle$ $\langle 121 \rangle$ $\langle 123 \rangle$</p>
<p>122</p> <p>m</p>	<p>0,35</p> <p>1,5</p> <p>4,3</p>			<p>$\{111\}$ $\{110\}$ $\{hhl\}$ $\{hkk\}$ $\langle 110 \rangle$ $\langle 111 \rangle$ $\langle 112 \rangle$</p>
<p>120</p> <p>m</p>	<p>0,35</p> <p>1,5</p> <p>4,3</p>			<p>$\{111\}$ $\{110\}$ $\{hhl\}$ $\{hkk\}$ $\langle 100 \rangle$ $\langle 110 \rangle$ $\langle 112 \rangle$ $\langle 123 \rangle$</p>
<p>123</p> <p>1</p>	<p>0,35</p> <p>1,5</p> <p>4,3</p>			<p>$\{111\}$ $\{hhl\}$ $\langle 110 \rangle$ $\langle 112 \rangle$</p>

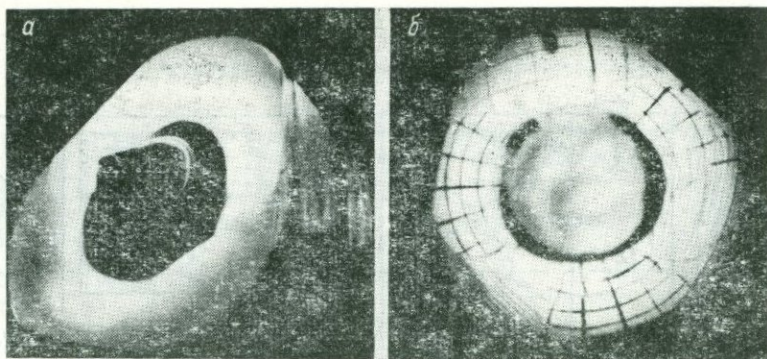


Рис. 51. Общий вид кристалла (а), вытянутого по $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ при $v_n = 1,5$ мм/мин, и картина дисторсии на фронте роста (б).

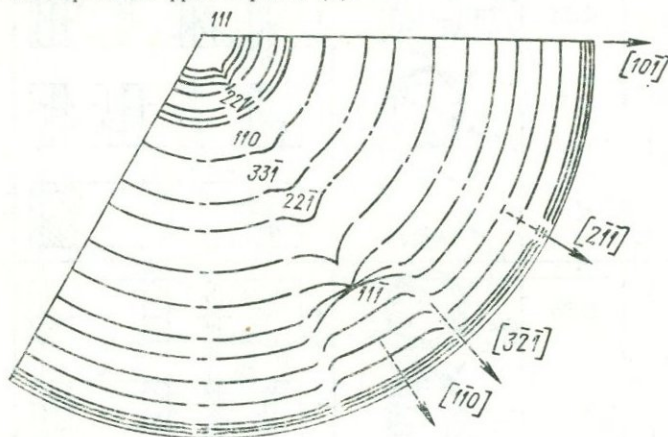


Рис. 52. Стереографическая проекция сигналов от поверхности кристалла, изображенного на рис. 51.

ными вершинами (рис. 51). В поле $\{hkl\}$ сигналов перегибу или излому отвечает зона $[\bar{3}\bar{2}\bar{1}]$ — переход от цилиндрической поверхности к ступенчатой $(11\bar{2})$, сложенной серией плоских граней из зоны $[\bar{1}\bar{1}0]$, перпендикулярной к направлению вытягивания. Эта серия дает максимумы у положения граней октаэдра (рис. 52).

Фронт роста кристаллов, полученных при $v_n = 4,3$ мм/мин, вогнутый. Кривизна его больше в областях, отвечающих направлению тригон-триоктаэдров ($K_{cp} = -0,03$ мм $^{-1}$), чем в областях, близких положению тетрагон-триоктаэдров ($K_{cp} = -0,025$ мм $^{-1}$), от которых наблюдаются максимальные сигналы. На фотограммах также фиксируется четкая зона тригон-триоктаэдров вплоть до граней октаэдра, расположенных косо к направлению вытягива-

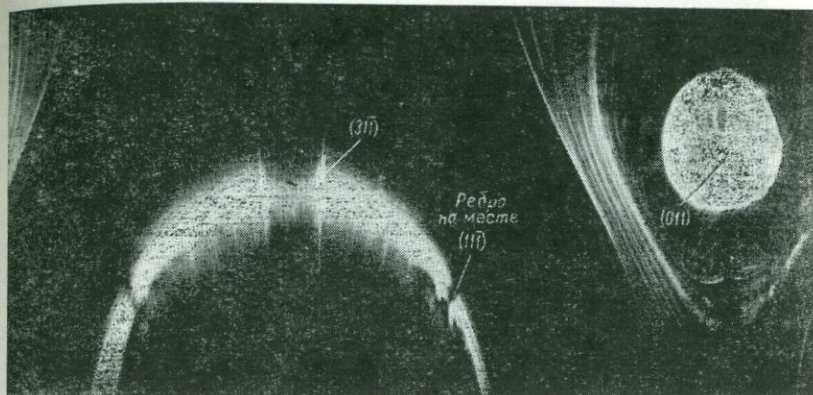


Рис. 53. Фотограмма, полученная от кристалла, вытянутого вдоль $[0\bar{1}1]$ при $v_B = 0,35$ мм/мин.

ния. На некоторых кристаллах на боковой поверхности проявлены грани ромбододекаэдра, параллельные направлению вытягивания.

Направление вытягивания $[0\bar{1}1]$. Видимая симметрия кристаллов $2mm$. При $v_B = 0,35$ мм/мин кривизна выпуклого фронта кристаллизации $K_{ср} = 0,05 \div 0,07$ мм⁻¹. Бортик на фронте при переходе к боковой поверхности срезан гранями октаэдра, капли германия у которых вытянуты в направлении $[\bar{2}11]$. На месте граней октаэдра, параллельных направлению вытягивания, присутствуют ребра, несколько приподнятые над общей поверхностью кристалла (5—15 мкм) и исключаящие из поля рефлексов зоны $[011]$ участки в 3—5°. Округлые валики, отвечающие положению гексаэдра, приподняты над остальной цилиндрической поверхностью на 50—70 мкм и пересекают ее у положения $(11\bar{3})$. На фотограммах световые максимумы отвечают зонам $[1\bar{1}1]$, $[0\bar{1}1]$ и $[\bar{2}11]$ (рис. 53).

Фронт роста кристаллов, выращенных при $v_B = 1,5$ мм/мин, выпуклый и его кривизна $K_{ср} = 0,02 \div 0,04$ мм⁻¹. Световые максимумы на фотограммах соответствуют зонам $[\bar{3}11]$, $[211]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[011]$ и $[1\bar{2}2]$ (рис. 54). В поле $\{hkl\}$ сигналов при переходе от фронта к боковой поверхности имеются незасвеченные участки между зонами $[\bar{1}2\bar{1}]$ и $[122]$, где поверхность кристалла изламывается у основания конусов роста $\{111\}$, составляющих косой угол с направлением вытягивания. Валики, образованные трансляцией таких конусов, выступают над остальной ограничивающей кристалл поверхностью на 20—30 мкм. Хорошо развиты грани октаэдра, параллельные оси кристалла. Капли расплава, закристаллизовавшиеся по окончании роста, вытянуты в направлениях $[100]$ и $[\bar{2}11]$.

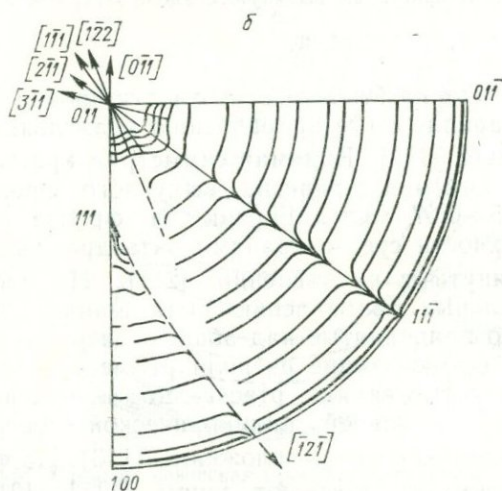
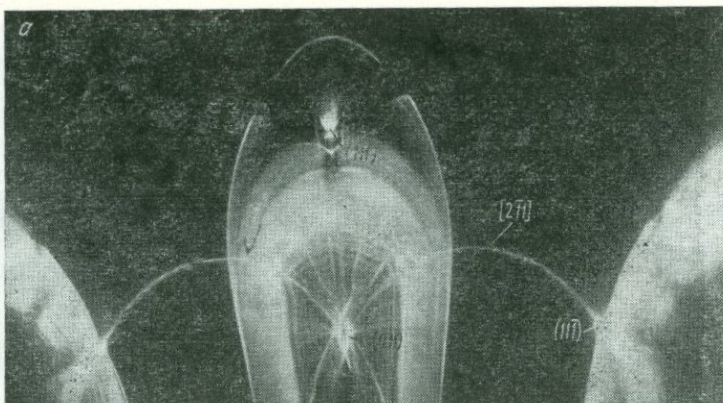


Рис. 54. Фотограмма (а) и стереографическая проекция (б) сигналов от кристалла, вытянутого по $[0\bar{1}1]$ при $v_B = 1,5$ мм/мин.

Кривизна вогнутого фронта кристаллов, полученных при $v_B = 4,3$ мм/мин, изменяется от $K_{cp} = -0,03$ мм⁻¹ на линиях пересечения с плоскостями $\{0\bar{1}1\}$ до $K_{cp} = -0,045$ мм⁻¹ в плоскостях $\{100\}$. Хорошо развиты грани октаэдра, расположенные как косо, так и параллельно направлению вытягивания. Капли германия на фронте вытянуты в направлении $[100]$. На фотограммах световые максимумы отвечают тем же зонам, что и для кристаллов этой серии, описанных выше.

Результаты исследования формы кристаллов, вытянутых по всем семи направлениям с различными скоростями, сведены в табл. 8. При этом используется следующий метод схематического изображения кристаллов.

1. Фронт кристаллизации изображается контуром, имеющим форму поперечного сечения кристалла.

2. Общая кривизна фронта указывается стрелками вне контура. Стрелки, направленные от центра, обозначают выпуклый, к центру сечения — вогнутый фронт.

3. Плоские участки фронта, совпадающие с плоскостью чертежа, штрихуются горизонтальными линиями, грани, не лежащие в плоскости чертежа, зачернены.

4. Локальные положительные или отрицательные формы рельефа обозначаются знаками $+$ или $-$ соответственно; в случае излома поверхности граница их оконтуривается сплошной линией, при постепенной смене кривизны (перегибах) — штриховой. Крупные капли на фронте не обозначены.

5. Боковая поверхность показана разверткой по диаметру цилиндрической части кристалла. Морфологические детали обозначены так же, как и на фронте, с той разницей, что наклонные грани не зачернены, а косо заштрихованы. Для высокосимметричных направлений вытягивания показана часть поверхности.

6. Кристаллографический репер, используемый при описании, дан с помощью трех фиксированных направлений — двух в графе «Фронт роста» и третьего — в графе «Боковая поверхность».

7. В отдельной графе отмечены все проявленные кристаллографические элементы поверхности исследованных кристаллов. Угловыми скобками дано семейство направлений.

Из табл. 8 видно, что симметрия кристаллов отвечает симметрии направления, вдоль которого производилось вытягивание.

При исследовании роста каждой отдельной грани необходимо учитывать результат взаимодействия по принципу Кюри плоских сечений группы симметрии среды и симметрии граней кристалла. Однако это является только частью вопроса. При направленной кристаллизации кроме симметрии граней следует учитывать и ее векториальные свойства. Рассмотрим с этих позиций рост кристаллов по Чохральскому. Для упрощения не будем учитывать вращение кристалла и тигля. Симметрия среды в таком процессе будет отвечать симметрии конуса ∞m . Если кристалл ориентирован по $[112]$, то только одна плоскость симметрии его сохранится и форма кристалла станет моноклинной. Отсюда ясно, что симметрия реальных граней будет отвечать ложным формам, возможным в группе симметрии m . Число эквивалентных направлений и соответственно граней по сравнению с таковым в идеальном кристалле сократится согласно симметрии реального кристалла. На рис. 55 изображен октаэдр из класса $m\bar{3}m$. Стрелками показаны симметричные полярные направления на его гранях. При вытягивании по $[\bar{1}\bar{1}2]$ стрелки на этих противоположных гранях, параллельных оси вытягивания, направлены в противоположные стороны (вниз и вверх). Отсюда вытекает, что эти грани при вытягивании должны расти по-разному, несмотря на то что симметрия их одинакова. В действительности это и имеет место. Одна из этих граней октаэдра развита хорошо (табл. 8), а ей параллельная при малых скоростях вытягивания исключена в вершине (ребре), выступающей над округлой поверхностью кри-

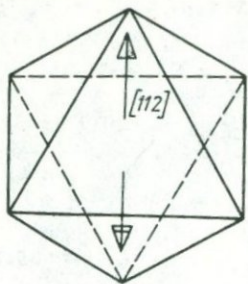


Рис. 55. Ориентировка кристаллографически эквивалентных направлений $[112]$ на гранях октаэдра относительно направления вытягивания $[112]$.

сталла. Появляется она только при больших скоростях вытягивания. Симметрия такого кристалла может быть удовлетворительно описана группами многоцветной симметрии. При этом описании оттеняются и отмеченные выше тонкости с векторами, лежащими на поверхности кристалла. В разобранном примере симметрия реального кристалла отвечает 24-цветной группе $m\bar{3}m(m)$, а зеркальные грани октаэдра на боковой поверхности, по сути дела, являются ложными моноэдрами.

П. И. Антоновым [1] при вытягивании профилированных кристаллов германия по $[112]$ способом Степанова также было замечено, что грань октаэдра, параллельная оси вытягивания, отличается от противоположной не только по своим контурам, но и по тонкому рельефу, определяемому слоями роста. Кроме того, из этой же работы можно увидеть, что и геометрическая форма мениска, и подъем расплава для этих граней различные.

Вращение кристалла при вытягивании по Чохральскому в некоторых случаях накладывает заметный отпечаток на симметрию формы кристалла. На одном из кристаллов, вытянутом по $[111]$ и имеющем следы скелетного роста, при тщательных гониометрических измерениях было замечено [Доливо-Добровольская Г. И., Мокиевский В. А., Литвинова И. Ю., Любалин М. Д., 1969 г.] понижение симметрии образца до группы 3 вместо обычно фиксируемой $3m$. Кристалл как бы весьма неохотно уступал среде, занижая свою симметрию только проявлением второстепенных граней.*

О связи морфологии вытягиваемых кристаллов с условиями роста можно сказать следующее (см. табл. 8). С увеличением скорости вытягивания кривизна фронта кристаллизации изменяется для всех исследованных направлений выращивания. Фронт кристаллизации при этом не имеет постоянной кривизны. Для различных направлений вытягивания изменение кривизны фронта при изменении скорости вытягивания неодинаково: наиболее искривлен фронт кристаллов, вытянутых в направлении $[001]$

* О влиянии условий роста на симметрию и форму выращиваемых по методу Чохральского кристаллов опубликован ряд статей М. Д. Любалина и В. Н. Третьякова.— *Ред.*

(от $K_{ср} = 0,085 \text{ мм}^{-1}$ при $v_v = 0,35 \text{ мм/мин}$ до $-0,05 \text{ мм}^{-1}$ при $4,3 \text{ мм/мин}$), наименее — для кристаллов, выращенных по $\{111\}$ (от $0,04 \text{ мм}^{-1}$ при $0,35 \text{ мм/мин}$ до $-0,03 \text{ мм}^{-1}$ при $4,3 \text{ мм/мин}$).

Плоские октаэдрические грани, обнаруживаемые на поверхностях отрыва всех кристаллов у бортика при переходе к боковой поверхности, присутствуют на фронте и в процессе вытягивания. Это видно из полного совпадения их конфигурации с формой валиков или террасовидных ступеней на боковой поверхности. В общем, боковая поверхность состоит из цилиндрической части, сложенной правильно чередующимися винтовыми поверхностями, конусообразных поверхностей, которые образованы конусами роста с осями $\langle 111 \rangle$, косо расположенными к направлению вытягивания, и ступенчатых поверхностей, состоящих из участков плоских граней.

С увеличением скорости вытягивания в ограничении кристаллов возрастает роль плоских поверхностей (см. табл. 8). Наибольшая морфологическая роль принадлежит граням $\{111\}$. Грани этой формы могут присутствовать, располагаясь косо, параллельно и перпендикулярно к направлению вытягивания. Они устойчивы в достаточно широком диапазоне условий роста. Так, появляясь при определенном угле раствора конусовидной (псевдопирамидальной) части кристаллов, октаэдрические грани не исчезают с их поверхности при изменении угла раствора конуса до 10° . Появление граней $\{111\}$ на фронте перпендикулярно к направлению вытягивания многие авторы связывают с тепловым или концентрационным переохлаждением расплава. Считается при этом, что скорость нормального продвижения этих граней меньше, чем скорость нормального перемещения остальной части фронта, т. е. грань отстает от изотермы плавления, форму и положение которой полностью отражает кривая часть поверхности фронта. Измерения с помощью микроскопа показали, что плоские грани приподняты под остальной поверхностью раздела на $5\text{--}7 \text{ мкм}$. Такая форма рельефа может быть обусловлена большими тангенциальными скоростями разрастания граней с большой ретикулярной плотностью при значительных переохлаждениях, неизбежных при декантации, что отмечалось выше для регенерирующих в растворах кристаллических шариков.

Кроме $\{111\}$ на кристаллах обнаружены грани $\{110\}$, которые в виде небольших ступеней на поверхности присутствуют только с серией граней $\{hkk\}$. Грани $\{112\}$ также являются подчиненной формой, и хотя обнаруживаются в виде отдельных плоских участков поверхности, но обязательно вместе с гранями октаэдра и серией граней $\{hhl\}$.

На всех поверхностях раздела наблюдается закономерное расположение капель расплава, кристаллизующихся после отрыва: у выхода на поверхность раздела плоских граней $\{111\}$ и вытянутых в направлениях $[112]$ и $[110]$. Это служит подтверждением анизотропии сил поверхностного натяжения, так же как и тот факт, что у расположенных косо к направлению вытягивания

граней октаэдра наблюдается поднятие поверхности раздела над уровнем расплава.

Интерес представляет тот факт, что для некоторых низкосимметричных направлений вытягивания центр светового рефлекса отвечает не заданной затравкой ориентировке, а близкой ей более высокосимметричной. Так, максимум сигналов от фронта роста кристалла, вытянутого в направлении [122], находится вблизи (011), и нормаль к поверхности фронта не совпадает с направлением вытягивания, т. е. фронт роста расположен косо к поверхности расплава.

Этот факт не является тривиальным и заслуживает внимания, так как может иметь большое практическое значение. Наши наблюдения над кристаллами германия и кремния, полученными промышленностью, подтвердили лабораторные исследования. Оказалось, что отклонение фронта кристаллизации имеет место и при вытягивании этих кристаллов вдоль [111]. При отклонении оси вытягивания от направления [111] с точки зрения симметрии возможны два случая: 1) ось вытягивания является направлением $[hhl]$ или $[llh]$ и 2) ось вытягивания является направлением $[hkl]$. В первом случае кристалл будет иметь видимую симметрию m , а во втором случае — 1. Обычно углы отклонения от задаваемого направления невелики и составляют $\pm 1-2^\circ$. На внешней форме такие отклонения заметно не сказываются. При больших углах отклонения ($5-10^\circ$) можно заметить визуально, что участки боковой поверхности, сложенные ступеньками граней октаэдра и называемые иногда дорожками граней, не равновелики. В зависимости от направления отклонения оси вытягивания либо они подчиняются симметрии m (две дорожки равны между собой), либо все три дорожки различны по ширине. Фронт роста при этом заметно отклонен от нормального положения относительно оси вытягивания.

Этот факт требует тщательного количественного исследования. Формальное же толкование его может быть осуществлено на основе векторных свойств поверхности кристалла. Если ось вытягивания достаточно строго совпадает с [111], то каждое направление на поверхности кристалла будет иметь себе симметричное относительно оси z и подъем расплава (мениска) будет также симметричным (рис. 56, а). Фронт роста будет также симметричен относительно оси вытягивания. При отклонении оси вытягивания кристалла от [111] участки боковой поверхности цилиндрического кристалла связаны между собой либо одной плоскостью симметрии и центром, либо только центром симметрии (рис. 56, б). При этом либо все концы симметричных направлений на боковой поверхности кристалла, либо их часть (в случае сохранения плоскости симметрии) будут обращены в противоположные стороны, что вызовет различное сцепление расплава с кристаллом на эквивалентных, с точки зрения классической симметрии, участках поверхности. Мениск понизит свою симметрию до m или 1, что может привести к наклону фронта кристаллизации. Наклон фронта кри-

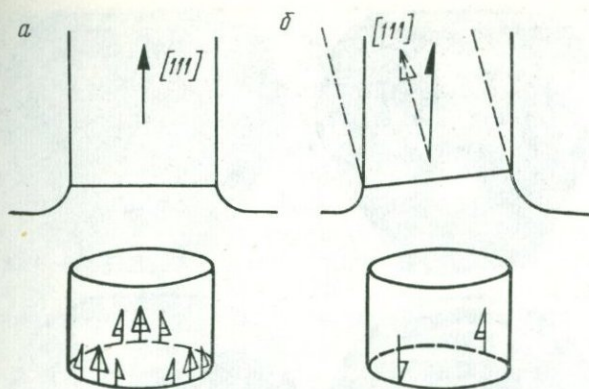


Рис. 56.

a — симметричный подъем расплава при соблюдении точной ориентировки оси вытягивания по $[111]$; *b* — асимметричный подъем расплава при отклонении оси вытягивания от $[111]$. Внизу показано расположение эквивалентных направлений на цилиндрической поверхности кристаллов для случаев *a* и *b*.

сталлизации почти до 8° наблюдается и на ленточных кристаллах германия, полученных способом Степанова при отклонении направления вытягивания от $[110]$. Поскольку отклонение фронта роста от горизонтальной плоскости связано с разным уровнем подъема расплава на кристаллографически эквивалентных и неэквивалентных участках боковой поверхности, угол отклонения будет тем меньше, чем больше поперечное сечение кристалла.

Из сказанного следует, что затравка при выращивании кристаллов методами Чохральского, Киропулоса и Степанова должна быть ориентирована как можно более точно. Дело не в том, конечно, что при неточной ориентировке нарушается симметрия внешней формы кристалла, его красота, а в том, что нарушается и его однородность. Нарушение однородности будет особенно заметно при легировании кристалла примесями. Известно, что для легированных кристаллов характерна канальная неоднородность, являющаяся, по сути дела, пирамидой роста (эффект грани) $\langle 111 \rangle$. Если весь фронт будет отвечать одной грани октаэдра, то и кристалл будет максимально однородным. Одним из условий для этого является точная ориентировка затравки.

Для кубических кристаллов класса $m\bar{3}m$, каковыми являются германий и кремний, отклонение фронта кристаллизации от направления вытягивания (при точной ориентировке) не будет наблюдаться при выращивании вдоль $[111]$, $[100]$ и $[110]$. В остальных случаях это отклонение возможно. Очевидно, что для кристаллов всех классов симметрии при точной ориентировке затравки и симметрии теплового поля, равной ∞m , отклонение фронта кристаллизации от горизонтального положения не должно наблюдаться при ориентировке оси затравки перпендикулярно ко всем граням, за исключением граней с симметрией 1 и m . Если

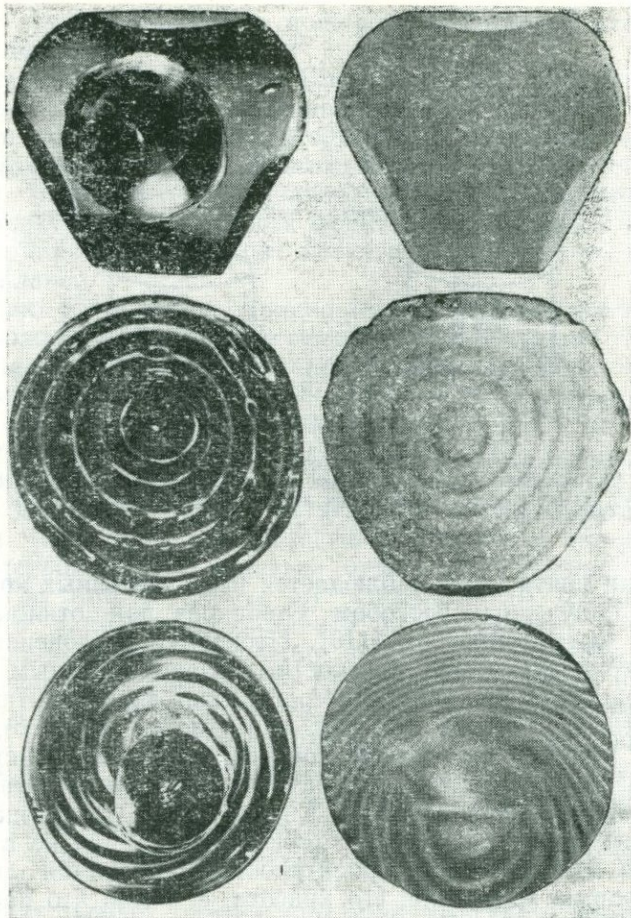


Рис. 57. Фронты роста кристаллов германия, выращенных методом Чохральского (слева), и картины распределения примесных неоднородностей (справа), выявленные анодным травлением в срезах, близких к фронтам роста (по И. Ю. Литвиновой).

расплав легирован такой примесью, которая состоит только из правых или только из левых молекул, то симметрия мениска расплава может, когда симметрия направлений вытягивания является планальным классом (m , $2m$, $3m$, $4m$ и $6m$), занизиться до аксиальных подгрупп этих классов. Для направления вытягивания с симметрией m в этом случае возможно наклонение фронта кристаллизации относительно плоскости симметрии кристалла.

Форма фронта кристаллизации во многом определяет распределение дефектов кристалла в объеме и картины примесных неоднородностей. Наиболее однородные кристаллы могут быть полу-

ченны, как уже было сказано, при плоском фронте роста. И. Ю. Литвиновой изучалось распределение примесных неоднородностей в кристаллах германия, легированных сурьмой.* На рис. 57 приводятся изображения фронтов роста кристаллов германия и картины примесных неоднородностей, выявленные анодным травлением на пришлифованных плоскостях (111), расположенных вблизи фронтов. Как видно из этого рисунка, распределение примеси сурьмы связано с формой фронта, так как картина распределения примеси довольно точно воспроизводит детали фронта кристаллизации. Изучение картин анодного травления легированных кристаллов в разных сечениях, так же как и изучение формы кристалла, позволяют «читать» историю роста всего кристалла по этапам.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этом разделе были рассмотрены вопросы симметрии и формы идеальных и реальных кристаллов.

Моделирование кристаллографических направлений в виде стрелок с определенной симметрией дало возможность наглядно представить 32 класса симметрии, разновидности простых форм по Г. Б. Бокию, черно-белые и многоцветные группы симметрии и черно-белые простые формы.

Изображение граней, ребер и вершин многогранника на гномостереографической проекции в виде сети разбиения сферы на гоноэдры (телесные углы) дало возможность находить все ребра и вершины при пересечении граней двух простых форм в одном классе симметрии, изобразить на стереографической проекции формы реальных кристаллических многогранников. Этот способ проектирования позволяет от внешней морфологии реального кристалла перейти к его внутренней морфологии путем построения проекции пирамид роста. Кроме этого, способ изображения ребер кристаллов в виде частей дуг больших кругов разрешает вывести на проекции реберные формы. Для этого сформулированы заново правила равенства или различия простых реберных форм, справедливые для гранных форм, гранных и реберных пучков. Показано, что часть выведенных ранее реберных форм не представляет собой самостоятельных форм. В прил. I дан результат вывода реберных форм и их разновидностей на том же уровне, что и вывод 47 гранных форм. При выводе реберных форм выяснилось особое значение таких форм, ребра которых нормальны к осям 3 кубических кристаллов.

Сделана попытка подвести более строгую основу для описания форм округлых кристаллов путем введения понятий о примитивных контурах и их надстройках (крышах). Показано, что на

* И. Ю. Литвинова под руководством В. А. Мокиевского выполнила и успешно защитила диссертационную работу «Исследование примесных неоднородностей, дефектов структуры и морфологии легированных монокристаллов германия» [Автореф. Л., 1970 г.]— *Ред.*

стереографической проекции также могут быть изображены вершины и ребра округлых кристаллов. На основе понятия граничных, реберных и вершинных нарастаний приведен способ описания геометрии скелетных кристаллов.

Для описания реальных форм кристаллов и неоднородностей, связанных с пирамидами роста, применена цветная симметрия по О. Виттке и Д. Карридо [99].

Показана продуктивность исследования световых картин с помощью фотогониометрии. Этот метод дает объективную характеристику поверхности кристалла и фиксирует неоднородности, связанные с пирамидами и зонами роста и проявляемые при растворении.

Предложен (совместно с М. Д. Любалиным) новый метод исследования формы кристаллов — метод дисторсий сеток при отражении от кристаллической поверхности. Преимущества этого метода показаны на примере исследования кристаллов германия.

Совместно с В. Н. Войцеховским экспериментально изучены формы роста и растворения кристаллов. Эти исследования показали, что между формами роста и растворения имеется определенная связь, которая позволяет по формам растворения показать особенности форм роста, и наоборот. По формам растворения можно качественно построить объемную полярную диаграмму роста (растворения). В ряде случаев (но не всегда) эти сведения можно почерпнуть из форм ямок травления. При растворении шаров из кристаллов проявляются в виде положительных и отрицательных форм рельефа пирамиды роста граней и границы между ними. Возможные распределения этих неоднородностей в пространстве находятся с помощью стереографической проекции.

Если учесть, что селективными травителями выявляются дислокации и другие дефекты структуры, то приходим к выводу, что растворением могут изучаться все известные на сегодняшний день дефекты кристаллов: зоны и пирамиды роста, границы между ними, дислокации, точечные дефекты и др.

Исследование форм кристаллов при направленной кристаллизации на примере германия, проведенное совместно с М. Д. Любалиным, Г. И. Доливо-Добровольской и И. Ю. Литвиновой, показало, что округлая поверхность этих кристаллов блещет кристаллографическими закономерностями, на которые ранее почти никакого внимания не обращалось. Фронт кристаллизации имеет в большинстве случаев сложную форму, состоящую из плоских, выпуклых и вогнутых поверхностей, расположение которых обусловлено кристаллографией и условиями выращивания. С формой кристаллов связано распределение примесных неоднородностей. Показано, что отклонение фронта кристаллизации от горизонтальной плоскости для направлений вытягивания [111], [100] и [110] связано с неточной ориентировкой затравки. При вытягивании по другим направлениям такие отклонения возможны даже при достаточно точной ориентировке кристалла.

Для получения однородных кристаллов, не имеющих неоднородностей, связанных с формой (пирамиды роста и их границы), помимо высококачественных затравок наилучшие результаты может дать направленная кристаллизация при условии, что на фронте роста будет присутствовать грань одной простой формы, т. е. выращивание одной пирамиды (точнее, призмы или цилиндра) роста. Ориентировка затравки должна быть максимально точной. Симметрия среды кристаллизации должна при этом приближаться к симметрии конуса по всему объему. При выращивании из растворов направленная кристаллизация должна дать положительные результаты, но осуществление ее встретит большие трудности. При кристаллизации из раствора преимущественного роста одной пирамиды можно в некоторых случаях достичь путем изготовления затравки определенной формы. Так, для кристаллов KDP затравку следует вырезать в виде пластины, параллельной $\{101\}$.

Если перед экспериментатором стоит задача получения кристаллов с определенным распределением примесных дефектов, то для этого следует выращивать такие кристаллы, у которых поверхность роста состояла из граней нескольких простых форм. Так, для получения непосредственно из расплава $p-n$ -переходов следует выращивать кристаллы полупроводников в таких условиях, чтобы на фронте роста были по меньшей мере грани двух простых форм. Граница между их пирамидами роста и может быть $p-n$ -переходом.

Данные этого раздела могут оказаться полезными при изучении онтогении минералов [13, 14].

СИММЕТРИЯ И МОРФОЛОГИЯ ДВОЙНИКОВ

К ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ДВОЙНИКОВ

Двойникование кристаллов представляет собой широко распространенное явление в мире минералов и среди кристаллов искусственных соединений. Этому явлению отводится значительное место в учебной литературе и посвящено много специальных исследований. Двойники кристаллов минералов исследуются петрографами и минералогами и играют определенную роль при описании горных пород и минералов. Установление генезиса двойников минералов может оказать значительную пользу при расшифровке условий образования месторождения как в целом, так и в деталях. К сожалению, происхождение большинства природных двойников остается до настоящего времени загадкой и при их описании авторы вынуждены довольствоваться только констатацией того или иного двойникового закона. Нисколько не лучше обстоит дело с двойниками, которые встречаются при выращивании искусственных кристаллов. В ряде случаев, например при выращивании кристаллов германия, кремния, соединений $A^{III}B^V$ и др., двойникование представляется явлением нежелательным, серьезно препятствующим получению монокристаллов. Чтобы устранить это препятствие, необходимо знать причины возникновения двойников и их развития при росте. Это же относится к деформации твердых тел, к структурным превращениям, протекающим с образованием двойников. Отметим также, что для создания некоторых приборов техника может потребовать кристаллические материалы, содержащие двойниковые границы определенного типа.* Все это говорит о важности изучения двойников.

В настоящем разделе в порядке изложения будут приводиться ссылки на оригинальные статьи и монографии, в которых читатель может найти сведения о конкретных двойниках, об их искусственном получении, строении и т. п. Основное же внимание будет уделено рассмотрению симметрии двойников, их новой классификации, морфологии двойниковых образований. Весь материал будет изложен с помощью теории симметрии, так как только с этих позиций можно наиболее полно охарактеризовать кристаллографические закономерности двойников. Сразу же от-

* Об особых свойствах границ и об их использовании в ряде полупроводниковых приборов говорится в большой монографии Г. Матаре [1974 г.].— *Ред.*

метим, что возможность такого подхода к двойникам появилась благодаря выводу групп двухцветной симметрии, осуществленному независимо друг от друга Г. Хеешем и А. В. Шубниковым [69].

Е. С. Федоров [43, с. 289], характеризуя состояние учения о кристаллических двойниках, писал: «Хотя в обширный имеющийся материал о кристаллических двойниковых образованиях внесено и много ясности и, видимо, недалеко время, когда образования этого рода составят такой же строгий отдел теоретической кристаллографии, каковы и другие ее отделы, однако процесс разъяснения и вывода образований этого рода еще не закончен и пока удобнее излагать его как отдел эмпирической науки с некоторыми указаниями на подчинение строгим математическим законам». Несколько позже Е. С. Федоров [44, с. 396] наметил путь такого вывода: «Если даже разнородные кристаллы могут нарастать друг на друге так, чтобы параллельно ориентировались ребра, хотя бы приближенно одинаковой молекулярной плотности, то физическая причина таких нарастаний станет еще очевиднее, если дело идет об одинаковости абсолютной, как это имеет место в двойниках одного и того же вещества. Выводы, которые получатся из этого принципа, вполне согласуются с опытом, и не только согласуются, но все на вид разнородные выражения двойниковых законов приводятся к одному единственному: правильное нарастание соответственных ребер друг на друге». Это утверждение, как увидим ниже, почти полностью дублируется новейшим определением двойниковых образований [88].

Теоретический вывод возможных двойников для каждого класса симметрии кристаллов имеет значение по той причине, что многие двойниковые сростания часто остаются при исследовании незамеченными. Это особенно касается тех случаев, когда углы разориентировки компонентов (индивидов) двойника не велики и не постоянны. Прежде чем перейти к выводу возможных двойников для каждого класса симметрии кристаллов, отметим, что решение такой задачи осуществлялось уже различными авторами. Х. Кюрьен и И. Ле Корр [79, 80], используя идею о применении двухцветной симметрии к двойниковым сросткам [Мокиевский В. А., Шафрановский И. И., 1957 г.], предложили классификацию двойников и сделали попытку вывести возможные группы симметрии двойников для 32 кристаллографических классов. В основу своего вывода они положили идею Р. Ж. Гаюи о том, что суммарные формы двойниковых образований обладают более высокой симметрией, чем слагающие их отдельные кристаллы. Впоследствии эта идея получила дальнейшую разработку в трудах Г. Фриделя, который использовал для характеристики двойников понятия мериздри и голоэдри.

Х. Кюрьен и И. Ле Корр дали три сводные таблицы групп симметрии двойников, выведенных на указанной основе. Однако ими были пропущены многие группы симметрии двойников для ряда классов симметрии исходных компонентов. Так, например,

для кварца (класс 32) выведены только три двойника: дофнейский, бразильский и простой двойник Либиша. Для кубических кристаллов некоторые группы симметрии двойников приведены ошибочно, а именно для класса $2\bar{3}$ отмечены возможные двойники с точечной симметрией $\bar{3}$ и $m'\bar{3}'$. Само собою разумеется, что двойник сростания с симметрией $\bar{3}$ при «прорастании» даст группу $m'\bar{3}'$. При одной точечной группе симметрии двойника могут быть, как будет показано ниже, различные группы симметрии двойников сростания, описываемые симметрией двухцветных стержней. Для этого же класса 23 ими не отмечены двойники с симметрией $2'2'2'$, $2m'm'$ и др. Причиной этого явилось то, что указанными авторами не были учтены разновидности простых форм по Г. Б. Бокию [8] и все подгруппы исходного класса симметрии компонента. В. Л. Инденбом [18] с помощью теории представлений дал общую схему фазовых переходов второго рода, построенную на основе известной [91] иллюстрации кристаллических классов симметрии и их подгрупп. Многие двойники в этой схеме не нашли своего отражения. Примером может служить шпинелевый двойник.

В. А. Мокиевским, И. И. Шафрановским и И. И. Афанасьевым [1965 г.] был предпринят вывод двойниковых законов, базировавшийся на определении двойника по П. Хартману [88]: «Двойник состоит из двух индивидов одного и того же кристаллического вещества, сросшихся вместе так, что плоская сетка и лежащий в ней структурный ряд одного индивида параллельны такой же плоской сетке и такому же структурному ряду второго индивида».* П. Хартман указал, что одноименные структурные ряды с симметрией 1 при соблюдении параллельности дадут семь двойниковых положений, а восьмое будет отвечать параллельному слою. Поименованные выше три автора использовали в своем выводе двойников разновидности простых форм по Г. Б. Бокию, но натолкнулись на ряд затруднений с идентификацией законов двойникования, полученных по разным граням в одном классе симметрии. В связи с этим не было уверенности в исчерпывающей полноте и правильности окончательного результата.

По этой причине был предпринят новый вывод законов двойникования [Мокиевский В. А., Шафрановский И. И., Вовк П. К., Афанасьев И. И., 1966 г.], в основу которого были положены группы симметрии плоских двойниковых узоров на границе двух кристаллов, составляющих двойник. Они находились с помощью пяти стрелок (см. рис. 2) при условии их совпадения. В найденных таким способом плоских двойниковых группах симметрии

* Определение П. Хартмана не только близко к федоровскому, но почти точно совпадает с определением двойника по Г. Чермаку [1884 г.]: под двойником «разумеют сростки, по определенному закону, двух одинаковых кристаллических неделимых в непараллельном положении... Правильность сростания состоит в том, что у неделимых, по крайней мере, одна одноименная плоскость, и, по крайней мере, одно одноименное ребро, лежащее в этой плоскости, общие или взаимно параллельны».

оказалось полезным двойниковые элементы симметрии (элементы связи) обозначать дополнительными цифрами, показывающими расположение элемента симметрии относительно выбранного ребра и грани кристалла: m^1 перпендикулярна к ребру и грани, m^2 параллельна ребру и перпендикулярна к грани, m^3 параллельна грани, 2^1 , 2^2 и 2^3 нормальны к указанным плоскостям двойникования. При условии совпадения одноименных ребер из 10 плоских односторонних групп симметрии выводится 32 разновидности двойниковых плоских групп. Каждая двойниковая плоская группа имеет вдвое больший порядок, чем исходная плоская группа симметрии грани. Вывод двойниковых законов состоял в том, что двойниковые плоские группы симметрии, возможные для данного кристаллического класса, суммируются с его элементами симметрии.

Для примера возьмем кристалл с симметрией 1 (плагноклаз). Все грани этого кристалла имеют симметрию 1. Следовательно, плоские двойниковые группы, возможные в этом случае, будут m^1 , m^2 , m^3 , 2^1 , 2^2 , 2^3 . Плоская двойниковая группа $\bar{1}$ здесь даст параллельный сrostок, так как исходный кристалл имеет центр симметрии. Суммарная точечная симметрия двойника получится путем сложения плоской двойниковой группы с центром симметрии кристалла. В результате получим следующие разновидности группы четвертого порядка моноклинной голоэдри: $2^1/m^1$, $2^2/m^2$, $2^3/m^3$. В качестве второго примера выведем симметрию колеччатого двойника рутила. Этот минерал относится к тетрагональной голоэдри $4/mmm$. Грани $\{h0l\}$ и $\{hhl\}$ обладают симметрией m и дают плоскую двойниковую группу 2^1mm^3 . Поскольку нормально к плоскости симметрии m в кристалле проходит ось 2 и имеется центр симметрии, то суммарная симметрия двойника будет отвечать ромбической голоэдри $2^1/m^1$, $2/m$, $2^3/m^3$. В работе В. А. Мокиевского и др. [1966 г.] приводятся двойниковые законы, выведенные таким способом.

В дальнейшем было замечено, что одноименные ряды дают плоские группы симметрии и в том случае, если они расположены косо друг к другу или взаимно перпендикулярны. Так, например, у пирита при двойниковании по $\{110\}$ возникает плоская двойниковая группа 2^1mm^3 , а суммарная симметрия двойника будет отвечать кубической голоэдри $4'/m\bar{3} 2^3/m^3$. Иначе говоря, такой двойник можно рассматривать как двойник не только по $\{110\}$, но и по $\{100\}$, где грани куба дают плоскую двойниковую группу $4'mm'$ со взаимно перпендикулярными одноименными рядами $[100]$ и совпадающими рядами $[110]$. Это обстоятельство и на вело на мысль, что некоторые двойниковые законы пропущены. Во всех перечисленных работах не было достаточно четких определений, что понимается под двойником и двойниковым законом. По этой причине ни один из опубликованных выводов двойников не является достаточно полным. Рассмотрение симметрии двойников и двойниковых законов начнем с определений.

Как было уже отмечено в определениях Е. С. Федорова, Г. Чермака и П. Хартмана (цит. выше), для кристаллов, образующих двойник, обязательным условием является совпадение двух одноименных плоскостей, причем одноименные ряды, лежащие в этих плоскостях, также совпадают (параллельны). При этом не было замечено, что при таком совпадении плоскостей и рядов образуется обязательно новая плоская группа симметрии, являющаяся надгруппой (вдвое большего порядка) исходной односторонней плоской группы. Последнее было учтено в работе В. А. Мокиевского и др. [1966 г.]. Однако авторы не заметили, что и при несовпадении одноименных рядов, лежащих в параллельных одноименных плоскостях, также могут возникать плоские группы (односторонние и двусторонние) симметрии, представляющие собой как бы границы кручения. Поэтому выведенные ими плоские двойниковые группы содержали пропуски и число законов двойникового ряда классов симметрии оказалось неполным, удовлетворяющим только определению П. Хартмана.

В учебной литературе указывается, что двойником называется такой сросток двух одинаковых кристаллов, компоненты (индивиды) которого могут быть совмещены друг с другом при помощи операций $\bar{1}$, m и 2 . При этом почти нигде не отмечается, что в качестве двойниковых элементов симметрии (элементов симметрии связи компонентов) могут выступать оси 4 , $\bar{4}$, 6 и $\bar{6}$, как это имеет место, например, у кварца (дофинейский двойник и простой двойник Либиша) и, возможно, у некоторых крестообразных двойников ставролита. Для двойника параллельность по меньшей мере двух одноименных плоскостей, принадлежащих к разным компонентам, является условием обязательным, так как в противном случае суммарная симметрия сростка будет 1 , а совпадение наиболее плотных рядов, лежащих в этих плоскостях, вовсе не обязательно. Если определение термина «двойник» не ограничивать областью кристаллических двойников, то можно дать ему следующую формулировку: двойником называется такой сросток двух одинаковых компонентов, группа симметрии которого является надгруппой индекса 2 подгрупп класса симметрии компонентов. Из этого следует, что для вывода групп симметрии двойников знание симметрии границы срастания не обязательно. Сведения о границе срастания в ряде случаев весьма полезны, и все плоские группы симметрии двойниковых границ для кристаллографических классов симметрии компонентов будут выведены. Формула, по которой может быть найдена группа симметрии двойника (или двойниковой границы) G' при известной подгруппе H класса симметрии компонента (или его грани) G , может быть записана так: $G' \cong 2H$.

Применение двухцветных групп для описания симметрии двойников, состоящих из равных компонентов, чисто условно. Подгруппы классической симметрии индекса 2 в этом случае отве-

чают H , а штрихованные операции симметрии являются элементами симметрии связи (двойниковыми элементами). На этот штрих надо смотреть как на условную маркировку, так как на самом деле элементы связи имеют смысл классических операций симметрии.

В данной работе будут рассмотрены в основном только кристаллографические группы симметрии двойников, возможные для каждого кристаллографического класса симметрии компонентов. Объекты некристаллической природы (молекулы, растения и др.) могут образовывать двойники кристаллографической и некристаллографической симметрии. Среди кристаллических сростков, разумеется, можно встретить такие, обобщенная симметрия которых будет отвечать некристаллографическим группам, например 12. Такие образования можно получить при помощи эпитаксиального наращивания кристаллов с симметрией 3 на грани пинакоида кристалла с симметрией $4/m$. Подобные случаи будут рассмотрены в разделе об эпитаксиальных текстурах.

ТАБЛИЦА 9

32 класса симметрии и соответствующие им двухцветные группы

Класс симметрии	Двухцветные группы	Класс симметрии	Двухцветные группы
1 (1)	—	$\bar{4}$ (4)	$\bar{4}'$
$\bar{1}$ (2)	$\bar{1}'$	$\bar{4}2m$ (8)	$\bar{4}'2'm$, $\bar{4}'2'm'$, $\bar{4}'2m'$
2 (2)	$2'$	6 (6)	$6'$
m (2)	m'	$6/m$ (12)	$6'/m'$, $6/m'$, $6'/m$
$2/m$ (4)	$2'/m$, $2'/m'$, $2'/m'$	$6mm$ (12)	$6'mm'$, $6m'm'$
$2mm$ (4)	$2m'm'$, $2'mm'$	622 (12)	$6'22'$, $62'2'$
222 (4)	$22'2'$	$6/mmm$ (24)	$6'/m'mm'$, $6'/mm'm'$, $6'/m'mm'$, $6'/mmm'$, $6'/m'm'm'$
mmm (8)	$mm'm'$, $m'm'm'$, mmm'	$\bar{6}$ (6)	$\bar{6}'$
3 (3)	—	$\bar{6}2m$ (12)	$\bar{6}'2'm$, $\bar{6}'2'm'$, $\bar{6}2'm'$
$\bar{3}$ (6)	$\bar{3}'$	23 (12)	—
$3m$ (6)	$3m'$	$m\bar{3}$ (24)	$m'\bar{3}'$
32 (6)	$32'$	$\bar{4}3m$ (24)	$\bar{4}'3m'$
$\bar{3}m$ (12)	$\bar{3}m'$, $\bar{3}'m'$, $\bar{3}'m'$	432 (24)	$4'32'$
4 (4)	$4'$	$m\bar{3}m$ (48)	$m\bar{3}m'$, $m'\bar{3}'m$, $m'\bar{3}m'$
$4/m$ (8)	$4'/m$, $4'/m'$, $4'/m'$		
$4mm$ (8)	$4'mm'$, $4m'm'$		
422 (8)	$4'22'$, $42'2'$		
$4/mmm$ (16)	$4'/mmm'$, $4'/mm'm'$, $4'/m'mm'$, $4'/m'm'm'$, $4'/m'mmm'$		

Примечание. Числа в скобках показывают порядок группы.

Как известно, число кристаллографических двухцветных групп симметрии (групп смешанной полярности) равно 58. Они соответствуют 29 (32 — 3) классическим группам, так как группы 1, 3 и 23 не имеют подгрупп индекса 2. В табл. 1 приведены подгруппы 32 классов симметрии, а в табл. 9 для каждого кристаллографического класса симметрии показаны его двухцветные аналоги.

Вывод групп симметрии двойников, возможных в каждом классе симметрии компонентов кристаллической природы, начнем с классификации двойников. В действительности порядок вывода был обратным, и изменение его вызвано только удобством изложения.

КЛАССИФИКАЦИЯ ДВОЙНИКОВ, ОСНОВАННАЯ НА ИХ СИММЕТРИИ *

В основу любой классификации материальных объектов кладутся их определенные свойства. В зависимости от этой основы могут быть различные классификации.

В минералогии двойники подразделяются на двойники срастания и прорастания. К первым относят, например, японский двойник кварца, коленчатый двойник рутила и др., а ко вторым — дофинеийский и бразильский двойники кварца. Следует заметить, что такое, чисто морфологическое подразделение двойников не очень точное. Дело в том, что все двойники по существу являются двойниками срастания. В любом двойнике прорастания можно выделить область с границей срастания. Это касается и тех случаев, когда двойникование происходит на микроуровне (рентгеновские двойники). Однако, несмотря на сделанное замечание по поводу условности минералогической классификации, мы считаем ее удобной, так как она во многих случаях дает довольно ясное представление о форме двойникового сростка. Кроме того, понятия о двойниковых срастаниях и прорастаниях будут нами в дальнейшем использованы при рассмотрении точечных групп симметрии двойников и симметрии двойниковых стержней.

Х. Кюръен и И. Ле Корр [79] разделили двойники на двойники по решетчатой мероздрии и двойники по сетчатой мероздрии. К первым относятся такие двойники, группа симметрии которых является надгруппой индекса 2 класса симметрии компонента, а ко вторым — такие двойники, группа симметрии которых является надгруппой того же индекса группы симметрии плоскостей. Такая классификация давала возможность вывести все двойниковые законы, но авторами это сделано не было.

При исследованиях пластичности кристаллов применяется другая классификация двойников. М. В. Классен-Неклюдова и В. Л. Инденбом [18, 21] делят все механические двойники на двойники с изменением формы и на двойники без изменения

* [Мокиевский В. А., 1968 г.]

формы. К первым относятся, например, механические двойники кальцита, а ко вторым — дофинеийский двойник кварца. Здесь уместно отметить, что классификация, основанная на изменении или неизменении формы, является ошибочной. О. Мюгге [94] писал, что изменение формы при двойниковании как нельзя более способствует ее сохранению. Однако это осуществляется только в редких случаях. При двойниковой разориентации, возникающей в результате пластической деформации или других причин, форма компонентов не сохраняется. Переориентировка возникает за счет двойниковой границы, нарушающей форму компонента. В ряде случаев точечная группа симметрии двойника может быть равна группе симметрии компонента, но это вовсе не значит, что форма двойника сохранила форму компонента.

Дофинеийский двойник кварца, приводимый в указанной классификации в качестве примера двойникования без изменения формы, на самом деле демонстрирует противоположное, так как грани ромбоэдра превращаются при двойниковании в грани «гексагональной дипирамиды». При двойниковании по бразильскому закону грани трапецоэдра превращаются в грани «тригонального скаленоэдра». Видимость двойникования без изменения формы можно иллюстрировать примером лейцита, внешняя форма которого отвечает кубической голоэдри, а на самом деле образец состоит из сложных двойников моноклинных компонентов. Такие параморфозы возникают, как известно, при полиморфных превращениях. Двойникование с «изменением формы» нередко рассматривается как разновидность «трансляционного скольжения», сопровождаемого «коллективным перемещением атомов в каждой элементарной ячейке» и приводящего к изменению ориентировки решетки. Однако при коллективном перемещении атомов переориентировка решетки наблюдается и у таких кристаллов, которые (по М. В. Классен-Неклюдовой) не могут деформироваться путем двойникования «с изменением формы», например у кристаллов хлористого натрия.

Такая точка зрения, видимо, возникла потому, что для кристаллов класса $m\bar{3}t$ считался возможным лишь шпинелевый двойник, вероятность образования которого при пластической деформации весьма мала. Другие двойниковые переориентировки в кристаллах типа хлористого натрия в большинстве случаев исследователями не признавались. Двойникование всегда сопровождается поворотом решетки. Скольжение может принимать участие в процессе двойникования в качестве его составной части, но поворот решетки обязателен. Таким образом, приходим, казалось бы, к тривиальному выводу, что при двойниковании кристаллическая структура компонентов двойника сохраняется, а изменяется лишь их форма и взаимная ориентировка. При пластической деформации кристаллическое вещество стремится сохранить свою природу и для осуществления этого возникают границы, приводящие либо к двойниковым, либо к недвойниковым переориентировкам. Элементарные процессы, приводящие к переориентиров-

кам, могут быть различными, но матрица в виде кристаллической решетки играет в этих процессах главную направляющую роль.

Предлагаемая нами [Мокиевский В. А., 1968 г.] классификация базируется на некоторых особенностях двойников, связанных с их симметрией. Напомним, что каждая двухцветная группа симметрии двойника содержит одноцветную (классическую) подгруппу симметрии вдвое меньшего порядка. Элементы симметрии этих подгрупп являются общими для обоих компонентов двойника и, следовательно, образуют подгруппу класса симметрии кристаллов, составляющих двойник. Если компоненты двойника имеют только одну общую одноцветную ось симметрии, то вращение кристаллов вокруг этой оси на произвольный угол может не изменить группы симметрии двойника.

Например, для кристаллов класса 4 возможны двойники с симметрией $4/m'$, $4m'm'$, $4_2'2'$, $2'$ и m' . Первые три двойника характеризуются тем, что оси четвертого порядка компонентов совпадают. В первом случае перпендикулярно к 4 проходит двойниковая плоскость и оба кристалла (правый и левый) как бы жестко закреплены этой плоскостью. Иначе говоря, если один из кристаллов повернуть вокруг 4 или другого направления на произвольный угол, то указанная плоскость симметрии m' (001) исчезнет, или образуется новый двойник с другой симметрией, или недвойниковый сросток. Поворот вокруг 4 приведет к недвойниковой взаимной ориентировке обоих кристаллов, хотя плоскости {001} у них будут общими. Поворот на произвольный угол вокруг любого направления, нормального к 4, т. е. параллельного m' , приведет к новому двойниковому положению с симметрией m' . То обстоятельство, что при таком повороте плоскость симметрии сохранится, хотя и изменит свое положение (станет {hkl}), вытекает из элементарных теорем кристаллографии и будет показано несколько позже. Двойники этого типа отличаются от двойника $4/m'$ тем, что плоскость двойникования (hkl) может иметь любой численный символ и при вращении на произвольный угол (кроме 360°) вокруг нормали к 4 не изменяется группа симметрии. При повороте на 360° возникнет новый двойник с симметрией $4m'm'$, который не будет менять группу симметрии при вращении компонентов двойника на произвольный угол вокруг 4. Существуют и такие двойники (например, шпинелевый в классе $m\bar{3}m$), которые не допускают вращения компонентов без изменения двойниковой группы симметрии.

Сказанное дает основание разделить все двойники на два типа: жесткие и нежесткие. Жесткими двойниками назовем такие, которые при вращении одного компонента относительно другого вокруг любого направления на произвольный угол изменяют двойниковую группу симметрии или превращаются в недвойниковые сростки. Нежесткими двойниками будем называть такие, которые допускают вращение одного компонента относительно другого вокруг определенных направлений без изменения двойниковой группы симметрии. Среди перечисленных двойников для класса 4

жестким является только один $4/m'$. Двойники $4m'm'$ и $42'2'$ допускают вращение компонентов на произвольный малый угол вокруг 4 без изменения двойниковой группы симметрии. Двойник с симметрией $2'$ допускает вращение вокруг нормали к $2'$ также без изменения двойниковой группы симметрии.

Возникает вопрос, по каким признакам подразделить все 58 групп симметрии двойников на жесткие и нежесткие. Ответ на поставленный вопрос довольно элементарен. Жесткие двойниковые группы симметрии должны содержать такие одноцветные подгруппы, ориентировка которых в кристалле определяется двумя (тремя) направлениями. Нежесткие двойники должны содержать такие одноцветные подгруппы, ориентировка которых определяется одним направлением в кристалле или вообще не связана ни с каким направлением. К последним относятся только две одноцветные группы симметрии 1 и $\bar{1}$. В табл. 10 приведены одноцветные подгруппы двойниковых групп, которые обеспечивают жесткость или нежесткость двойника. Всего таких подгрупп для кристаллографических групп симметрии двойников 29 (32 — 3 группы: $4/mmm$, $6/mmm$, $m\bar{3}m$). 16 жестких подгрупп в комментариях не нуждаются, а 13 нежестких в некоторых случаях могут дать жесткие двойники. Эти случаи отмечены в скобках в табл. 10. Если нежесткая подгруппа входит в состав двойниковой группы, содержащей $\bar{1}'$, то двойник становится жестким. Кроме того, это произойдет и в том случае, когда к нежесткой осевой подгруппе добавляется перпендикулярная плоскость m' (например, $3 + \perp m' = \bar{6}'$). Помимо этого, жесткими надгруппами будут еще и те, для образования которых необходим поворот кристалла с нежесткой подгруппой на определенный угол (90 или 60°). Это будут двойники с симметрией $4'$, $\bar{4}'$, $4'/m$, $6'$, $6'/m$ и $6'/m'$.

ТАБЛИЦА 10

Одноцветные подгруппы двойниковых групп симметрии

Жесткие двойники	Нежесткие двойники
$2mm$, 222 , mmm , $3m$, 32 , $\bar{3}m$, $4mm$, 422 , $\bar{4}2m$, $6mm$, 622 , $\bar{6}2m$, 23 , $m\bar{3}$, $\bar{4}3m$, 432	1 ($\bar{1}'$), $\bar{1}$, 2 ($2/m'$ $4'$, $\bar{4}'$), m ($2'/m$), $2/m$ ($4'/m$), 3 ($\bar{3}'$, $6'$, $\bar{6}'$), $\bar{3}$ ($6'/m'$), 4 ($4'/m'$), $4/m$, $\bar{4}$ ($4'/m'$), 6 ($6/m'$), $6/m$, $\bar{6}$ ($6'/m'$)

В табл. 11 приведен список жестких и нежестких групп симметрии двойников. В третьем столбце таблицы указано направление, при повороте вокруг которого на произвольный малый

угол компонента двойника двойниковая группа симметрии не меняется. Данная таблица является новой классификацией двойников. Всего имеется 40 жестких кристаллографических групп симметрии двойников и 18 нежестких. Последние можно разделить в свою очередь на «полужесткие» и «мягкие». Такое дополнительное деление вытекает из элементарных теорем кристаллографии, показывающих, что при повороте фигуры вокруг нормали к ее четной оси симметрии на произвольный малый угол она займет новое положение, связанное с исходным осью второго порядка ($2'$), проходящей по биссектрисе угла поворота. Если же поворот фигуры осуществляется вокруг направления, проходящего вдоль плоскости симметрии, то новое положение ее будет связано с исходным новой плоскостью симметрии (m'), проходящей по биссектрисе угла поворота.

ТАБЛИЦА 11

Классификация двойников

Жесткие	Нежесткие	Ось вращения компонента
$\bar{1}'$, $2'/m$, $2/m'$, $m'm'm'$, mmm' ,	$2'$	$\perp 2'$
$\bar{3}'$, $\bar{3}'m'$, $\bar{3}'m$, $4'$, $4/m'$, $4'/m$, $4'/m'$,	m'	$\parallel m'$
$4' mm'$, $4'22'$, $4'/mmm'$, $4'/m'mm'$,	$2'/m'$	$\perp 2'$
$4'/m'm'm'$, $4'/m'mm'$, $\bar{4}'$, $\bar{4}'2'm$,	$2m'm'$	2
$\bar{4}'2m'$, $6'$, $6'/m'$, $6/m'$, $6'/m$, $6mm'$,	$2'mm'$	$\perp m$
$6'22'$, $6'/m'mm'$, $6'/m'mm'$, $6'/m'mm'$,	$22'2'$	2
$6'/m'm'm'$, $\bar{6}'$, $\bar{6}'2'm$, $\bar{6}'2m'$, $m'\bar{3}'$,	$mm'm'$	2
$\bar{4}'3m'$, $4'32'$, $m\bar{3}m'$, $m'\bar{3}'m$, $m'\bar{3}'m'$	$3m'$	3
	$32'$	3
	$\bar{3}m'$	$\bar{3}$
	$4m'm'$	4
	$42'2'$	4
	$4/mm'm'$	4
	$\bar{4}2'm'$	$\bar{4}$
	$6m'm'$	6
	$62'2'$	6
	$6/mm'm'$	6
	$\bar{6}2'm'$	$\bar{6}$

Здесь уместно вспомнить слова М. В. Ерофеева [1871 г.]: «Частный случай непараллельного срастания есть двойники, где одно неделимое оборачивается относительно другого на 180° вокруг нормали к какой-нибудь существующей или кристаллографической возможной плоскости. Если возможно предположить этот правильный, установившийся в кристаллографии, законный вид срастания неделимых, то возможно предположить и другой, менее правильный, чем предыдущий, но все-таки представляющий некоторую закономерность. Таким образом, я могу представить, что плоскость срастания неделимых кристаллов есть плоскость известного и при том самого обыкновенного пояса их, величина

же угла вращения не равна 180° , а очень мала. Неделимые кристалла, сросшиеся таким образом, имеют параллельными только те плоскости поясов, в которых они срослись; все остальные, как плоскости поясов, так и плоскости кристаллографических форм их, непараллельны. Таким образом, это непараллельное срастание неделимых составляет как бы двойниковое срастание малого угла, где двойниковая ось есть нормаль к плоскости пояса, в котором происходит срастание». Из этого видно, что М. В. Ерофеев пытался расширить тогдашнее представление о двойниках, выражаясь современным языком, ввел понятие о малоугольных двойниковых границах.

Из сказанного вытекает, что «мягкие» двойники могут существовать только в тех классах симметрии, где есть четные оси и плоскости симметрии, т. е. во всех кристаллографических классах симметрии, кроме 1 , $\bar{1}$, 3 и $\bar{3}$.

«Полужесткие» двойники требуют предварительного поворота компонентов двойника из параллельного положения на 180° вокруг некоторых направлений или предварительного отражения в плоскости двойникового направления. После этих операций двойник может стать «мягким», т. е. дальнейшее вращение компонентов вокруг нормали к $2'$ или вокруг направления, лежащего в m' , может не изменить двойниковой группы симметрии. Отсюда ясно, что поворот компонентов двойника вокруг нормали к 4 приведет к недвойниковому положению, так как $4' \neq 2'$. Различные повороты компонентов двойника будут рассмотрены отдельно.

ВЫВОД ТОЧЕЧНЫХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ГРУПП СИММЕТРИИ ДВОЙНИКОВ, ВОЗМОЖНЫХ ДЛЯ КАЖДОГО КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОГО КЛАССА СИММЕТРИИ КОМПОНЕНТА *

Вывод точечных групп симметрии двойников (G') на основании данного выше определения осуществляется очень просто. Для каждого класса симметрии компонента (G) выписываются все подгруппы (H), включая тривиальные, а затем находятся их надгруппы вдвое большего порядка. Для этого удобно пользоваться табл. 1 или стереографическими проекциями кристаллографических классов симметрии из учебных пособий. Некоторая особенность вывода заключается в том, что для 11 centrosymmetric классов отбираются только centrosymmetric подгруппы, так как центр симметрии всегда будет общим для обоих компонентов двойников «прорастания». Если G' представляет собой жесткую двойниковую группу, является подгруппой другой найденной жесткой группы и совпадает с ней по ориентировке, то G' должна быть вычеркнута. Так, например, для α -кварца находим три группы симметрии двойников, представляющие собой надгруппы его класса симметрии: $\bar{3}'m'$, $6'22'$, $\bar{6}'2m'$. Все три являются жесткими

* [Мокиевский В. А., 1967 г.].

Законы двойникования кристаллов

Класс симметрии компонентов	Жесткие	Нежесткие	
		В	
		Зональные двойники	Двойники 3-й группы
		1	2
А	Б		
1	$\bar{1}'$ (1)	—	$2'$ (2), m' (3); любое направление
$\bar{1}$	—	—	$2'/m'$ (4); любое направление
m	$2'/m$ (5)	—	$2' mm'$ (6); $2' - [h0l]$ $2'$ (7), m' (8); любое направление, кроме [010] и [h0l]
2	$2/m'$ (9), $4'$ (10), $\bar{4}'$ (11)	$22'2'$ (12), $2m'm'$ (13)	$2'$ (14), m' (15); любое направление, кроме [010] и [h0l]
$2/m$	$4'/m$ (16)	$mm'm'$ (17)	$2'/m'$ (18); любое направление, кроме [010] и [h0l]
$2mm$	mmm' (19), $4' mm'$ (20), $\bar{4}'2'm$ (21)	$22'2'$ (22), $2m'm'$ (23)	$2' mm'$ (24, 25); $2' - [h0l]$ и $[0kl]$ $2'$ (26), m' (27); [hkl]
222	$m'm'm'$ (28), $4'22'$ (29), 30, 31), $\bar{4}'2m'$ (32, 33, 34)	$22'2'$ (35, 36, 37), $2m'm'$ (38, 39, 40)	$2'$ (41), m' (42); [hkl]
mmm	$4'/mmm'$ (43, 44, 45)	$mm'm'$ (46, 47, 48)	$2'/m'$ (49); [hkl]
3	$\bar{3}'$ (50), $6'$ (51), $\bar{6}'$ (52)	$32'$ (53), $3m'$ (54)	$2'$ (55), m' (56); [hk \bar{l}]

$\bar{3}$	$6'm'$ (57)	$\bar{3}m'$ (58)	$2'/m'$ (59); [$hk\bar{i}l$]
$3m$	$\bar{3}'m$ (60), $6'mm'$ (61), $\bar{6}'2'm$ (62)	$32'$ (63), $3m'$ (64)	$2'mm'$; (65); $2' - [h0\bar{h}l]$ $2'$ (66) (67) } [$hk\bar{i}l$], m' (68, 69) } [$hh2\bar{h}l$]
32	$\bar{3}'m'$ (70), $6'22'$ (71) $\bar{6}'2m'$ (72), $4'$ (73), $\bar{4}'$ (74)	$32'$ (75), $3m'$ (76), $2m'm'$ (77), $22'2'$ (78)	$2'$ (79, 80) } [$hk\bar{i}l$] m' (81, 82) } [$hh2\bar{h}l$]
$\bar{3}m$	$6'/m'mm'$ (83), $4'/m$ (84)	$\bar{3}m'$ (85), $mm'm'$ (86)	$2'/m'$ (87, 88); [$hk\bar{i}l$], [$hh2\bar{h}l$]
4	$4/m'$ (89)	$4m'm'$ (90), $42'2'$ (91)	$2'$ (92), m' (93); [hkl]
$4/m$	—	$4/mm'm'$ (94)	$2'/m'$ (95); [hkl]
$4mm$	$4/m'mm$ (96)	$42'2'$ (97), $4m'm'$ (98)	$2'mm'$ (99, 100); $2' - [h0l]$ и [hhl] $2'$ (101), m' (102); [hkl]
422	$4/m'm'm'$ (103), $4'22'$ (104) (105), $\bar{4}'2m'$ (106, 107)	$42'2'$ (108), $4m'm'$ (109), $2m'm'$ (110) (111), $22'2'$ (112, 113)	$2'$ (114), m' (115); [hkl]
$4/mmm$	$4'/mmm'$ (116, 117)	$4/mm'm'$ (118), $mm'm'$ (119, 120)	$2'/m'$ (121); [hkl]
$\bar{4}$	$4'/m'$ (122)	$\bar{4}2'm'$ (123)	$2'$ (124), m' (125); [hkl]
$\bar{4}2m$	$4'/m'mm'$ (126), $4'22'$ (127), $\bar{4}'2m'$ (128)	$\bar{4}2'm'$ (129), $2m'm'$ (130), $22'2'$ (131)	$2'mm'$ (132); $2' - [hhl]$ $2'$ (133), m' (134); [hkl]
6	$6/m'$ (135)	$6m'm'$ (136) $62'2'$ (137)	$2'$ (138), m' (139); [$hk\bar{i}l$]

Класс симметрии компонентов	Жесткие		Нежесткие	
	А	Б	В	
			Зональные двойники	Двойники 3-й группы
			1	2
$6/m$	—	$6/mm'm'$ (140)	$2'/m'$ (141); [$hk\bar{i}l$]	
$6mm$	$6/m'mm$ (142)	$6m'm'$ (143) $62'2'$ (144)	$2'mm'$ (145, 146); $2' - [h0\bar{h}l]$ [$hh2\bar{h}l$] $2'$ (147), m' (148); [$hk\bar{i}l$]	
622	$6'm'm'm'$ (149), $4'22'$ (150, 151), $\bar{4}'2m'$ (152, 153)	$6m'm'$ (154), $62'2'$ (155), $22'2'$ (156, 157) $2m'm'$ (158, 159)	$2'$ (160), m' (161); [$hk\bar{i}l$]	
$6/mmm$	$4'/mmm'$ (162, 163)	$6/mm'm'$ (164) $mm'm'$ (165, 166)	$2'/m'$ (167); [$hk\bar{i}l$]	
$\bar{6}$	$6'/m$ (168)	$\bar{6}2'm'$ (169)	$2'$ (170), m' (171); [$hk\bar{i}l$]	
$\bar{6}2m$	$6'/mmm'$ (172), $4'mm'$ (173), $\bar{4}'2'm$ (174)	$\bar{6}2'm'$ (175), $2m'm'$ (176), $22'2'$ (177)	$2'mm'$ (178); $2' - [hh2\bar{h}l]$ $2'$ (179), m' (180); [$hk\bar{i}l$]	
23	$m'\bar{3}'$ (181), $\bar{4}'3m'$ (182), $4'32$ (183), $6'$ (184), $\bar{6}'$ (185)	$3m'$ (186), $32'$ (187), $2m'm'$ (188), $22'2'$ (189)	$2'$ (190, 191, 192), m' (193, 194, 195); [hkl], кроме \perp [111]; [hhl], [llh], кроме [112]	
$m\bar{3}$	$m\bar{3}m'$ (196), $6'/m'$ (197)	$\bar{3}m'$ (198a), (198b), $mm'm'$ (199)	$2'/m'$ (200, 201, 202); [hkl], кроме \perp [111]; [hhl] [llh], кроме [112]	
$\bar{4}3m$	$m'\bar{3}'m$ (203), $6'mm'$ (204), $\bar{6}'2'm$ (205)	$\bar{4}2'm'$ (206), $3m'$ (207), $32'$ (208)	$2'mm'$ (209, 210); $2' - [hhl]$ [llh], кроме [112] $2'$ (211), m' (212); [hkl], кроме \perp [111]	
432	$m'\bar{3}'m'$ (213), $6'22'$ (214), $\bar{6}'2m'$ (215), $4'22'$ (216), $\bar{4}'2m'$ (217)	$4m'm'$ (218), $42'2'$ (219), $3m'$ (220), $32'$ (221), $2m'm'$ (222), $22'2'$ (223)	$2'$ (224), m' (225); [hkl], кроме \perp (111)	
$m\bar{3}m$	$6'/m'mm'$ (226), $4'/mmm'$ (227)	$\bar{3}m'$ (228), $4'/mm'm'$ (229), $mm'm'$ (230)	$2'/m'$ (231); [hkl], кроме \perp [111]	

и не включают друг друга, представляя собой соответственно бразильский, дофинеийский и простой двойник Либиша. Для подгруппы 3 находим следующие группы симметрии двойников: $3m'$, $32'$, $6'$ и $\bar{6}'$. Две последние должны быть вычеркнуты, так как они жесткие и являются двухцветными подгруппами $6'22'$ и $\bar{6}'2m'$, с которыми совпадают по ориентировке. Группы $3m'$ и $32'$ являются нежесткими и представляют собой возможные кварцевые двойники. По подгруппе 2 выводятся следующие двойниковые группы симметрии: $2m'm'$, $22'2'$, $4'$ и $\bar{4}'$, по подгруппе 1—2' и m' , представляющие собой широко известные японские двойники. Таким образом, для α -кварца возможны следующие двойниковые группы симметрии: $\bar{3}'m'$, $6'22'$, $\bar{6}'2m'$, $32'$, $3m'$, $2m'm'$, $22'2'$, $4'$, $\bar{4}'$, $2'$ и m' .

В качестве второго примера рассмотрим двойники кристаллов класса $m\bar{3}m$. Поскольку не существует кристаллографических групп симметрии, включающих группу 48-гранника в качестве подгруппы, то и двойников по тривиальной подгруппе $m\bar{3}m$ нет. Центросимметричными собственными подгруппами данного класса являются: $m\bar{3}$, $\bar{3}m$, $\bar{3}$, $4/mmm$, $4/m$, mmm , $2/m$ и $\bar{1}$. Первая подгруппа не дает двойника, так как ее надгруппой индекса 2 является сам исходный класс симметрии. Вторая подгруппа $\bar{3}m$ имеет только одну надгруппу 24-го порядка $6'/m'mm'$, которая описывает симметрию шпинелевого двойника. Третья подгруппа $\bar{3}$ имеет две надгруппы 12-го порядка: $\bar{3}m'$ и $6'/m'$. Первая отвечает нежесткой группе симметрии двойника, а вторая — жесткой и должна быть вычеркнута, так как является подгруппой группы симметрии шпинелевого двойника. Подгруппе $4/mmm$ отвечает некристаллографическая надгруппа 32-го порядка $8'/mmm'$, которая здесь рассматриваться не будет. Подгруппе $4/m$ отвечает только одна кристаллографическая надгруппа $4'/mm'm'$, которая и является нежесткой группой симметрии двойника. По подгруппе mmm находим только одну (жесткую) группу симметрии 16-го порядка $4'/mmm'$, являющуюся группой симметрии возможного двойника. Подгруппе $2/m$ соответствуют две надгруппы индекса 2 — $mm'm'$ и $4'/m$. Первая отвечает возможной симметрии двойника, а вторая должна быть вычеркнута, так как она является жесткой и вошла в двойник с симметрией $4'/mm'm'$. Последняя подгруппа имеет только одну надгруппу удвоенного порядка $2'/m'$, которая и является нежесткой группой симметрии возможного двойника с общей гранью (hkl) . Для кристаллов класса $m\bar{3}m$ возможны двойники следующих точечных кристаллографических групп симметрии: $6'/m'mm'$, $\bar{3}m'$, $4'/mm'm'$, $4'/mmm'$, $mm'm'$, $2'/m'$. Для быстроты отыскивания подгрупп двухцветных групп симметрии можно использовать соответствующие таблицы в работе В. А. Копчика [22].

Результаты вывода возможных кристаллографических групп симметрии двойников для компонентов всех 32 кристаллографических классов приведены в табл. 12. Неповторяющихся кристаллографических групп симметрии двойников, как и следовало ожидать, 58, а, учитывая повторения для разных классов симметрии компонентов, — 192. Общим для всех классов симметрии является то, что компоненты ацентрических классов дают обязательно двойники с симметрией $2'$ и m' , а компоненты centrosимметричных классов — двойники с симметрией $2'/m'$.

СИММЕТРИЯ ДВОЙНИКОВЫХ СТЕРЖНЕЙ (ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКИХ ДВОЙНИКОВ)

Компонент двойника срастания можно рассматривать как звено бесконечной цепи, для описания которой применимы с теми же оговорками двухцветные группы симметрии стержней [Шубников А. В., 1959 г.]. Наличие у полисинтетических двойников элементов бесконечной симметрии неоднократно отмечалось в литературе [9, 15, 97].* Для каждого конкретного случая симметрия полисинтетического двойника легко находится из его точечной группы путем добавления трансляции по соответствующему направлению, если таковое может быть достаточно надежно определено. Нужно иметь в виду только одно обстоятельство, ограничивающее число двухцветных групп симметрии стержней, которые описывают симметрию полисинтетических двойников. Эти группы могут иметь только следующие двухцветные винтовые оси симметрии: $2_1'$, $4_2'$ и $6_3'$. Остальные винтовые оси симметрии (3_1 , 3_2 , 4_1 , 4_3 , 6_1 , 6_2 , 6_4 , 6_5) могут возникнуть только в результате образования комплексов. При добавлении трансляции по заданному направлению в точечной группе симметрии двойника все нештрихованные элементы симметрии точечной двойниковой группы остаются одноцветными, за исключением тех, которые косо расположены к оси стержня. Штрихованные элементы симметрии связи, совпадающие с осью стержня, превращаются при трансляции в двухцветные элементы бесконечной симметрии. Штрихованные элементы симметрии, нормальные к оси стержня, входят в состав плоской группы симметрии границы срастания, являющейся двухцветной подгруппой группы симметрии двойника. Если группа симметрии двойника содержит $\bar{1}'$, то все границы срастания centrosимметричны. У centrosимметричных кристаллов все границы, как двойниковые, так и недвойниковые, центра не содержат.

Поскольку при исследовании полисинтетических двойников кристаллов минералов и искусственных соединений, а также доменных структур, насколько нам известно, симметрия стержней

* См. также [Шафрановский И. И., Мокиевский В. А., 1961 г.; Шафрановский И. И., Мокиевский В. А., Афанасьев И. И., 1965 г.; Мокиевский В. А., 1967 г.] — *Ред.*

не принимается во внимание, считаем полезным привести все возможные по симметрии стержни, которые могут встретиться при полисинтетическом двойниковании кристаллов. В качестве примера найдем возможные группы симметрии стержней для полисинтетических двойников плагиноклазов (класс симметрии компонента $\bar{1}$). Точечная симметрия двойников плагиноклазов описывается только одной группой $2'/m'$. Здесь принципиально возможно три направления трансляции: 1) вдоль $2'$, 2) вдоль m' и 3) косо к $2'$ и m' . Условимся в записи симметрии стержней косою чертой отделять элементы симметрии, совпадающие с осью стержня, от элементов, нормальных к оси стержня. Буквой a будем обозначать двухцветную плоскость скользящего отражения, параллельную оси стержня. Тогда в первом случае (трансляция вдоль $2'$) стержень будет обладать симметрией $2'/m'$, во втором случае — $a'/2'$, а в третьем — $\bar{1}$. Соответственно границы срастания, если они проходят нормально к оси стержня, будут отвечать трем группам: m' , $2'$ и $\bar{1}$. Рассмотрим еще один пример с широко известным шпинелевым двойником, компоненты которого относятся к классу $m\bar{3}m$. Симметрия такого двойника отвечает группе $6'/m'mm'$. Здесь возможно семь направлений трансляций: 1) вдоль $6'$, 2) вдоль 2 , 3) вдоль $2'$, 4) вдоль m' , нормальной к $6'$, 5) вдоль m , параллельной $6'$, 6) вдоль m' , параллельной $6'$, и 7) вдоль косою направления. Остановимся только на первом случае, который может быть изображен колонкой из октаэдров, иллюстрирующих плотнейшую гексагональную упаковку. Такой стержень отвечает симметрии $6'_3 ma/22'm'$. Граница срастания будет обладать группой симметрии $6'_2m$, являющейся плоской подгруппой симметрии стержня. Подобные двойниковые стержни нередко встречаются при выращивании кристаллов германия и кремния методом вытягивания из расплава.

Остановимся еще на одном примере двойниковых стержней кристаллов сегнетовой соли, возникающих при фазовых переходах второго рода и существующих в интервале температур между нижней и верхней точками Кюри. При переходе через точку Кюри кристалл с симметрией 222 распадается на полисинтетические двойники, компоненты которых имеют симметрию 2 с углом $\beta = 3'$ [Классен-Неклюдова М. В., Чернышева М. А., Штернберг А. А., 1948 г.]. Симметрия такого двойника $22'2'$, причем нештрихованная 2 параллельна $[100]$ ромбической модификации, а $2'$ проходят параллельно $[010]$ и $[001]$ исходного кристалла. Оси стержней параллельны $2'$ и имеют симметрию $2'_1/2'_2$.

Число различных по симметрии двойниковых стержней для данной точечной группы симметрии двойника определяется числом различных по симметрии простых форм в данной двухцветной группе. Так, в двухцветной группе $6'/m'mm'$ грани одной из гексагональных дипирамид одноцветны (m), а другой — двухцветны (m'). Аналогично дело обстоит и с призмами $\{10\bar{1}0\}$ и $\{11\bar{2}0\}$.

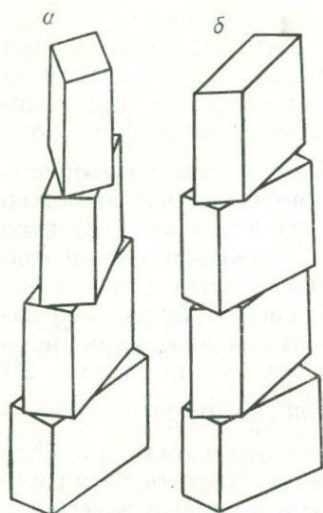


Рис. 58. Полисинтетический двойник кручения из компонентов с симметрией mm (а) и классический полисинтетический двойник из тех же компонентов 3 (симметрия стержня $2a'/2'm$).

двойников кручения, состоящий из компонентов, принадлежащих к ромбической голоэдри. Рядом изображен классический полисинтетический двойник из тех же компонентов, точечная симметрия которого отвечает группе $mm'm'$, а симметрия стержня — $2a'/2'm$. Полисинтетический двойник кручения при произвольном угле поворота теряет плоскости m и a' . Необходимо отметить, что потеря этих элементов симметрии не полная. Они переходят в другие элементы, отсутствующие в классической кристаллографии. Так, плоскость скользящего отражения как бы разрывается на половине и поворачивается вокруг оси закручивания на некоторый угол все время в одну сторону. Симметрические преобразования в системе таких плоскостей должны быть направлены в одну сторону (в сторону закручивания или в противоположную). Такие плоскости можно назвать ступенчатыми, напоминающими торцы винтовой лестницы. Плоскость симметрии превратилась в зеркально-поворотную или инверсионную ось с произвольным постоянным углом поворота, но в одном направлении. Кроме того, здесь имеется винтовая ось симметрии также с произвольным углом поворота. Поскольку закручивание происходило вокруг 2, то эта винтовая ось должна включать в себя ось 2. Центр симметрии в такой системе отсутствует. Новыми элементами симметрии здесь, по сути дела, являются ступенчатая плоскость скользящего отражения и инверсионная ось, которые не приводят

Поэтому вместо пяти случаев симметрии стержней для одноцветного класса $6/mmm$ возникает семь групп. Заметим, что число семь — это максимальное число стержней, выводящееся из двухцветной группы симметрии двойника. Все возможные двойниковые стержни для 58 точечных групп симметрии двойников приводятся в табл. 13, в столбце А которой указана группа симметрии двойника и ее классическая подгруппа вдвое меньшего порядка, а в столбце Б — группы симметрии стержней. Направление оси стержня показано символом грани, перпендикулярной к стержню.

Обратим внимание на существование особых двойниковых стержней, которые могут возникнуть в результате кручения. Такие стержни не представляют собой полисинтетических двойников в их обычном понимании, но по сути дела являются таковыми. На рис. 58 изображен один из возможных полисинтетических

Двойниковые стержни

Группа симметрии двойника	Символ оси стержня и его симметрия
А	Б
$\bar{1}'(1)$	$[hkl] \bar{1}'$
$2'(1)$	$[010] 2'_1, [h0l] 1/2', [hkl] 1$
$m'(1)$	$[010] 1/m', [h0l] a', [hkl] 1$
$2'/m(m)$	$[010] 2'_1/m, [h0l] m/2', [hkl] \bar{1}'$
$2/m'(2)$	$[010] 2/m', [h0l] a'/2, [hkl] \bar{1}'$
$2'/m'(\bar{1})$	$[010] 2'_1/m', [h0l] a'/2', [hkl] \bar{1}$
$2m'm'(2)$	$[001] 2a', [100] a'/2m', [h0l] a', [hko] 1/2, [hkl] 1$
$2'mm'(m)$	$[001] 2'ma', [100] m/2'm', [010] a'/2'm, [h0l] m, [h0l] a', [hko] 1/2, [hkl] 1$
$22'2'(2)$	$[100] 2/2', [010] 2'_1/22', [hko] 1/2', [0hk] 1/2, [hkl] 1$
$mm'm'(2/m)$	$[100] 2a'/2'mm', [010] 2'_1ma'/2m', [hko] a'/2', [0hk] m/2, [hkl] \bar{1}$
$m'm'm'(222)$	$[100] 2a'/2m', [hko] a'/2, [hkl] \bar{1}'$
$mmm'(2mm)$	$[100] 2m/2'm', [010] 2'_1ma'/22'm, [hko] m/2', [0hk] a'/2, [hkl] \bar{1}'$
$\bar{3}'(3)$	$[0001] \bar{3}', [hki0] \bar{1}', [hkil] \bar{1}'$
$3m'(3)$	$[0001] 3a', [11\bar{2}0] [hh\bar{2}hl] a', [10\bar{1}0] 1/m', [hki0] [h0\bar{h}l] [hkil] 1$
$32'(3)$	$[0001] 3/2', [11\bar{2}0] 2'_1, [10\bar{1}0] [h0\bar{h}l] 1/2', [hki0] [hh\bar{2}hl] [hkil] 1$
$\bar{3}m'(\bar{3})$	$[0001] 3a/2', [11\bar{2}0] 2'_1/m', [10\bar{1}0] [h0\bar{h}l] a'/2', [hki0] [hh\bar{2}hl] [hkil] 1$
$\bar{3}'m'(32)$	$[0001] 3a'/2, [11\bar{2}0] 2/m', [10\bar{1}0] [h0\bar{h}l] a'/2, [hki0] [hh\bar{2}hl] [hkil] \bar{1}'$
$\bar{3}'m(3m)$	$[0001] 3m/2', [11\bar{2}0] 2'_1/m, [10\bar{1}0] [h0\bar{h}l] m/2', [hki0] [hh\bar{2}hl] [hkil] \bar{1}'$
$4'(2)$	$[001] 4'_2, [hko] 1/2, [hkl] 1$
$4'/m(2/m)$	$[001] 4'_2/m, [hko] m/2, [hkl] \bar{1}$
$4/m'(4)$	$[001] 4/m', [hko] a'/2, [hkl] 1$
$4'/m'(\bar{4})$	$[001] 4'_2/m', [hko] a'/2, [hkl] \bar{1}'$

А	Б
$4'mm'$ (2mm)	[001] $4'_2ma'$, [100] $m/2m$, [110] $a'/2m'$, [hk0] 1/2, [h0l] m , [hhl] a' , [hkl] 1
$4m'm'$ (4)	[001] $4a'$, [100] [110] $a'/2m'$, [hk0] 1/2, [h0l] [hhl] a' , [hkl] 1
$4'22'$ (222)	[001] $4'_2/22'$, [100] $2/22$, [110] $2'_1/22'$, [hk0] [h0l] 1/2, [hhl] 1/2', [hkl] 1
$42'2'$ (4)	[001] $4/2'$, [100] [110] $2'_1/22'$, [hk0] 1/2, [h0l] [hhl] 1/2', [hkl] 1
$4'/mmm'$ (mmm)	[001] $4'_2ma'/22'm$, [100] $2m/2m$, [110] $2'_1ma'/2m'$, [hk0] [h0l] $m/2$, [hhl] $a'/2'$, [hkl] $\bar{1}$
$4/mm'm'$ (4/m)	[001] $4a'/2m$, [100] [110] $2'_1ma'/22'm'$, [hk0] $m/2$, [h0l] [hhl] $a'/2'$, [hkl] $\bar{1}$
$4/m'mm$ (4mm)	[001] $4m/2m'$, [100] [110] $2'_1ma'/22'm$, [hk0] $a'/2$, [h0l] [hhl] $m/2'$, [hkl] $\bar{1}'$
$4/m'm'm'$ (422)	[001] $4a'/2m'$, [110] [100] $2a'/2m'$, [hk0] [h0l] [hhl] $a'/2$, [hkl] $\bar{1}'$
$4'/m'mm'$ ($\bar{4}2m$)	[001] $4'_2ma'/22'm'$, [100] $2a'/2m'$, [110] $2'_1ma'/22'm$, [hk0] [h0l] $a'/2$, [hhl] $m/2'$, [hkl] $\bar{1}'$
$\bar{4}'$ (2)	[001] $\bar{4}'$, [hk0] 1/2, [hkl] 1
$\bar{4}'2'm$ (2mm)	[001] $\bar{4}'m/2$, [100] $2'_1/22'$, [110] $m/2m$, [hk0] 1/2, [h0l] 1/2', [hhl] m , [hkl] 1
$\bar{4}2'm'$ ($\bar{4}$)	[001] $\bar{4}a'/2'$, [100] $2'_1/22'$, [110] $a'/2m'$, [hk0] 1/2, [h0l] 1/2', [hhl] a' , [hkl] 1
$\bar{4}'2m'$ (222)	[001] $\bar{4}'a'/2$, [100] $2/22$, [110] $a'/2m'$, [hk0] [h0l] 1/2, [hhl] a' , [hkl] 1
$6'$ (3)	[0001] $6'_3$, [hki0] 1/2', [hkil] 1
$6'/m'$ ($\bar{3}$)	[0001] $6'_3/m'$, [hki0] $a'/2'$, [hkil] $\bar{1}$
$6/m'$ (6)	[0001] $6/m'$, [hki0] $a'/2$, [hkil] $\bar{1}'$
$6'/m$ ($\bar{6}$)	[0001] $6'_3/m$, [hki0] $m/2'$, [hkil] $\bar{1}'$
$6'mm'$ (3m)	[0001] $6'_3ma'$, [11 $\bar{2}$ 0] $m/2m'$, [10 $\bar{1}$ 0] $a'/2m$, [hki0] 1/2', [h \bar{h} 2 \bar{h} l] m , [h0 \bar{h} l] a' , [hkil] 1
$6m'm'$ (6)	[0001] $6a'$, [11 $\bar{2}$ 0] [10 $\bar{1}$ 0] $a'/2m$, [hki0] 1/2, [h \bar{h} 2 \bar{h} l] [h0 \bar{h} l] a' , [hkil] 1

A	B
6'22' (32)	[0001] 6' ₃ /22', [1120] 2/2', [1010] 2' ₁ /22', [hki0] [hh2hl] 1/2', [h0hl] 1/2, [hki1] 1
62'2' (6)	[0001] 6/2', [1120] [1010] 2' ₁ /22', [hki0] 1/2, [hh2hl] [h0hl] 1/2', [hki1] 1
6'/m'mm' (3m)	[0001] 6' ₃ ma'/22'm', [1120] 2a'/2'm, [1010] 2' ₁ ma'/22'm', [hki0] [hh2hl] a'/2', [h0hl] m/2 [hki1] 1
6/mm'm' (6/m)	[0001] 6a'/2'm, [1120] [1010] 2' ₁ ma'/22'm', [hki0] m/2, [hh2hl] [h0hl] a'/2', [hki1] 1
6/m'mm (6mm)	[0001] 6m/2'm', [1120] [1010] 2' ₁ ma'/22'm, [hki0] a'/2, [hh2hl] [h0hl] m/2', [hki1] 1'
6/m'm'm' (622)	[0001] 6a'/2m', [1120] [1010] 2a'/2m', [hki0] [hh2hl] [h0hl] a'/2, [hki1] 1'
6'/mmm' (62m)	[0001] 6' ₃ ma'/22'm, [1120] 2m/2'm', [1010] 2' ₁ ma'/22'm, [hki0] [hh2hl] m/2', [h0hl] a'/2, [hki1] 1'
6' (3)	[0001] 6' = 3/m', [hki0] a', [hki1] 1
6'2'm (3m)	[0001] 6'm/2' = 3m/2'm', [1120] 2' ₁ ma', [1010] a'/2'm, [hki0] a', [hh2hl] m, [h0hl] 1/2', [hki1] 1
6'2m' (32)	[0001] 3a'/2m' = 6'a'/2, [1120] 2a', [1010] a'/2m', [hki0] [hh2hl] a', [h0hl] 1/2, [hki1] 1
62'm' (6)	[0001] 6a'/2' = 3a'/2'm, [1120] 2' ₁ ma', [1010] m/2'm', [hki0] m, [hh2hl] a', [h0hl] 1/2', [hki1] 1
m'3' (23)	[100] 2a'/2m', [110] [hk0] a'/2, [111] 3', [hhl] [hkl] 1'
4'3m' (23)	[100] 4'a'/2, [110] a'/2m', [hk0] 1/2, [111] 3a', [hhl] a', [hkl] 1
4'32' (23)	[100] 4' ₂ /22', [110] 2' ₁ /22', [hk0] 1/2, [111] 3/2', [hhl] 1/2', [hkl] 1
m3m' (m3)	[100] 4' ₂ ma'/22'm, [110] 2' ₁ ma'/22'm', [hk0] m/2, [111] 3a'/2', [hhl] a'/2', [hkl] 1
m'3'm (43m)	[100] 4' ₂ ma'/22'm', [110] 2' ₁ ma'/22'm, [hk0] a'/2, [111] 3m/2', [hhl] m/2', [hkl] 1'
m'3'm' (432)	[100] 4a'/2m', [110] 2a'/2m', [hk0] a'/2, [111] 3a'/2, [hhl] a'/2, [hkl] 1'

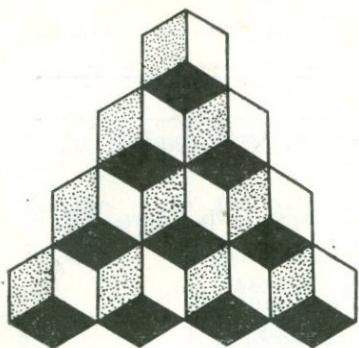


Рис. 59. Слой из двойников корунда (по В. С. Соболеву [39]).

закручивании (с малым шагом винта) наблюдается поворот компонентов вокруг направления, нормального к основной оси закручивания. Углы этих поворотов обычно невелики. Дополнительное закручивание сильно усложняет расшифровку таких образований с позиции симметрии и двойникования. Нами исследовались такие скрученные кристаллы миллерита, антимонита и др., но окончательные выводы о кристаллографических закономерностях этих образований требуют специальных дополнительных анализов.

Обратим внимание на то, что многие двойники могут быть не замечены, когда стержни имеют симметрию 1 или когда нормально к оси стержня проходят только одноцветные элементы симметрии.

При трансляции в двух направлениях образуются двумерные двойниковые текстуры, симметрия которых описывается бесконечными группами симметрии слоев (рис. 59). При наложении таких текстур друг на друга возникают трехмерные текстуры, классическая симметрия которых описывается федоровскими пространственными группами, а при условии выделения элементов связи штрихом — шубниковскими двухцветными группами симметрии [6, 16, 17, 22]. Сам кристалл представляет собой текстуру из частиц с определенной точечной симметрией, ориентированных друг относительно друга в двойниковом или параллельном положениях. Образование кристаллической решетки (рост кристалла), по сути дела, есть процесс двойникования, комплексобразования и полимеризации.

Двойникование кристаллов представляет собой макроявление, подаренное нам природой для расшифровки микроявлений, проходящих на молекулярном и атомном уровнях. Поэтому нам представляется, что можно создать теорию роста и растворения кристаллов, основанную на теории симметрии. Такая теория могла бы увязать рост и растворение кристаллов с состоянием вещества в растворе, расплаве или газовой фазе. В предкристаллизационный период (пересыщенный раствор) вещество должно

всю систему в полное совмещение при одноактной операции, а совмещают только ее отдельные части. При многократном повторении операций симметрии эти элементы заменяют винтовую ось. Такие элементы симметрии тождественны элементам совмещения по В. В. Нардову [30].

Обычно такого рода скрученные «кристаллы» имеют компоненты очень небольших размеров. Только у закрученных вокруг 2 дофинеи-ских двойников кварца можно макроскопически различить отдельные кристаллы. При сильном за-

удовлетворять такой структуре, которая легко при наличии матрицы (затравки) перешла бы в кристаллическую фазу. При этом, возможно, удастся предвидеть и формы растущих кристаллов. Существующие же теории роста кристаллов не позволяют сделать таких предсказаний, и практики, занимающиеся выращиванием кристаллов, ими почти не пользуются. В настоящее время уже строятся предположения о структурных особенностях растворов и делаются попытки увязать их с ростом твердой фазы. Надеемся, что это направление увенчается успехом.

На органических кристаллах можно наглядно иллюстрировать двойниковые трехмерные текстуры из молекул известной симметрии. В качестве примера рассмотрим структуру триазидциануровой кислоты [20]. Эта структура удобна тем, что молекула в кристалле не изменяет своей симметрии $\bar{6}$ ($3/m$). Федоровская группа $P6_3/m = C_{6h}^2$. Поскольку $Z = 2$, в элементарной ячейке молекулы должны быть либо в параллельном, либо в двойниковом положениях. Первое, очевидно, отпадает, хотя бы потому, что пространственная группа содержит центр симметрии, отсутствующий у молекулы. Для класса симметрии $\bar{6}$ молекулы возможны двойники следующих точечных групп симметрии (табл. 12): $6'/m$, $\bar{6}2'm'$, $2'$, m' . Данной пространственной группе удовлетворяет первая, содержащая центр симметрии, группа симметрии двойника.

Двойниковый стержень с осью вдоль $6'$ имеет симметрию $6_3'/m$ (табл. 13). Симметрия такого стержня включает $2'_1$, $\bar{1}$ и $\bar{6}$. Первые два являются элементами связи компонентов (молекул), а последний описывает симметрию самой молекулы. Таким образом, из двойниковой группы симметрии находится пространственная группа, если, разумеется, молекула в решетке не изменяет свою симметрию. Указанная молекула может сохранить свою симметрию и в других пространственных группах, где есть точки с симметрией $\bar{6}$, а именно $P6/m$, $P\bar{6}c2$, $P\bar{6}2m$, $P\bar{6}2c$, $P6/mcc$, $P6/mcst$. Из двойниковых стержней могут быть найдены только те пространственные группы, в которых кратность точек заданной симметрии молекулы равна 2. Если при полиморфизме этого вещества $Z = 2$ сохранится и не изменится симметрия молекулы, то, очевидно, вещество даст кристалл с симметрией $\bar{6}2m$ с соответственными пространственными группами, так как только второй двойник ($\bar{6}2'm'$) может сохранить молекуле ее симметрию.

Другой пример с иодоформом (CHI_3). Здесь молекула с симметрией $3m$ в кристалле в результате деформации снижает свою симметрию до 3. Для класса симметрии 3 компонента возможны двойники с симметрией $\bar{3}$, $6'$, $\bar{6}'$, $32'$, $3m'$, $2'$, m' . Описанная структура принадлежит к пространственной группе $P6_3 = C_6^3$, $Z = 2$. Группе $P6_3$ отвечает только один двойник $6'$. При трансляции вдоль $6'$ возникает стержень с симметрией 6_3 , включающей 3 и элемент связи $2'_1$, которые и образуют структуру данной прост-

ранственной группы. Деформации в структурах могут занизить симметрию молекулы до всех подгрупп ее точечной группы. Для каждой подгруппы известны двойники, число которых ограничено. Поэтому при $Z=2$ число структур, которые может дать молекула, также будет ограниченным.

ЗАКОНЫ ДВОЙНИКОВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Термин «закон двойникования» прочно укоренился в минералогии. Нигде не разъяснено, что понимается под этим термином. Двойники кристаллов минералов получают названия примерно на тех же основаниях, что и сами минералы. Изменять эти названия, видимо, так же бессмысленно, как и названия минералов. Многие из них настолько укоренились, что даже рациональное переименование не будет воспринято широкими кругами исследователей. Несмотря на это, мы попытаемся внести некоторый порядок в понятие «закона двойникования» и покажем, что число этих «законов» конечно.

Несколько слов о названиях «законов двойникования». Нередко двойники называют по той местности, где они были обнаружены впервые: карлсбадский, дофинеийский, бразильский и т. д. Другая серия названий двойников связана с названиями минералов, для которых они были установлены: альбитовый, шпинелевый, флюоритовый и др. Нередко двойники называют по фамилии автора, впервые описавшего их, как, например, двойники кварца: Либиша, Фриделя и др. Часто двойники называют по граням сростания: двойник по (0001) кальцита. Встречаются названия, в которых отражен только внешний вид (облик) двойника: «коленчатый» двойник рутила или касситерита, крестообразный двойник ставролита, «ласточкин хвост» гипса и т. п. Такое разнообразие названий приводит к тому, что запоминание двойниковых «законов» в связи с их значительным количеством становится весьма трудным.

Ни в одной из приведенных разновидностей названий не отражено самого главного для двойника — его точечной группы симметрии и симметрии границ сростания. Следует заметить, что описание двойников при помощи точечных групп стало появляться в учебной литературе совсем недавно [33, 58]. Отсутствие определения термина «закон двойникования» дает повод для открытия неограниченного количества новых «законов». Так произошло с кварцем, для которого уже установлено около 120 «законов» двойникования, и нет никаких оснований считать это число конечным. Из всех разновидностей названий нам представляются самыми рациональными те, в которых есть указания на грани сростания компонентов двойника. Однако в этих названиях не отражается, как кристаллы ориентированы друг относительно друга, особенно в тех случаях, когда граница некогерентная. Обратим внимание на двойники кальцита «по пинакоиду». Если у таких двойников граница (m') точно совпадает с гранью (0001),

то точечная группа симметрии двойника устанавливается легко ($6'/m'mm'$). Если же граница срастания (m') проходит по плоскости ($10\bar{1}0$), то двойник с той же точечной группой симметрии приобретает другой вид и получает новое название двойника «по призме $\{10\bar{1}0\}$ ». На самом деле оба двойника, имеющие одну и ту же точечную группу, представлены стержнями различной симметрии (табл. 13).

У двойников плагиоклазов «законы» двойникования различают по следующим признакам. Указывается грань срастания (общая грань обоих компонентов), направление двойниковой оси ($2'$) или положение двойниковой плоскости (m'). Так, например, для альбитового и карлсбадского законов грань (010) является общей. В случае альбитового закона она служит двойниковой плоскостью (m'), а двойниковая ось ($2'$) нормальна к ней. При карлсбадском законе двойниковая ось параллельна $[001]$. Это различие законов двойникования выдерживается не для всех минералов. Для кварца уже таких тонкостей в названиях не различают. Двойники с плоскостью двойникования, параллельной и перпендикулярной к ($11\bar{2}1$), и с осью двойникования, также параллельной и перпендикулярной к ($11\bar{2}1$), относятся к разновидностям японского двойника.

Таким образом, понятие о законе двойникования является недостаточно строгим. Знание всех возможных законов двойникования представляет определенный интерес для выяснения генезиса минералов. Нередко в литературе описывается генезис кристаллов кварца, тогда как на самом деле речь идет о его двойниках. Часты случаи, когда один и тот же минерал в одном месторождении (или участке) представлен только двойниками по одному закону, а в другом месторождении (или участке) — монокристаллами или двойниками по другому закону. Показательны в этом отношении кристаллы исландского шпата из месторождений одного региона, изученные нами совместно с А. В. Шустовым и С. Н. Самусиной по материалам А. В. Скропышева. Для ряда из этих месторождений характерны двойники прорастания с симметрией $6'/m'mm'$, для других месторождений — двойники с хорошо выраженной плоскостью срастания (0001), описываемые стержнем с симметрией $6_3ma'/22'm'$, для третьих — двойники с симметрией $mm'm'$, где $m' = (01\bar{1}2)$; двойники с $m' = (02\bar{2}1)$ найдены в месторождениях первой и третьей групп. Такие особенности месторождений требуют глубокого геологического и минералогического анализов. Знание всех законов двойникования даст возможность более строго описывать встречающиеся двойники и вскрывать причины их возникновения.

Число законов двойникования можно было бы ограничить числом точечных кристаллографических двойниковых групп симметрии для всех кристаллографических классов симметрии компонента, т. е. числом 192. Но это не удовлетворит минералогов и петрографов, так как для плагиоклазов получится только один

закон $2'/m'$. Число законов можно увеличить, добавив к 192 случаям число стержней, возможных для каждого из этих случаев. Но и это не принесет большой пользы, так как двойники тех же плагноклазов останутся неохарактеризованными. На помощь приходит рассмотренная выше классификация двойников. Все жесткие двойники, как было сказано, характеризуются тем, что ориентировка компонентов друг относительно друга строго фиксирована классической подгруппой двойниковой группы симметрии. Только для сравнительно немногих жестких групп симметрии двойников классическая подгруппа двойниковой группы может иметь две или три ориентировки. Это будет иметь место для компонентов ромбической сингонии (максимум три ориентировки), тетрагональной и гексагональной сингоний (максимум две ориентировки). Среди нежестких двойников имеются такие, которые разрешают вращение компонентов только вокруг определенных осей зон (зональные двойники). Это будут двойники, для которых фиксированной сохраняется только ось одной зоны компонента, и симметрия их может удовлетворять только следующим группам: $22'2'$, $2m'm'$, $mm'm'$, $32'$, $3m'$, $\bar{3}m'$, $42'2'$, $4m'm'$, $4/mm'm'$, $\bar{4}2'm'$, $62'2'$, $6m'm'$, $6/mm'm'$, $\bar{6}2'm'$. Для некоторых из них также возможны максимум три ориентировки в ромбической сингонии и две в тетрагональной и гексагональной сингониях. И, наконец, имеются двойники, которые характеризуются тем, что взаимная ориентировка компонентов не фиксирована ни одним из направлений. Ориентировка двойниковых элементов симметрии (m' и $2'$) может быть в определенных границах произвольной. К таким двойникам относятся двойники с симметрией $2'/m'$, $2'$ и m' .

Особое положение среди двойников занимает двойник с симметрией $2'tm'$, отнесенный к зональным двойникам, так как положение t фиксировано нормалью к ней, но тем не менее $2'$ может совпадать с произвольным направлением, лежащим в t . Каждый двойник с такой симметрией может иметь две ориентировки компонентов, а именно ось $2'$ параллельна общей грани или нормальна к ней (при одной и той же общей грани), независимо от класса симметрии компонента. В дальнейшем эти двойники без особых оговорок будут объединены с предыдущими двойниками. Итак, в первой группе двойников имеется 40 двойниковых групп симметрии, во второй — 14, а в третьей — 4.

Из сказанного видно, что взаимная ориентировка компонентов может служить опорным моментом при рассмотрении законов двойникового кристаллов. Исходя из этого дадим следующее определение термина «закон двойникового»: под законом двойникового понимается ориентировка двойниковой точечной группы симметрии относительно кристаллографических направлений компонента. Если такое определение будет принято, то отпадает необходимость в названиях двойниковых законов. Ясно, что число жестких двойниковых законов будет ограниченным. Число

зональных законов будет также ограниченным, если будет указываться только ось зоны, при повороте вокруг которой симметрия двойника не меняется. Третья группа двойников будет также иметь ограниченное число законов, если кристаллографические направления, с которыми совпадает $2'$ или нормаль к m' , будут записываться в общем виде.

Конкретные символы направлений и общих плоскостей компонентов приведут к бесчисленному числу законов для двойников второй и третьей групп. Поэтому символы направлений будут записываться в общем виде, а параллельные плоскости компонентов вовсе не будут отмечаться. Тогда для кристалла с симметрией 1 возможно только три закона, характеризующиеся следующими группами симметрии двойников: $\bar{1}'$, $2'$ и m' . Первый является жестким, а второй и третий относятся к третьей группе. Законы двойникования, содержащие жесткие группы симметрии, однозначно описываются этими группами, а типы сростаний — симметрией стержней (табл. 13). Для законов жестких двойников необходимо и вполне достаточно отмечать: 1) симметрию компонента, 2) точечную группу симметрии двойника и, если есть необходимость, 3) ориентировку классической подгруппы двойниковой группы симметрии относительно кристаллографических направлений компонента.

Для двойников второй группы в конкретных случаях необходимо указывать ориентировку штрихованных элементов симметрии относительно компонента. Так, например, нежесткий ставролитовый двойник с симметрией $mm'm'$ может иметь три ориентировки одноцветной подгруппы $2/m$, а именно ось 2 может быть $[100]$, $[010]$ и $[001]$. Штрихованные плоскости симметрии могут быть $\{0kl\}$, $\{h0l\}$ и $\{hkk\}$ соответственно, и в конкретных двойниках индексы примут определенные численные значения, например, для двойника, описанного у Э. Дана в «Системе минералогии», одна из штрихованных плоскостей симметрии имеет символ (230). В других случаях, возможно, и не следует стараться находить для описания ориентировки двухцветных элементов симметрии целочисленные индексы, а достаточно указать угол поворота одного компонента относительно другого вокруг одноцветной оси симметрии. Примером могут служить двойники кварца с симметрией $32'$, у которых углы поворота вокруг 3 малы и колеблются в пределах $2-3^\circ$.

Для последней (третьей) группы двойников в конкретных случаях помимо п. 1 и 2 необходимо указывать ориентировку оси $2'$ или нормали к m' . Так, например, альбитовый закон двойника плагиноклаза достаточно однозначно характеризуется либо ориентировкой $2'$ (нормаль ко второму пинакoidу), либо m' — плоскостью (010). При карлсбадском законе, при котором $2'$ параллельна $[001]$, нет необходимости указывать, что общей гранью сростания является (010), так как при такой ориентировке двойниковой оси общими будут все грани зоны $[001]$, которые могут быть гранями сростания, а закон останется карлсбадским, так

как взаимная ориентировка компонентов при этом не изменится.

В табл. 12 записаны законы двойникования для всех 32 классов симметрии компонентов. В столбце А указан класс симметрии компонентов в столбце Б — законы двойникования для первой группы двойников, имеющие жесткие двойниковые группы, в столбце В — законы двойникования для второй и третьей групп двойников, имеющих нежесткие группы симметрии двойников. Столбец В разделен на две колонки 1 и 2. В колонке 1 приводятся законы двойникования для двойников второй группы (зональные двойники 14 групп симметрии), а в колонке 2 — законы двойникования для двойников третьей группы, обладающих симметрией $2'$, m' , $2'/m'$ и $2'mm'$. В колонке 2 помимо группы симметрии двойника указана ее ориентировка относительно компонента при помощи символа направления, совпадающего с двойниковой осью или с нормалью к двойниковой плоскости. В скобках после формул симметрии проставлены порядковые номера законов. Если в скобке стоит два или три номера, то это указывает на две или три ориентировки группы симметрии двойника в данном классе симметрии компонента. Всего законов двойникования 231.

Необходимо особо отметить закон 198 — $\bar{3}m'$, который хотя и не жесткий, но тем не менее он становится как бы жестким, если $2'$ будут лежать в плоскостях $\{110\}$ компонентов, т. е. если поворот компонентов друг относительно друга произошел на 180° вокруг $[112]$. Такой двойник будет аналогичен шпинелевому. Поэтому, чтобы выделить этот случай отдельно, мы отметили его как 198б. Если этот закон считать самостоятельным, то общее число законов увеличится на единицу (232).

РАЗНОВИДНОСТИ ЗАКОНОВ ДВОЙНИКОВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Как было отмечено выше, П. Хартман показал, что ряды с симметрией 1 могут при параллельной ориентировке дать восемь положений, из которых семь отвечают двойникам. Эти семь положений характеризуются группами симметрии 2^1 , 2^2 , 2^3 , m^1 , m^2 , m^3 и $\bar{1}$. Последняя группа симметрии при рассмотрении разновидностей законов двойникования естественно отпадает, так как она возможна для компонентов без классического центра симметрии. Добавление к группам симметрии таких компонентов $\bar{1}$ всегда приведет к жестким двойникам. Взаимная ориентировка компонентов двойника, как было сказано, обусловлена одноцветной подгруппой двойниковой группы симметрии. Четыре группы симметрии двойников (колонка 2 табл. 12) нуждаются в дополнительной характеристике взаимной ориентировки компонентов, так как их одноцветные подгруппы (1 , $\bar{1}$ и m) не определяют однозначно ориентировку двойниковой группы даже относительно одного кристаллографического направления у компонента.

Поэтому для законов двойникования, описываемых этими двойниковыми группами ($2'$, m' , $2'/m'$ и $2'mm'$), следует дополнительно рассмотреть возможные разновидности ориентировок компонентов при двойниковании. Так, например, если компонент двойника имеет симметрию 1 и если грани срастания имеют символ $\{hkl\}$, причем два одноименных ряда $[pqr]$, лежащих в этих плоскостях, параллельны, то возможно шесть случаев такой параллельности: 2^1 , 2^2 , 2^3 , m^1 , m^2 , m^3 . Это и будут разновидности законов двойникования, точечные группы которых запишутся так: $2^1/m^1$, $2^2/m^2$, $2^3/m^3$. Группы симметрии стержней этих разновидностей запишутся соответственно: $2_1/m^1$, $a^1/2_1$, $2_1^2/m^2$, $a^2/2^2$ и т. д.

В качестве второго примера приведем разновидности законов двойникования для компонентов с симметрией 32 (кварц). Здесь $2'$ и нормаль к m' могут иметь символы $[h\bar{k}il]$ и $[hh2\bar{h}l]$ (табл. 12). Грани с симметрией срастания $2'$ и m' могут быть все грани, в которых лежат ряды указанных символов. Чтобы не употреблять одинаковых индексов для граней срастания и лежащих в них рядов, условимся символы граней обозначать, как обычно, буквами h , k , i , l , а ряды, лежащие в них, — буквами p , q , s , r . Ряды $[pqsr]$ и $[pp2\bar{p}r]$ могут быть параллельны только следующим граням: $\{h\bar{k}il\}$, $\{h\bar{k}i0\}$, $\{10\bar{1}0\}$, $\{hh2\bar{h}l\}$ и $\{h0\bar{h}l\}$. Следовательно, разновидности законов двойникования с симметрией $2'$ и m' должны быть рассмотрены для указанных граней срастания. В плоскости $(h\bar{k}il)$ лежат следующие ряды (табл. 14): $[pq\bar{s}r]$, $[pq\bar{s}0]$, $[pp2\bar{p}r]$, $[p0\bar{p}r]$. Если у компонентов двойника совпадают ряды $[pq\bar{s}r]$, то возможны все шесть разновидностей симметрии: 2^1 , 2^2 , 2^3 , m^1 , m^2 , m^3 . Если же совпадают ряды $[pq\bar{s}0]$, то случай 2^1 выпадает, так как он приведет к зональному двойниковому закону с симметрией $32'$ (табл. 12). Здесь же не может быть случая m^1 , так как он приведен к двойнику $3m'$. Случаи 2^3 и m^3 уже были учтены для ряда $[pq\bar{s}r]$. Осталось только еще два возможных случая: 2^2 и m^2 . Оба осуществимы, так как 2^2 и нормаль к m^2 совпадают с рядом $[pq\bar{s}r]$ и являются возможными разновидностями двойников. При совпадении рядов $[pp2\bar{p}r]$ возможны четыре случая: 2^1 и 2^2 , m^1 и m^2 .

Поскольку в минералогической литературе такие разновидности имеют для ряда минералов определенные названия, используемые при описании минералов и горных пород, то имело смысл найти все разновидности законов двойникования для перечисленных выше четырех групп симметрии двойников, возможные для каждого класса симметрии компонентов. Результаты вывода приведены в табл. 14, в столбце А которой указана симметрия компонента, в столбце Б — символ общей грани сдвойникованных кристаллов (грани срастания), в столбце В — символы направлений, лежащих в этих плоскостях, и в столбце Г — разновидности двойниковых законов. Для двойников с симметрией $2'mm'$

Разновидности законов двойникования

А	Б	В	Г	А	Б	В	Г
1	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$	$\bar{3}$	$hk\bar{i}l$	$pq\bar{s}r$	$2^{123}/m^{123}$
$\bar{1}$	hkl	pqr	$2^{123}/m^{123}$			$pq\bar{s}0$	$2^2/m^2$
2	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$			$pp\bar{2}pl$	$2^{12}/m^{12}$
		$p0r$	$2^2, m^2$			$p0\bar{p}r$	$2^{12}/m^{12}$
m	$h0l$	pqr	$2^{12}, m^{12}$		$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}/m^{12}$
	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$		$11\bar{2}0$	$p0\bar{p}r$	$2^{12}/m^{12}$
		$p0r$	$2^2, m^2$		$10\bar{1}0$	$pp\bar{2}pr$	$2^{12}/m^{12}$
	$h0l$	pqr	$2^{12}, m^{12}$				
	$h0l$	$p0r$	2^1mm^3		$hh\bar{2}hl$	$pq\bar{s}r$	$2^{123}/m^{123}$
			2^3mm^1			$pp\bar{2}pr$	$2^1/m^1$
$2/m$	hkl	pqr	$2^{123}/m^{123}$			$pq\bar{s}r$	$2^{123}/m^{123}$
		$p0l$	$2^2/m^2$			$pp\bar{2}pr$	$2^1/m^1$
	$h0l$	pqr	$2^{12}/m^{12}$			$p0\bar{p}r$	$2^{12}/m^{12}$
$2mm$	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$			$pq\bar{s}r$	$2^{123}/m^{123}$
		$pq0$	$2^2, m^2$		$h0\bar{h}l$	$p0\bar{p}r$	$2^1/m^1$
		$p0r$	$2^2, m^2$			$pp\bar{2}pr$	$2^{12}/m^{12}$
	$hk0$	pqr	$2^{12}, m^{12}$			$pq\bar{s}r$	$2^{123}, m^{123}$
	$h0l$	pqr	$2^{12}, m^{12} (2)$		$3m$	$hk\bar{i}l$	$2^{123}, m^{123}$
	$h0l$	$p0l$	$2^1mm^3 (2)$			$pq\bar{s}r$	$2^2, m^2$
			2^3mm^1			$pq\bar{s}0$	$2^{12}, m^{12}$
222	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$			$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$
		$pq0$	$2^2, m^2$			$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
		$p0r$	$2^2, m^2$			$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		$0qr$	$2^2, m^2$			$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$
	$h0l$	pqr	$2^{12}, m^{12} (3)$			$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
mmm	hkl	pqr	$2^{123}/m^{123}$			$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		$pq0$	$2^2/m^2$		$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		$p0l$	$2^2/m^2$		$10\bar{1}0$	$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$
		$0qr$	$2^2/m^2$			$pq\bar{s}r$	$2^{123}, m^{123}$
	$hk0$	pqr	$2^{12}/m^{12} (3)$			$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
3	$hk\bar{i}l$	$pq\bar{s}r$	$2^{123}, m^{123}$			$pp\bar{2}pr$	$2^1, m^1$
		$pq\bar{s}0$	$2^2, m^2$			$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$			$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$
		$p0\bar{p}r$	$2^{12}, m^{12}$			$p0\bar{p}r$	2^1mm^3
	$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$				2^3mm^1
	$11\bar{2}0$	$p0\bar{p}l$	$2^{12}, m^{12}$				
	$10\bar{1}0$	$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$		32	$hk\bar{i}l$	$2^{123}, m^{123}$
	$hh\bar{2}hl$	$pq\bar{s}r$	$2^{123}, m^{123}$				$2^2, m^2$
		$pp\bar{2}pr$	$2^1, m^1$				$2^{12}, m^{12}$
		$p0\bar{p}l$	$2^{12}, m^{12}$				$2^2, m^2$
	$h0\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$	$2^{123}, m^{123}$			$hk\bar{i}0$	$2^{12}, m^{12}$
		$p0\bar{p}r$	$2^1, m^1$			$10\bar{1}0$	$2^{12}, m^{12}$
		$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$			$hh\bar{2}hl$	$2^{123}, m^{123}$
							$2^{13}, m^{13}$
							$2^{23}, m^{23}$

А	Б	В	Г	А	Б	В	Г
32	$h0\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$	4mm	$h0l$	pqr	$2^{12}, m^{12}$
$\bar{3}m$	$hk\bar{i}l$	$pp\bar{2}pr$	$2^{12}, m^{12}$	422	$h0l$	ppl	$2^2, m^2$
		$pq\bar{s}r$	$2^{123}/m^{123}$		hhl	$p0r$	2^1mm^3
4	hkl	$pq\bar{s}0$	$2^2/m^2$	4/m	hkl	pqr	2^3mm^1
		$pp\bar{2}pr$	$2^{12}/m^{12}$			pqr	$2^{123}, m^{123}$
		$p0\bar{p}r$	$2^2/m^2$			$pq0$	$2^2, m^2$
		$hk\bar{i}0$	$2^{12}/m^{12}$			ppl	$2^2, m^2$
		$10\bar{1}0$	$2^{12}/m^{12}$			$p0r$	$2^2, m^2$
		$hh\bar{2}hl$	$2^{123}/m^{123}$			pqr	$2^{12}, m^{12}$
		$pp\bar{2}pr$	$2^1/m^1$			pqr	$2^{123}/m^{123}$
		$p0\bar{p}r$	$2^2/m^2$			$pq0$	$2^2/m^2$
		$h0\bar{h}l$	$2^{12}/m^{12}$			ppr	$2^2/m^2$
		$pp\bar{2}pr$	$2^{12}/m^{12}$			pqr	$2^{12}/m^{12}$
4	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$	$\bar{4}$	hkl	pqr	$2^{12}/m^{12}$
		$pq0$	$2^2, m^2$			$h0l$	$2^2/m^2$
4	$hk0$	ppr	$2^{12}, m^{12}$	$\bar{4}2m$	hkl	$p0r$	$2^2/m^2$
		$p0r$	$2^{12}, m^{12}$			pqr	$2^{12}, m^{12}$
4/m	hkl	pqr	$2^{12}, m^{12}$	6	hkl	pqr	$2^{123}, m^{123}$
		ppr	$2^{12}, m^{12}$			$pq0$	$2^2, m^2$
		$p0r$	$2^{123}, m^{123}$			ppr	$2^2, m^2$
		ppr	$2^1, m^1$			$p0r$	$2^2, m^2$
		$p0r$	$2^{12}, m^{12}$			pqr	$2^{12}, m^{12}$
		ppr	$2^{123}, m^{123}$			pqr	$2^{12}, m^{12}$
		$pq0$	$2^2/m^2$			$p0r$	$2^2, m^2$
		ppl	$2^{12}/m^{12}$			pqr	$2^{12}, m^{12}$
		$p0r$	$2^{12}/m^{12}$			ppr	$2^2, m^2$
		pqr	$2^{12}/m^{12}$			ppr	$2^1mm^3, 2^3mm^1$
4mm	hkl	ppr	$2^{12}, m^{12}$	6mm	$hk\bar{i}l$	$pq\bar{s}r$	$2^{123}, m^{123}$
		$0qr$	$2^{12}, m^{12}$			$pq\bar{s}0$	$2^2, m^2$
		pqr	$2^{123}/m^{123}$			$pp\bar{2}pr$	$2^2, m^2$
		ppr	$2^1/m^1$			$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
		$p0r$	$2^{12}/m^{12}$			pqr	$2^{12}, m^{12}$
		ppr	$2^{123}/m^{123}$			$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		$pq0$	$2^2/m^2$			$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
		ppl	$2^{12}/m^{12}$			$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		$p0r$	$2^2, m^2$			$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
		pqr	$2^2, m^2$			$pp\bar{2}pr$	$2^2, m^2$
4mm	$hk0$	pqr	$2^{12}, m^{12}$	$h0\bar{h}l$	$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
		hhl	$2^{12}, m^{12}$			$hh\bar{2}hl$	$pq\bar{s}r$
4mm	hkl	pqr	$2^2, m^2$	$h0\bar{h}l$	$hh\bar{2}hl$	$p0\bar{p}r$	$2^2, m^2$
		$p0r$	$2^2, m^2$			$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$
4mm	$hk0$	pqr	$2^{12}, m^{12}$	$h0\bar{h}l$	$h0\bar{h}l$	$pp\bar{2}pr$	$2^2, m^2$
		hhl	$2^{12}, m^{12}$			$pp\bar{2}pr$	$2^1mm^3, 2^3mm^1$
4mm	hkl	pqr	$2^2, m^2$	$h0\bar{h}l$	$h0\bar{h}l$	$p0\bar{p}r$	2^3mm^1
		$p0r$	$2^2, m^2$				

А	Б	В	Г	А	Б	В	Г
622	$hk\bar{i}l$	$pq\bar{s}r$ $pqs0$ $pp2\bar{p}r$ $p0\bar{p}l$	$2^{123}, m^{123}$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$	23	110 $hk0$	ppr pqr rrp ppr pqr rrp $pq0$ pqr 120 311	$2^{12}, m^{12}$ $2^{12}, m^{12}$ $2^{12}, m^{12}$ $2^{12}, m^{12}$ $2^{123}, m^{123}$ $2^1, m^1$ $2^1, m^1$ $2^2, m^2$ $2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$ $2^{12}, m^{12}$ $2^{123}/m^{123}$ $2^2/m^2$ $2^{12}/m^{12}$ rrp pqr $pq0$ ppr rrp ppr $2^{12}/m^{12}$ ppr $2^{12}/m^{12}$ pqr ppr rrp ppr $2^{12}/m^{12}$ ppr $2^{12}/m^{12}$ pqr rrp ppr $2^{12}/m^{12}$ $2^{123}/m^{123}$ $2^1/m^1$ $2^2/m^2$ $2^{12}/m^{12}$ 120 311
	$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$				
	$hh2\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$ $p0\bar{p}r$	$2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$		112		
	$h0\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$ $pp2\bar{p}r$	$2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$	$m\bar{3}$	hkl		
6/ mm	$hk\bar{i}l$	$pqsr$ $pq\bar{s}0$ $pp2\bar{q}r$ $p0\bar{p}r$	$2^{123}/m^{123}$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$		hkl зоны [111]		
	$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}/m^{12}$		110 $hk0$		
	$hh2\bar{h}l$	$pqsr$ $p0\bar{p}r$	$2^{12}/m^{12}$ $2^2/m^2$		$hk0$ $hhl,$ llh		
	$h0\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$ $pp2\bar{p}r$	$2^{12}/m^{12}$ $2^2/m^2$				
$\bar{6}$		См. 3				112	
$\bar{6}2m$	$hk\bar{i}l$	$pq\bar{s}r$ $pqs0$ $pp2\bar{p}r$ $p0\bar{p}r$	$2^{123}, m^{123}$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$	$\bar{4}3m$	hkl		
	$hk\bar{i}0$	$pq\bar{s}r$	$2^{12}, m^{12}$		hkl зоны [111]		
	$hh2\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$ $p0\bar{p}r$ $pp2\bar{p}r$	$2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$		$hk0$		
	$h0\bar{h}l$	$pq\bar{s}r$ $pp2\bar{p}r$	$2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$		$hhl,$ llh 112		
	$hh2\bar{h}l$	$pp2\bar{p}r$	2^1mm^3 2^3mm^1				
23	hkl	pqr $pq0$ ppr rrp	$2^{123}, m^{123}$ $2^2, m^2$ $2^{12}, m^{12}$ $2^{12}, m^{12}$	432	hkl		
	hkl зоны [111]	pqr $pq0$ ppr rrp	$2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$ $2^{12}, m^{12}$ $2^{12}, m^{12}$		hkl зоны [111]		

А	Б	В	Г	А	Б	В	Г
432	<i>hk0</i>	<i>ppr</i> <i>rrp</i> <i>pqr</i> <i>ppr</i> <i>rrp</i>	$2^2, m^2$ $2^2, m^2$ $2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$	$m\bar{3}m$	<i>hkl</i> зоны [111]	<i>rrp</i> <i>pqr</i> <i>pq0</i> <i>ppr</i> <i>rrp</i>	$2^2/m^2$ $2^{12}/m^{12}$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$
	<i>hhl,</i> <i>llh</i> <i>112</i>	<i>pqr</i> <i>pq0</i> <i>pqr</i> <i>120</i> <i>311</i>	$2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$ $2^{12}, m^{12}$ $2^2, m^2$ $2^2, m^2$		<i>hk0</i>	<i>pqr</i> <i>ppr</i> <i>rrp</i>	$2^{12}/m^{12}$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$
$m\bar{3}m$	<i>hkl</i>	<i>pqr</i> <i>pq0</i> <i>ppr</i>	$2^{123}/m^{123}$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$		<i>hhl,</i> <i>llh</i> <i>112</i>	<i>pqr</i> <i>pq0</i> <i>pqr</i> <i>120</i> <i>311</i>	$2^{12}/m^{12}$ $2^2/m^2$ $2^{12}/m^{12}$ $2^2/m^2$ $2^2/m^2$

приводятся две разновидности: 2^1mm^3 и 2^3mm^1 . Третья разновидность 2^2mm^2 обычно мало отличима от первой и поэтому опускается. Для остальных трех групп симметрии двойников приводятся все разновидности двойниковых законов.

Рассмотрение разновидностей законов двойникования имеет смысл только тогда, когда достаточно точно могут быть установлены символы граней сростания. Если этого нельзя сделать, то следует ограничиваться только указанием направления, с которым совпадает $2'$ или нормаль к m' , как это показано в колонке 2 табл. 12.

ОБОБЩЕНИЕ ГРУПП СИММЕТРИИ ДВОЙНИКОВ *

Используя ряды классов симметрии, приводимые в учебниках кристаллографии и в работе А. В. Шубникова [69] и имеющие сходные подгруппы, можно дать обобщенные формулы симметрии двойников для компонентов как кристаллографических, так и некристаллографических классов симметрии. Эти обобщенные формулы приведены в табл. 15—23, в столбцах А которых указаны классы симметрии компонента двойника, в столбцах Б — жесткие группы симметрии двойников и в столбцах В — нежесткие группы симметрии двойников. В этих столбцах мы сочли полезным еще раз привести группы симметрии двойников для всех кристаллографических классов, так как компоненты кристаллографической симметрии, но некристаллической природы (например, молекулы) могут дать двойники как кристаллографической, так и некристаллографической симметрии. В обобщенных формулах N — всегда нечетная ось симметрии. Двойники, состоящие из компонентов с предельными группами симметрии, рассматриваются условно,

* [Мокиевский В. А., 1968 г.].

Двойники компонентов примитивных классов симметрии

Класс симметрии	Группы симметрии двойников						
	жесткие			нежесткие			
А	Б			В			
1	1'	—	—	—	—	2'	m'
2	$2/m'$	$\bar{4}'$	4'	$22'2'$	$2m'm'$	2'	m'
3	$\bar{3}'$	$\bar{6}'$	6'	32'	$3m'$	2'	m'
4	$4/m'$	$\bar{8}'$	8'	$42'2'$	$4m'm'$	2'	m'
5	$\bar{5}'$	$\bar{10}'$	10'	52'	$5m'$	2'	m'
6	$6/m'$	$\bar{12}'$	12'	$62'2'$	$6m'm'$	2'	m'
7	$\bar{7}'$	$\bar{14}'$	14'	72'	$7m'$	2'	m'
N	\bar{N}'	$2\bar{N}'$	$2N'$	$N2'$	Nm'	2'	m'
$2N$	$2N/m'$	$4\bar{N}'$	$4N'$	$2N2'2'$	$2Nm'm'$	2'	m'
∞	∞/m'		∞	$\infty 2'$	∞/m'	2'	m'

ТАБЛИЦА 16

Двойники компонентов планальных классов симметрии

А	Б			В				
m	$2'/m$	—	—	—	—	$2'mm'$	2'	m'
$2mm$	mmm'	$\bar{4}'2'm$	$4'mm'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'mm'$	2'	m'
$3m$	$\bar{3}'m$	$\bar{6}'2'm$	$6'mm'$	32'	$3m'$	$2'mm'$	2'	m'
$4mm$	$4/m'mm$	$\bar{8}'2'm$	$8'mm'$	$42'2'$	$4m'm'$	$2'mm'$	2'	m'
$5m$	$\bar{5}'m$	$\bar{10}'2'm$	$10'mm'$	52'	$5m'$	$2'mm'$	2'	m'
$6mm$	$6/m'mm$	$\bar{12}'2'm$	$12'mm'$	$62'2'$	$6m'm'$	$2'mm'$	2'	m'
$7m$	$7'm$	$\bar{14}'2'm$	$14'mm'$	72'	$7m'$	$2'mm'$	2'	m'
Nm	$\bar{N}'m$	$2\bar{N}'2'm$	$2N'mm'$	$N2'$	Nm'	$2'mm'$	2'	m'
$2Nmm$	$2N/m'mm$	$4\bar{N}'2'm$	$4N'mm'$	$2N2'2'$	$2Nm'$	$2'mm'$	2'	m'
∞m	$\infty/m'm$		∞m	$\infty/m'm$	∞m	$2'mm'$		

Двойники компонентов аксиальных классов симметрии

А	Б					В					
222	$m'm'm'$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	—	—	—	—	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
32	$\bar{3}'m'$	$\bar{6}'2m'$	$6'22'$	$\bar{4}'$	$4'$	$32'$	$3m'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
422	$4/m'm'm'$	$\bar{8}'2m'$	$8'22'$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	$42'2'$	$4m'm'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
52	$\bar{5}'m'$	$\bar{10}'2m'$	$10'22'$	$\bar{4}'$	$4'$	$52'$	$5m'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
622	$6/m'm'm'm'$	$\bar{12}'2m'$	$12'22'$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	$62'2'$	$6m'm'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
72	$\bar{7}'m'$	$\bar{14}'2m'$	$14'22'$	$\bar{4}'$	$4'$	$72'$	$7m'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
$N2$	$\bar{N}'m'$	$2\bar{N}'2m'$	$2N'22'$	$\bar{4}'$	$4'$	$N2'$	Nm'	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
$2N22$	$2N/m'm'm'm'$	$4\bar{N}'2m'$	$4N'22'$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	$2N2'2'$	$2Nm'm'$	$22'2'$	$2m'm'$	$2'$	m'
$\infty 2$	$\infty/m'm'$		$\infty 2$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	$\infty 2$	$\infty/m'm'$	$22'2', 2m'm'$			

ТАБЛИЦА 18

Двойники компонентов центральных классов симметрии

А	Б	В	В				
			А	Б	В		
$\bar{1}$	—	—	$2'/m'$	$6/m$	$12'/m$	$6/mm'm'$	$2'/m'$
$2/m$	$4'/m$	$mm'm'$	$2'/m'$	$\bar{7}$	$14'/m'$	$\bar{7}m'$	$2'/m'$
$\bar{3}$	$6'/m'$	$\bar{3}m'$	$2'/m'$	\bar{N}	$2N'/m'$	$\bar{N}m'$	$2'/m'$
$4/m$	$8'/m$	$4/mm'm'$	$2'/m'$	$2N/m$	$4N'/m$	$2N/mm'm'$	$2'/m'$
$\bar{5}$	$10'/m'$	$\bar{5}m'$	$2'/m'$	∞m	∞/m	∞/mm'	$2'/m'$

Двойники компонентов план-аксиальных классов симметрии

А	Б		В		
mmm	$4' / mmm'$	—	—	$mm'm'$	$2' / m'$
$\bar{3}m$	$6' / m'mm'$	$4' / m$	$\bar{3}m'$	$mm'm'$	$2' / m'$
$4/mmm$	$8' / mmm'$	$4' / mmm'$	$4/mm'm'$	$mm'm'$	$2' / m'$
$\bar{5}m$	$10' / m'mm'$	$4' / m$	$\bar{5}m'$	$mm'm'$	$2' / m'$
$6/mmm$	$12' / mmm'$	$4' / mmm'$	$6/mm'm'$	$mm'm'$	$2' / m'$
$\bar{7}m$	$14' / m'mm'$	$4' / m$	$\bar{7}m'$	$mm'm'$	$2' / m'$
$\bar{N}m$	$2N' / m'mm'$	$4' / m$	$\bar{N}m'$	$mm'm'$	$2' / m'$
$2N/mmm$	$4N' / mmm'$	$4' / mmm'$	$2N/mm'm'$	$mm'm'$	$2' / m'$
∞ / mm	∞ / mm	$4' / mmm'$	∞ / mm	$mm'm'$	

ТАБЛИЦА 20

Двойники компонентов инверсионно-примитивных классов симметрии

А	Б		В		
$\bar{4}$	$4' / m'$		$\bar{4}2'm'$	$2'$	m'
$\bar{6}$	$6' / m$		$\bar{6}2'm'$	$2'$	m'
$2\bar{N}$	$2N' / m'$		$2\bar{N}2'm'$	$2'$	m'
$2\bar{N}(N/m)$	$2N' / m$		$2\bar{N}2'm'$	$2'$	m'
∞ / m	∞ / m		∞ / mm'	$2' / m'$	

ТАБЛИЦА 21

Двойники компонентов инверсионно-планальных классов симметрии

А	Б				В				
$\bar{4}2m$	$4' / m'mm'$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	$\bar{4}2'm'$	$2m'm'$	$2'mm'$	$22'2'$	$2'$	m'
$\bar{6}2m$	$6' / mmm'$	$\bar{4}'2'm$	$4'mm'$	$\bar{6}2'm'$	$2m'm'$	$2'mm'$	$22'2'$	$2'$	m'
$2\bar{N}2m$	$2N' / m'mm'$	$\bar{4}'2m'$	$4'22'$	$2\bar{N}2'm'$	$2m'm'$	$2'mm'$	$22'2'$	$2'$	m'
$2\bar{N}2m$ ($N/m2m$)	$2N' / mmm'$	$\bar{4}'2'm$	$4'mm'$	$2\bar{N}2'm'$	$2m'm'$	$2'mm'$	$22'2'$	$2'$	m'
∞ / mm	∞ / mm	$4' / mmm'$		∞ / mm	$mm'm'$				

Двойники компонентов классов 23, 432 и 532

А	Б			В			
23	$m\bar{3}'$, $\bar{4}'3m'$, $4'32'$	$6'$, $\bar{6}'$	—	$32'$, $22'2'$	$3m'$, $2m'm'$	$2'$	m'
432	$m\bar{3}'m'$	$6'22'$, $\bar{6}'2m'$	$4'22'$, $\bar{4}'2m'$, $8'22'$, $\bar{8}'2m'$	$32'$, $42'2'$, $22'2'$	$3m'$, $4m'm'$, $2m'm'$	$2'$	m'
532	$\bar{5}'\bar{3}'m'$	$10'22'$, $\bar{10}'2m'$, $6'22'$, $\bar{6}'2m'$	$4'32'$, $\bar{4}'3m'$	$52'$, $32'$, $22'2'$	$5m'$, $3m'$, $2m'm'$	$2'$	m'
$\infty\infty$	$\infty/m'\infty$	—	—	—	—	—	—

ТАБЛИЦА 23

Двойники компонентов классов $\bar{4}3m$, $m\bar{3}$, $m\bar{3}m$ и $\bar{5}3m$

А	Б			В			
$\bar{4}3m$	$m\bar{3}'m'$	$\bar{6}'2'm$, $6'mm'$	—	$32'$, $3m'$	$\bar{4}2'm'$	$2'mm'$	$2'$ m'
$m\bar{3}$	$m\bar{3}m'$	$6'/m'$	—	$\bar{3}m'$	$mm'm'$	$2'/m'$	
$m\bar{3}m$	—	$6'/m'mm'$	$4'/mmm'$, $8'/mmm'$	$\bar{3}m'$	$4'/mm'm'$	$mm'm'$	$2'/m'$
$\bar{5}3m$	—	$10'/m'tmm'$, $6'/m'tmm'$	$m\bar{3}m'$	$\bar{5}m'$, $\bar{3}m'$	$mm'm'$	—	$2'/m'$
$\infty/m\infty$	—	—	—	—	—	—	—

так как такие компоненты, как бы они ни были расположены в пространстве друг относительно друга, можно всегда совместить операциями $T, m, a, 2, 2_1$ и $\bar{1}$. Поэтому в записях формул предельных групп симметрии элементы симметрии со штрихом отображают лишь только те операции симметрии, которые приводят в совмещение компоненты предельных групп симметрии, указанных в столбцах А табл. 15—23. Обращает на себя внимание тот факт, что компоненты некристаллографической симметрии обязательно имеют двойники кристаллографической симметрии.

Приведенные таблицы можно использовать при анализе двойников не только кристаллов, но и молекул, если известны их точечные группы симметрии, а также некоторых биологических объектов, как, например, хромосом и соцветий.

СИММЕТРИЯ КОМПЛЕКСОВ

Образование закономерных сростков из нескольких кристаллов известно минералагам еще с прошлого столетия. Указания на такие срастания можно найти в учебнике минералогии Г. Чермака [1884 г.]. В минералогической справочной литературе отмечаются высокосимметричные срастания из низкосимметричных кристаллов для лейцита, кварца, плагиоклазов, филлипсита и др. Современные исследователи обнаруживают подобного рода образования для многих минералов [9, 34]. Закономерные срастания более чем двух компонентов встречаются среди минералов значительно реже двойников. Возможно, что это объясняется только сложностью их расшифровки или не очень четкой выраженностью. Несмотря на то что такого рода сростки описаны в сравнительно небольшом количестве, можно на основе симметрии дать их общую характеристику.

Из всех существующих примеров комплексообразования наиболее яркими представляются срастания кристаллов филлипсита. Эти кристаллы по последним данным относятся к классу $2/m$. Двойники филлипсита имеют симметрию $mm'm'$. Кроме этого, имеются сростки с еще более высокой симметрией, отвечающей тетрагональной голоэдри (4/ mmm), и, наконец, найдены такие образования, которые имитируют кубическую голоэдрию ($m\bar{3}m$). Эти закономерные срастания кристаллов филлипсита можно трактовать как повышение порядка группы симметрии сростков в 2, 4 и 12 раз по сравнению с порядком группы симметрии компонента. Другой пример касается кварца. Жесткие двойники этого минерала имеют при соблюдении параллельности осей 2 и 3 симметрию $\bar{3}m', 6'22', \bar{6}'2m'$. В литературе описан четверник (комплексный двойник Либиша), симметрия которого отвечает гексагональной голоэдри (6/ mmm), включающей все перечисленные группы симметрии двойников и группу симметрии самого кварца. Этот сложный двойник Либиша можно трактовать как двойник двойников (любого из перечисленных) или как четверник кварца. Последняя трактовка удобнее, так как единицей

(компонентом) комплекса является кварц, а установить, какие из этих трех двойников принимали участие в образовании комплекса, практически невозможно.

Х. Кюрбен и И. Донней [80] рассматривали с позиций теории симметрии комплексы, состоящие из 4, 8 и 16 компонентов, и встретили трудности в записях формул симметрии этих образований, так как некоторым символам в формулах пришлось приписывать несколько штрихов. Но число компонентов может быть и нечетным, например у тройников. Очевидно, что двойникование является частным, но, возможно, наиболее распространенным случаем комплексобразования среди минералов. По аналогии с двойниками можно полагать, что группа симметрии комплекса $G^{(n)}$ связана с классом симметрии компонента G следующей простой формулой: $G^{(n)} \supseteq nH$, где n — делитель порядка группы $G^{(n)}$, показывающий число компонентов комплекса, H — подгруппа (тривиальная или нетривиальная) класса симметрии компонента G . При $n=2$ имеют место двойники, а при $n>2$ — тройники, четверники, пятерники и т. д. Если G содержит $\bar{1}$, то все $G^{(n)}$, выводящиеся из H , также центросимметричны. Число кристаллографических групп симметрии комплексов ($n>2$) равно 153 ($211 - 58$) [99]. Формулу симметрии комплекса удобно записывать в несколько другой форме, чем формулу двойников. Чтобы избежать множества штрихов, не следует выделять элементы симметрии связи, а вслед за обычной записью формулы на втором месте в скобках указывается подгруппа H и, если есть необходимость, когда $H \neq G$, на третьем месте в тех же скобках указывается G . Тогда симметрия комплексов филлипсита запишется так: $4/m\bar{m}m$ ($2/m$) и $m\bar{3}m$ ($2/m$), а симметрия комплексного двойника Либиша — $6/m\bar{m}m$ (32). Число компонентов комплекса n из такой записи находится легко, так как оно равно частному от деления порядка группы симметрии комплекса на порядок группы симметрии, указанной на первом месте в скобках. Следует иметь в виду, что в ряде комплексов элементы симметрии могут быть одновременно и классическими, и элементами симметрии связи, что невозможно в двойниках. Примером может служить тройник с симметрией 32 (2), у которого ось 2 является одновременно и осью симметрии компонента, и осью симметрии связи.

В качестве примера рассмотрим винтовую цепочку из кремнекислородных тетраэдров в структуре α -кварца. Одиночный тетраэдр имеет симметрию $\bar{4}3m$. В структуре кварца его симметрия падает до 2. Если тетраэдры этой цепочки мысленно сдвинуть путем параллельного переноса в одну точку, то получится комплекс $[\text{Si}_3\text{O}_9]$ с симметрией 32 ($2, \bar{4}3m$). Ось 2 будет одновременно осью симметрии одного из тетраэдров и осью симметрии связи двух других тетраэдров. При обратном «раздвигании» этих тетраэдров вдоль 3 на $1/3$, $2/3$ и 1 трансляции оси 2 симметрии связи останутся осями симметрии тетраэдров и элементами симметрии связи. Если тройник $[\text{Si}_3\text{O}_9]$ образован по подгруппе m ,

то его симметрия будет $3m$ (m , $\bar{4}3m$); при подгруппе $2mm$ — $\bar{6}2m$ ($2mm$, $\bar{4}3m$), а при подгруппе 222 — $\bar{6}22$ (222 , $\bar{4}3m$). Перебирая все подгруппы группы $\bar{4}3m$, можно найти симметрию всех тройников $[\text{Si}_3\text{O}_9]$. Разобранный пример является, по сути дела, комплексом химических комплексов (полимером). Понятие о комплексах для кристаллов распространимо и на комплексы в химии, и наоборот.

Химический комплекс, как известно, состоит из комплексообразователя и лиганд. Правила валентности на комплексы не распространяются. Строение химического комплекса можно вывести из симметрии лиганды, которая, по сути дела, является компонентом комплекса. Так, например, комплекс, состоящий из комплексообразователя в виде кальция и шести молекул воды (лиганд), может быть представлен несколькими структурными вариантами. Молекула воды имеет симметрию $2mm$. Если все шесть молекул воды, окружая кальций, сохраняют свою симметрию, то они образуют группу 24-го порядка, в которой группа симметрии $2mm$ является подгруппой. Известно, что оси 2 молекул воды в таком комплексе располагаются взаимно перпендикулярно. При этом образуется группа симметрии, отвечающая кубической сингонии и имеющая подгруппу $2mm$. Этому условию отвечают только две группы — $m\bar{3}$ и $\bar{4}3m$. Для окончательного решения вопроса достаточно установить присутствие в комплексе центра симметрии. Насколько нам известно, роль химического комплексообразователя исследована недостаточно. Причины возникновения комплексов из кристаллов также не изучены. Причем у этих комплексов не найдено комплексообразователей. Однако часть описанных комплексов кристаллов минералов позволяет сделать некоторые предположения о роли комплексообразователя.

Д. В. Рундквист [34] описал комплексные двойники касситерита. Один из таких комплексов был назван четверником тройников. Можно дать более простую трактовку этого комплекса, чем та, которая сделана в работе Д. В. Рундквиста. Комплексообразователем здесь является кристалл касситерита, по всем восьми граням тетрагональной дипирамиды $\{101\}$ которого образовались коленчатые двойники (плоскость дипирамиды является двойниковой плоскостью m') с точечной симметрией $mm'm'$. Учитывая параллельность компонентов, sdвойникованных по противоположным граням тетрагональной дипирамиды, такой комплекс можно назвать четверником (без учета комплексообразователя). Симметрия комплекса запишется так: $4/mmm$ ($2/m$, $4/mmm$). Центральный кристалл (комплексообразователь) играл в таком сростке ориентирующую роль. В случае образования шпинелевых двойников по всем восьми граням октаэдра в классе $m\bar{3}m$ также будем иметь дело с четверником $m\bar{3}m$ ($3m$, $m\bar{3}m$). Комплексы также можно разделить на жесткие и нежесткие по тем же признакам, как делились двойники. Рассмотренный четверник касситерита является нежестким, так как плоскостями двойникова-

ния могут быть любые из плоскостей $\{h0l\}$ и $\{hhl\}$. Комплекс из шпинелевых двойников жесткий.

В обоих рассмотренных случаях элементы симметрии подгрупп, записанных на первом месте в скобках, играют роль классических элементов и элементов симметрии связи, как и в разобранном выше примере с комплексом из кремнекислородных тетраэдров в кварце. Только один центр симметрии не может нести этих двух функций. У высокотемпературного тридимита в ячейке имеется четыре атома кремния, занимающих одну правильную систему точек. Таковую ячейку можно рассматривать как комплекс из четырех кремнекислородных тетраэдров идеальной симметрии $\bar{4}3m$. Только одна подгруппа $3m$ этой группы может дать комплекс, отвечающий по симметрии гексагональной голоэдри — $6/mmm$ ($3m, \bar{4}3m$). Только две пространственные группы гексагональной голоэдри содержат точки четырехкратного положения с симметрией $3m$: $P6/mmm$ и $P6_3/mmc$. Оси 2 и 2_1 , параллельные $[0001]$, играют роль элементов связи в этих пространственных группах. Все остальные элементы симметрии этих пространственных групп, кроме $3m$, являются элементами симметрии связи для кремнекислородных тетраэдров данной элементарной ячейки.

Известно, что симметрия химического комплекса в зависимости от окружающей обстановки и замещения части лиганд может измениться до подгрупп исходной группы или примет симметрию другого класса [например, симметрия $m\bar{3}$ комплекса $\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_6$ может измениться и стать $\bar{4}3m$ или $6/mmm$]. Комплексы из кристаллов являются более жесткими конструкциями. Правда, следует отметить, что изменением их строения никто не занимался, если не считать опытов по механическому раздвойниковыванию кальцита и изыщных экспериментов Е. В. Цинзерлинг [48] по раздвойниковыванию кварца.

Остановимся еще на одном кристаллографическом примере, когда в роли комплексобразователя выступает кристалл, отличающийся по составу и симметрии от компонентов комплекса. Этот случай описан в работе Ю. М. Чащинова и В. А. Мокиевского [1966 г.]. Заметим, что таких примеров можно найти в работах по эпитаксии великое множество. При наращивании арсенида галлия (класс $\bar{4}3m$) на германий (класс $m\bar{3}m$) методом газовых транспортных реакций возникает двойник из кристаллов GaAs с симметрией $m'\bar{3}'m$, а в комплексной записи $m\bar{3}m$ ($\bar{4}3m$). Симметрия двойника становится равной симметрии комплексобразователя (германия). Двойник является жестким. Этот пример будет еще раз рассмотрен в разделе об эпитаксии. Сейчас только отметим, что ориентирующая роль при комплексобразовании кристаллов может принадлежать как кристаллам того же вещества, что и компоненты комплекса, так и кристаллам постороннего вещества при эпитаксии. Для комплексов из кристаллов симметрия комплекса может быть и выше, чем симметрия комплексобразователя. Это относится только к тем случаям эпитак-

сии, когда комплексообразователем служит одна или две параллельные грани подложки, что также будет рассмотрено в разделе об эпитаксии.

Ранее в работе автора [Мокиевский В. А., 1966 г.] была рассмотрена при помощи цветной симметрии так называемая альбит-карлсбадская триада для случаев как прорастания, так и срастания (стержня). Для прорастания она может быть описана четырехцветной группой ромбической голоэдрии $mmm(\bar{1})$.

Симметричный подход к комплексам снимает необходимость триадной теории двойников [9].

СИММЕТРИЯ ДВОЙНИКОВЫХ ГРАНИЦ *

Морфология двойников представляет собой фактически почти совершенно не исследованный раздел общего учения о кристаллических формах. Этот раздел сейчас после разработки симметрии двойников получает надежную математическую основу.

Морфологию двойников, так же как и монокристаллов, можно разделить на внешнюю и внутреннюю. И та и другая требуют в первую очередь знания симметрии двойниковых границ.

Границы между сдвойникованными кристаллами делятся на внешние и внутренние. Внешние границы возникают на поверхности сдвойникованных кристаллов в виде так называемых двойниковых швов, проявляющих себя довольно четко при наличии входящих углов, образованных одноименными гранями компонентов, и при наличии хорошо выраженных скульптур роста или растворения. Входящий угол при визуальных наблюдениях является первым, но не обязательным признаком, по которому устанавливается наличие двойника. Когда одноименные грани сдвойникованных кристаллов параллельны (компланарны), двойниковый шов не всегда может быть легко обнаружен невооруженным глазом (например, у двойников кварца). В этих случаях обычно прибегают к травлению поверхности кристаллов. Внешние двойниковые границы во многом обуславливают морфологию двойника и его облик, так как часто, по всей вероятности, служат источником слоев роста и растворения кристаллов. Во входящих углах поверхность кристалла иногда образована гранями, которые нельзя встретить на остальной части компонентов [Мокиевский В. А., Скропышев А. В., 1956 г.]. Двойники алмаза по шпинелевому закону ($6'/m'mm'$) обычно имеют пластинчатый облик в тех случаях, когда двойниковая граница достаточно точно проходит по (111). Очевидно, что входящий угол способствовал росту компонентов вдоль плоскости двойникования (111). Особые фигуры роста, приуроченные к внешним двойниковым границам, хорошо описаны в работе А. В. Шустова [74].

Внутренние двойниковые границы представляют собой границы срастания в буквальном смысле этого слова. Строение этих

* [Мокиевский В. А., 1968 г.]

границ представляет несомненный интерес, так как они ответственны за двойниковую переориентировку кристаллов. В физике пластичности их делят на когерентные и некогерентные. К первым относят плоские границы, совпадающие с плоскостями двойникования m' . Эти границы не вызывают макроскопических напряжений. Некогерентные границы не совпадают с плоскостями двойникования (могут быть плоскими, ступенчатыми и кривыми) и вызывают макроскопические напряжения. Ими обусловлена форма клиновидных и сигарообразных двойниковых прослоек, сопровождающихся часто упруго искаженными областями (переходными областями). Подробно эти границы рассмотрены в работе М. В. Классен-Неклюдовой [21].

С позиции симметрии двойников внутренние границы можно разделить на симметричные и «несимметричные». К первым отнесем такие границы, которые содержат переворачивающие (отрицательные по А. В. Шубникову [69]) операции симметрии m' , $2'$, $\bar{1}'$ и $\bar{4}'$. Граница, совпадающая с m' или нормальная к $\bar{4}'$, разумеется, должна быть плоской или ступенчатой, а граница, параллельная $2'$, не обязательно должна быть плоской. Она может образовывать поверхность ступенчатую и далее извилистую, но обязательно параллельную $2'$, т. е. зону граней кристалла. Для так называемых двойников инверсии (группы симметрии которых содержат $\bar{1}'$) все внутренние границы независимо от их конфигурации симметричны (содержат по меньшей мере $\bar{1}'$). «Несимметричные» границы не содержат перечисленных выше элементов симметрии, совмещающих компоненты двойника. Из этого конечно не следует, что компоненты двойника должны по этим границам разъединяться без особых усилий. В некоторых случаях действительно эти границы являются местами легкого разъединения компонентов. Но для некоторых двойников (например, дофинецкий двойник кварца) «несимметричные» границы весьма прочные и их строение требует специального рассмотрения.

Симметрия внешних и внутренних границ, если известна точечная группа симметрии двойника, может быть найдена из подгрупп двухцветной группы. Подгруппы для всех двухцветных кристаллографических групп симметрии приведены в работе В. А. Копчика [22]. Если под руками нет этой работы, то двухцветные подгруппы данной двухцветной группы могут быть легко найдены при помощи табл. 1, так как они являются надгруппами индекса 2- всех классических подгрупп данной двухцветной группы. Но не все двухцветные подгруппы данной двойниковой группы симметрии описывают симметрию внешних и внутренних границ, о которых была речь выше.

Остановимся на примере двойника кальцита, который обычно называют двойником по пинакоиду (точечная симметрия $6'/m'mm'$). Поскольку симметрия компонента $\bar{3}m$, то все центросимметричные двухцветные подгруппы должны содержать только классический центр. В табл. 24 приведены все классические под-

Подгруппа двухцветной группы $6'/m'mm'$

Классические	Двухцветные	Классические	Двухцветные
$\bar{3}m$	$6'/m'mm'$	$2/m$	$mm'm'$
32	$6'22', \bar{6}'2m'$	2	$22'2', 2m'm'$
$3m$	$6'mm', \bar{6}'2'm$	m	$2'mm'$
$\bar{3}$	$6'/m', \bar{3}m'$	$\bar{1}$	$2'/m'$
3	$3m', 32', 6', \bar{6}'$	1	$2', m'$

группы группы симметрии двойника и их двухцветные надгруппы индекса 2, являющиеся подгруппами двухцветной группы симметрии двойника. Из этих двухцветных подгрупп нужно отобрать такие, которые описывают симметрию границ. Поскольку у кальцита грани могут иметь только симметрию $3m - (0001)$, $2 - 11\bar{2}0$, $m - (10\bar{1}0)$ и $(h0\bar{h}l)$, $1 - (hk\bar{i}0)$, $(hh2\bar{h}l)$ и $(hk\bar{i}l)$, то симметрия внешних границ будет описываться только односторонними двухцветными надгруппами этих групп симметрии граней, а симметрия границ срастания — двусторонними двухцветными надгруппами.

Мы выбрали пример с кальцитом не случайно. Дело в том, что здесь вопрос с симметрией границ решается просто, так как символы граней кристалла и двойника остаются теми же, что и для всех случаев компонентов средней и высшей категории, когда группа симметрии двойника является надгруппой класса симметрии компонента. В тех же случаях, когда группа симметрии двойника содержит в качестве одноцветной подгруппы нетривиальные подгруппы класса симметрии компонента или тривиальную 1, вопрос о симметрии границ становится несколько сложнее. Поэтому, чтобы облегчить эту задачу, были предварительно найдены все возможные группы симметрии границ, как внешних, так и внутренних, которые могут образовать кристаллографические плоскости 10 односторонних групп симметрии. Принцип вывода такой же, как и при выводе точечных групп симметрии двойников, и заключается в нахождении надгрупп индекса 2 для всех 10 групп симметрии граней и их подгрупп. Поскольку все односторонние (пирамидальные) группы не содержат центра симметрии, то только одна надгруппа индекса 2 может иметь двухцветный центр.

В качестве примера вывода рассмотрим плоскую группу $2mm$, у которой подгруппами являются 2 , m и 1 . Порядок исходной группы равен 4. Следовательно, ее двойниковые надгруппы должны иметь восьмой порядок и обязательно содержать в качестве подгруппы исходную группу. Этому условию отвечают три жесткие группы: mmm' , $4'mm'$ и $\bar{4}'2'm$, которые и будут двойниковыми

плоскими группами. Из подгруппы 2 исходной группы аналогичным образом выводятся следующие группы четвертого порядка: $2/m'$, $2m'm'$, $22'2'$, $4'$ и $\bar{4}'$. Жесткая группа $2/m'$ должна быть вычеркнута, так как она входит в группу mmm' , а жесткие группы $4'$ и $\bar{4}'$ также вошли в состав группы $4'mm'$, $\bar{4}'2'm$ и тоже вычеркиваются. Оставшиеся две группы симметрии являются нежесткими. Из подгруппы m исходной группы выводится только две группы четвертого порядка, а именно $2'/m'$ и $2'mm'$. Обе вычеркиваются. Первая — по причине centrosимметричности, а вторая входит в группу mmm' и приводит к centrosимметричному варианту. Из подгруппы 1 исходной группы выводится три двойниковых плоских группы: $2'$, m' и $\bar{1}'$. Все три вычеркиваются. Первые две группы приведут к группам $2m'm'$ или $22'2'$, а третья вычеркивается по причине centrosимметричности. Таким образом, из исходной плоской группы $2mm$ выводятся следующие двойниковые плоские группы симметрии: $22'2'$, $2m'm'$, $4'mm'$, $\bar{4}'2'm$, mmm' .

ТАБЛИЦА 25

Плоские двойниковые группы симметрии

Плоские группы	Двойниковые плоские группы	Плоские группы	Двойниковые плоские группы
1	$2', m', \bar{1}'$	m	$2', m', 2'mm', 2'/m$
2	$22'2', 4', \bar{4}', 2m'm', 2/m'$	$2mm$	$22'2', 2m'm', 4'mm', \bar{4}'2'm, mmm'$
3	$\bar{3}', 32', 6', \bar{6}', 3m'$	$3m$	$32', 3m', 6'mm', \bar{6}'2'm, \bar{3}'m$
4	$42'2', 4m'm', 4/m'$	$4mm$	$42'2', 4m'm', 4/m'mm$
6	$62'2', 6m'm', 6/m'$	$6mm$	$62'2', 6m'm', 6/m'mm$

В табл. 25 приводится результат вывода плоских двойниковых групп для 10 плоских односторонних групп симметрии кристаллических граней — всего 39 случаев двухцветной симметрии для разных по симметрии граней кристаллов. Из них не повторяется только 29. Следовательно, из 52 (58 — 6 кубических) в качестве двойниковых плоских групп реализуется только 29. Это объясняется тем, что, например, из пяти двухцветных групп, соответствующих гексагональной голоэдри (табл. 9), только одна может служить двойниковой плоской группой, а именно та, у которой нормально к 6 проходят только штрихованные элементы симметрии. Остальные реализуются как группы симметрии двойников. 29 плоскими двойниковыми группами описывается симметрия двойниковых граней. Из них 11 односторонних групп отве-

чают 8 классическим (2, 4, 6, m , $2m$, $3m$, $4m$, $6m$) и 18 двусторонних — 17 классическим группам двусторонней симметрии. Первыми описывается симметрия внешних границ (внешней формы) двойников «прорастания», а вторыми — симметрия плоскостей срастания (внутренних двойниковых границ). Всего для описания внешних и внутренних двойниковых границ необходимо 25 классических групп (32 — 7). Заметим, что границы срастания для двойников, компоненты которых представлены центросимметричными классами, должны описываться ацентрическими плоскими двойниковыми группами. Последнее тривиально, но тем не менее при исследовании и описании двойников не учитывается. Так, например, граница между переориентированными частями кристалла NaCl, образованная только краевыми дислокациями с осью [100] и полуплоскостью (110), отвечает симметрии $2'mm'$, а винтовыми дислокациями — симметрии $2'$ [Мокиевский В. А., 1968 г.] .

Плоские двойниковые группы также делятся на «жесткие» и «нежесткие». На этом вопросе можно было бы не останавливаться, так как его решение уже имеется в табл. 11. Но поскольку в литературе двойниковым границам отводится много внимания, то мы считаем уместным остановиться на них несколько подробнее.

При рассмотрении жесткости и нежесткости односторонних двойниковых групп (11 групп) следует учитывать только вращение вокруг нормали к плоскости. При исследовании двусторонних групп нужно учитывать вращение не только вокруг нормали к данной плоскости, но и вокруг направления, параллельного плоскости. Первое будет отвечать границам кручения*, а второе — границам наклона. В табл. 26 перечислены жесткие и нежесткие двойниковые плоские группы. Для двусторонних нежестких групп перечислены только границы кручения. Нежесткие границы наклона по симметрии могут отвечать только трем группам: $2'mm'$, m' и $2'$, т. е. группам симметрии диэдров. Группы симметрии границ кручения представляют наибольший интерес, так как эти группы обеспечивают пластическую деформацию кручением образца. При вращении плоскостей вокруг общей нормали жесткие плоские двойниковые группы могут переходить в нежесткие или другие жесткие. Все переходы жестких групп в нежесткие показаны в табл. 27. Наиболее важными нам представляются переходы двусторонних жестких групп в нежесткие. При вращении одной плоскости относительно другой вокруг общей

* Кручение, так же как и скольжение [77], может быть односторонним (полярным) и двусторонним (неполярным). Легко можно доказать, что для условия двусторонности (неполярности) кручения необходимо и достаточно, чтобы нормально к оси кручения проходила в кристалле плоскость симметрии, чтобы с осью кручения совпадала хотя бы одна плоскость симметрии или ось $\bar{4}$ или чтобы в кристалле был бы центр симметрии. Если эти условия не выполняются, то кручение полярно. У кварца кручение вокруг любого направления будет полярным.

Жесткие и нежесткие двойниковые плоские группы

Симметрия граней	Односторонние группы		Двусторонние группы	
	жесткие	нежесткие	жесткие	нежесткие
1	2'	m'	$m', \bar{1}'$	2'
2	4'	$2m'm'$	$2/m', \bar{4}'$	$22'2'$
3	6'	$3m'$	$\bar{3}', \bar{6}'$	$32'$
4		$4m'm'$	$4/m'$	$42'2'$
6		$6m'm'$	$6/m'$	$62'2'$
m	$2'mm'$	m'	$2'/m, 2'mm'$	2'
$2mm$	$4'mm'$	$2m'm'$	$mmm', \bar{4}'2'm$	$22'2'$
$3m$	$6'mm'$	$3m'$	$\bar{3}'m, \bar{6}'2'm$	$32'$
$4mm$		$4m'm'$	$4/m'mm$	$42'2'$
$6mm$		$6m'm'$	$6/m'mm$	$62'2'$

ТАБЛИЦА 27

Переходы жестких плоских двойниковых групп в нежесткие

Односторонние двойниковые группы

$$2' \rightleftharpoons 1, 4' \rightleftharpoons 2, 6' \rightleftharpoons 3, 2'mm' \rightleftharpoons m', 4'mm' \rightleftharpoons 2m'm', 6'mm' \rightleftharpoons 3m'$$

Двусторонние двойниковые группы

$$m' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{1}', 2/m' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{4}', \bar{3}' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{6}', 4/m' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{8}', 6/m' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{12}',$$

$$2'/m \rightleftharpoons 2' \rightleftharpoons 2'mm', mmm' \rightleftharpoons 22'2' \rightleftharpoons \bar{4}'2'm, \bar{3}'m \rightleftharpoons 32' \rightleftharpoons \bar{6}'2'm,$$

$$4/m'mm \rightleftharpoons 42'2' \rightleftharpoons \bar{8}'2'm, 6/m'mm \rightleftharpoons 62'2' \rightleftharpoons \bar{12}'2'm$$

нормали сохраняется только ось $2'$, а для односторонних — m' . Общая ось симметрии, нормальная к обеим плоскостям, сохраняется. Иначе говоря, при вращении двусторонняя симметрия обеспечивается только в том случае, если параллельно плоскостям проходит ось симметрии $2'$. Если же параллельно плоскостям проходит m' , то при вращении эта плоскость исчезает. Сказанное переносится и на плоские группы дисконтинуума. При этом надо учитывать, что у нежестких групп кручения параметры элементарной ячейки будут изменяться. Группа же симметрии при вращении изменяться не будет, пока не перейдет в новую жесткую группу. Наглядное представление о переходе жестких двойниковых групп в нежесткие при вращении можно получить на соответствующих моделях плоских групп из стрелок (рис. 2).

При вращении плоскостей, образующих границу срastания (двустороннюю границу), вокруг общей оси, параллельной плоскости срastания, могут образовываться новые плоские группы или остаются старые, если группа нежесткая. В табл. 28 приве-

ТАБЛИЦА 28

Результаты вращения плоскостей срastания вокруг лежащих в них направлений

Двойниковые группы	Направление оси вращения	Симметрия границы наклона	Двойниковые группы	Направление оси вращения	Симметрия границы наклона
$2'$	$\perp 2'$	$2'$	$2'/m$	$\perp 2'$	$2'$
m'	—	m'	$2'mm'$	$\perp 2'$	$2'mm'$
$\bar{1}'$	—	1		$\angle 2'$	m'
$22'2'$	$\perp 2'$	$2'$	mmm'	$\perp 2'$	$2'mm'$
$2/m'$	—	m'		$\angle 2'$	m'
$\bar{4}'$	—	1	$\bar{4}'2'm$	$\perp 2'$	$2'$
$\bar{3}'$	—	1	$\bar{3}'m$	$\perp 2'$	$2'$
$32'$	$\perp 2'$	$2'$	$\bar{6}'2'm$	$\perp 2'$	$2'mm'$
$\bar{6}'$	—	m'		$\angle 2'$	m'
$42'2'$	$\perp 2'$	$2'$	$4/m'mm$	$\perp 2'$	$2'mm'$
$4/m'$	—	m'		$\angle 2'$	m'
$62'2'$	$\perp 2'$	$2'$	$6/m'mm$	$\perp 2'$	$2'mm'$
$6/m'$		m'		$\angle 2'$	m'

дены все двусторонние плоские двойниковые группы симметрии (первый столбец), направление оси вращения (второй столбец) и группа симметрии границы наклона, возникающая в результате вращения (третий столбец). В тех случаях, когда во втором столбце направление оси вращения не отмечено, ось вращения может быть любой прямой, параллельной границе срastания. Вращение вокруг любого другого, не показанного в таблице направления сделает границу недвойниковой. Как видно из этой таблицы, все симметричные границы наклона отвечают, как указывалось, группам симметрии диэдров. Образование границ кручения и наклона не является процессом плавным, а должно совершаться скачками. Это связано с тем, что при вращении граница или ряд, лежащий в границе, могут проходить через некоторые рациональные плоскости и ряды в кристалле. Рассмотрим это на одном примере. При кручении граней ромбододекаэдра вокруг нормали на 180° может произойти по меньшей мере три задержки, так как в плоскости этой грани лежат четыре важнейших направления кубического кристалла $[100]$, $[110]$, $[111]$, $[112]$. Если кристалл принадлежит к классу $m\bar{3}m$, то совпадение у двух взаимно вращающихся граней одного из двух направле-

ний, лежащих в плоскости срастания (направления [100] и [110] во внимание не принимаются, так как совпадение этих направлений в плоскостях срастания приводит к параллельной ориентировке), даст шпинелевый двойник $6'/m'mm'$, а при взаимно перпендикулярной ориентировке направлений [110] возникнет двойник с симметрией $4'/mmm'$.* При дальнейшем повороте возникнет опять шпинелевый двойник. По всей вероятности, этими явлениями объясняются описываемые в литературе скачки на кривых деформация—сила при исследовании пластичности кристаллов.**

При исследовании двойниковых границ различными методами (например, травлением) может оказаться полезным знание точечной симметрии направлений, лежащих в этих границах. Если граница плоская, то симметрия направлений будет описываться двухцветными односторонними и двусторонними группами, классическая симметрия которых относится к триклинной, моноклинной и ромбической сингониям. Направления, лежащие в односторонних и двусторонних плоскостях, показаны на рис. 2 [Шафрановский И. И., Мокиевский В. А., 1956 г.]. Этим 16 направлениям одноцветной симметрии соответствует 35 случаев двухцветной симметрии направлений (рис. 60).

Если плоскость чертежа является двусторонней плоскостью границы, то из всех 35 случаев только 11 могут отвечать симметрии направлений, лежащих в этой плоскости. В плоскости чертежа у этих направлений имеются только штрихованные элементы симметрии. Симметрия двойникового шва как линии, лежащей в плоскости чертежа, описывается тремя разновидностями односторонней двухцветной симметрии направлений m' , $2'$, $2'mm'$ плюс две классические группы 1 и $\perp m$. Все 14 случаев двухцветной симметрии направлений двойниковых границ помечены на рис. 60 буквой δ . Остальные случаи (21) описывают симметрию направлений, перпендикулярных к двойниковой границе (7 случаев, помеченных значком \perp), симметрию направлений, лежащих в двойниковой границе, нормальной к плоскости чертежа (4 случая, помеченных значком $\perp\delta$), и, наконец, 10 случаев, отмеченных значком \times , описывают симметрию направлений, проходящих через пересечение двух двойниковых границ. Последние случаи наблюдаются весьма редко.

В табл. 29 приведены все случаи точечной симметрии направлений, лежащих в двойниковых границах, как односторонних, так и двусторонних. Кроме того, здесь после точки с запятой приво-

* В настоящее время вопрос о возможности существования такого двойника, как и ряда других жестких двойников, остается открытым. Направление $4'$ является иррациональным для компонентов класса $m\bar{3}m$, в такой ориентировке компонентов не возникает решетки совпадающих узлов [76, 96].— *Ред.*

** Более распространена точка зрения, согласно которой скачки на кривых деформация—сила обусловлены эволюцией дислокационной структуры кристаллов, подключением в процессе деформации к основным системам скольжения вторичных систем.— *Ред.*

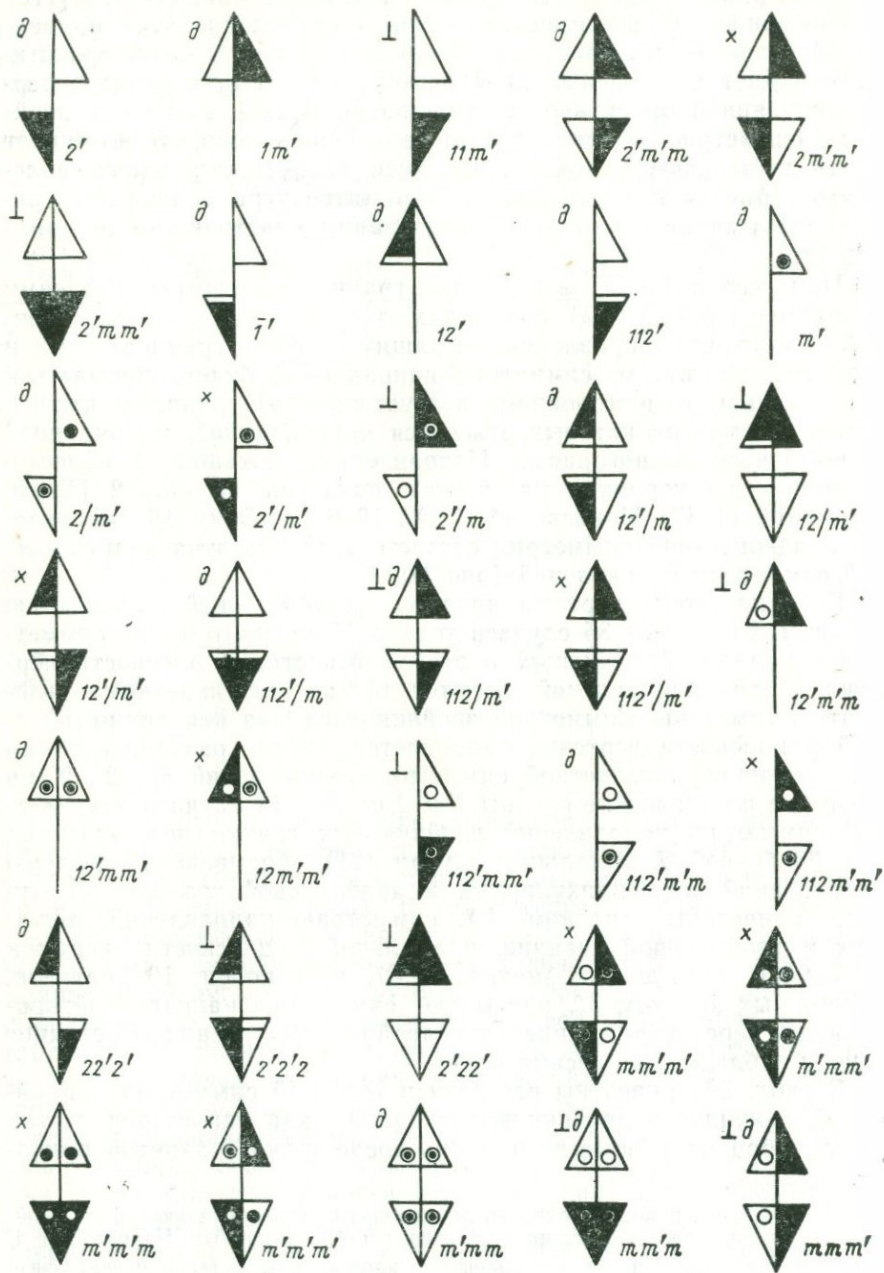


Рис. 60. 35 двухцветных направлений в односторонних и двусторонних плоскостях.

Симметрия направлений, лежащих в двойниковых границах

Симметрия границы	Симметрия направлений	Симметрия границы	Симметрия направлений
Односторонние границы			
$2'$	$1/2'$	$3m'$	$1, m', 1/m'; a'$
$4'$	$1/2$	$4m'm'$	$1/2, m'/2m'; a'/2m'$
$6'$	$1/2'$	$4'mm'$	$1/2, m'/2m', m/2m;$ $a'/2m'$
m'	$1, 1/m', m'; a'$	$6m'm'$	$1/2, m'/2m'; a'/2m'$
$2m'm'$	$1/2, m'/2m'; a'/m'2$	$6'mm'$	$1/2, m'/2'm, m/2'm';$ $a'/2'm$
$2'mm'$	$1/2', m'/2'm, m/2'm';$ $a'/2'm$		

Двусторонние границы

$2'$	$1, 2', 1/2'; 2'_1$	$\bar{3}'$	$\bar{1}'$
$22'2'$	$1/2, 2'/22'; 2'_1/22'$	$\bar{4}'$	$1/2$
$32'$	$2', 1; 2'_1$	$\bar{6}'$	$m'; a'$
$42'2'$	$2'/22', 1/2; 2'_1/22'$	$4/m'$	$m'/2; a'/2$
$62'2'$	$1/2, 2'/22'; 2'_1/22'$	$6/m'$	$m'/2; a'/2$
$\bar{1}'$	$\bar{1}'$	$\bar{4}'2'm$	$1/2, m/2m, 2'/22'$
m'	$m'; a'$	$\bar{6}'2'm$	$m', 2'mm'; 2'_1ma'$
$2/m'$	$m'/2; a'/2$	$\bar{3}'m$	$\bar{1}', m/2', 2'/m; 2'_1/m$
$2'/m$	$2'/\bar{m}, \bar{1}'; 2'_1/m$	$4/m'mm$	$m'/2, 2'mm'/22'm;$ $a'/2, 2'_1ma'/22'm$
$2'mm'$	$m', 2'mm', m'/2'm;$ $a', 2'_1ma', a'/2'm$	$6/m'mm$	$m'/2, 2'mm'/22'm;$ $a'/2, 2'_1ma'/22'm$
mmm'	$m'/2, 2'mm'/22'm;$ $a'/2, 2'_1ma'/22'm$		

дятся бесконечные двойниковые стержни на границе, которыми могут описываться некоторые явления, возникающие при совместном росте сдвойникованных кристаллов (Шустов А. В., [74]). В некоторых случаях к этим стержням добавляется симметрия подобия [72], что отмечается в цитированной работе А. В. Шустова.

При рассмотрении двойниковых границ с позиции симметрии дисконтинуума остановимся только на двусторонних границах срастания. Для этого используем группы симметрии слоев. Из 80 групп симметрии слоев 17 являются односторонними, а 63 двусторонними. У. Холзер показал [90], как применять для описания двойниковых границ в конкретных двойниках эти группы симметрии. Границы кручения при этом во внимание не принимались. Учет существования таких границ увеличивает число вариантов симметрии на границах, количество же групп останется прежним. Предположим, что граница образована двумя плоскими сетками с симметрией $P4mm$. Если параллельно этим сеткам проходит двойниковая плоскость симметрии m' , то появятся и двойниковые оси $2'$ и $2'_1$. Такая группа симметрии $P4/m'mm$ даст жесткий двойник, и точечная симметрия его будет отвечать тетрагональной голоэдри. При вращении на небольшой угол одного компонента двойника относительно другого вокруг 4 двойниковая плоскость m' исчезнет, а двойниковые оси сохранятся. Параметр пограничной ячейки изменится, группа симметрии ее станет осевой $P42'2'$.

Для нахождения симметрии дисконтинуума двойниковой границы нужно знать пространственную группу кристаллов, составляющих двойник, группы симметрии односторонних плоских сеток (17 групп) этой пространственной группы и точечные группы двойниковых границ. Если пространственная группа известна, то односторонняя симметрия плоских сеток данного кристалла находится из таблиц, составленных И. И. Шафрановским [50]. В этих таблицах, до сих пор никем не использованных, приведены для всех пространственных групп группы симметрии различных плоскостей аналогично формам по Г. Б. Бокию для всех точечных классов. Элементы точечной симметрии двойниковых границ нужно добавить к плоскостной симметрии дисконтинуума, найденной из таблиц И. И. Шафрановского. Так может быть найдена симметрия дисконтинуума на границе в двойнике. При этом только следует учитывать, к какому типу данная граница относится — к границе жесткой или нежесткой и нет ли кручения.

Для примера разберем некоторые случаи границ срастания в шпинелевом двойнике. Как известно, граница по (111) шпинелевого двойника трактуется как «ошибка в упаковке», что может быть записано так: $ABCABCABCBCBA...$ В этой записи подчеркнута прослойка гексагональной упаковки, которая и приводит к переориентации решетки кубического кристалла в двойниковое положение. Пространственная группа этой прослойки $\bar{P}6m2$,

а точечная группа двойниковой границы $\bar{6}'2'$. Односторонняя симметрия граней $\{111\}$ по таблицам И. И. Шафрановского в группе $Fm\bar{3}m$ отвечает $P3m1$. Добавляя к этой плоской группе двойниковую плоскость m' , получим шубниковскую группу $P\bar{6}'m2'$. Пользуясь таблицами И. И. Шафрановского, находим группы симметрии всех плоскостей кристаллов пространственной группы $Fm\bar{3}m$: (100) $P4mm$, (111) $P3m1$, (110) Pmm , (211) Cm , $(hkl) Pm$, $(hhl) Pm$, $(hkl) P1$. Все двойниковые границы для всех пространственных групп класса $m\bar{3}m$ должны быть без центра симметрии. В шпинелевом двойнике граница по $(11\bar{2}0)$ в двойниковой установке образована гранями $\{110\}$ компонентов и отвечает точечной группе $2'2'2'$, а симметрия грани (110) — $2mm$. Следовательно, на основании табл. 26 эта граница является нежесткой и отвечает кручению на определенный угол, так как одна из осей $2'$ параллельна $[111]$, а другая к ней перпендикулярна. Несмотря на то что граням $\{110\}$ отвечает группа Pmm , симметрия на границе будет $P2'2'2'$. Граница по $(10\bar{1}0)$ в двойниковой установке образована гранями $\{211\}$ компонентов с точечной симметрией m и пространственной Cm . Симметрия на границе $2'mm'$. Граница жесткая (без кручения, табл. 26). Следовательно, чтобы получить сведения о симметрии дисконтинуума на границе, необходимо добавить к группе Cm плоскость двойникования m' и в границе дополнительно появятся оси $2'$ и $2'_1$.

Такое рассмотрение можно продолжить для всех границ данного двойника. Ответ о симметрии дисконтинуума на границе не всегда может быть однозначным. Дело в том, что двойниковые оси $2'$ и плоскости m' в точечной группе симметрии двойника на границе дисконтинуума могут быть представлены винтовыми осями $2'_1$ и плоскостями скользящего отражения. Поэтому если параллельно плоской сетке с симметрией $P1$ проходит двойниковая плоскость, то получится два ответа: симметрия границы будет либо содержать плоскость скользящего отражения, либо простую плоскость симметрии. Окончательный ответ может быть получен, по нашему мнению, только путем тонкой экспериментальной проверки. Возможно, что присутствие на границе плоскости скользящего отражения или двойной винтовой оси симметрии как-то сказывается на росте кристалла и морфологии границы, так как в направлении скольжения один компонент будет относительно другого сдвинут на половину трансляции.

Нередко точечная симметрия границы срастания может не соответствовать симметрии дисконтинуума на этой границе. Это произойдет тогда, когда нормально к границе в кристаллах проходит винтовая ось симметрии или плоскость скользящего отражения с направлением скольжения перпендикулярно или косо к границе. Примером может служить граница по (0001) у двойника кварца по Либишу. Точечная симметрия границы (табл. 25) отвечает группе $\bar{6}'$, а в группе симметрии дисконтинуума присут-

ствует только m' , так как симметрия плоскости (0001) отвечает группе $P1$.

Двойниковую границу срастания можно рассматривать как двумерное полиморфное превращение [75].* Такая граница может расти и перемещаться при соответствующих благоприятных условиях. Дофинейский двойник кварца, как известно, является наглядным примером существования границы, симметрия и строение которой отвечает плоскости $(11\bar{2}0)$ β -кварца (высокотемпературной модификации). Симметрия дофинейского двойника отвечает симметрии β -кварца ($6'22'$ и 622). Точечная симметрия двойниковой границы срастания, совпадающей с плоскостью $(11\bar{2}0)$, в дофинейском двойнике $22'2'$ и равна точечной двусторонней пространственной симметрии плоскости того же символа у β -модификации кварца — $C222$. Пространственные группы β -кварца включают пространственные группы α -кварца: $P6_222 \supset \supset P3_221$, а $P6_422 \supset P3_121$. Структура β -кварца может быть получена из α -модификации путем добавления к последней осей 2 вдоль $[10\bar{1}0]$. Кремнекислородный тетраэдр при этом приобретает симметрию 222 . Существование границы в дофинейском двойнике, отвечающей по симметрии плоскости $(11\bar{2}0)$ — $C222$ β -кварца, является, по нашему мнению, причиной того, что дофинейские двойники легко поддаются раздвойникованию при α — β -превращениях [48]. Эта граница служит как бы двумерным зародышем β -модификации кварца.

Обратим внимание на то, что двойники кварца повторяют по точечной симметрии его полиморфные модификации. Высокотемпературный тридимит обладает симметрией $6/mmm$, а комплексный двойник Либиша — $6/mmm$ (32). Симметрия бразильского ($\bar{3}'m$) и простого двойника Либиша ($\bar{6}2'm'$) являются подгруппами группы симметрии комплексного двойника Либиша. Однако это равенство точечных групп симметрии двойников и полиморфных модификаций не дает права утверждать, что границы бразильского двойника, простого и комплексного двойников Либиша отвечают по пространственной симметрии сеткам тридимита, так как пространственная группа тридимита не включает пространственные группы α - и β -кварца, несмотря на то что высокотемпературный β -кварц может дать двойник с симметрией $6'/m'm'm'$. Для раздвойникования бразильского двойника и простого двойника Либиша необходимо, по нашему мнению, образцы нагреть до более высокой температуры, чем температура перехода β -кварца в тридимит, чтобы уничтожить правое и левое в бразильском двойнике и в простом двойнике Либиша.

Двойниковая граница может отвечать по симметрии discontinuity сеткам другой полиморфной модификации в том случае, если пространственная группа этой другой модификации будет

* Двойникоующие фазы на границе между компонентами двойника рассмотрены недавно Ю. А. Алексеевым (Кристаллография, 1976, т. 21, вып. 5). — *Ред.*

включать пространственную группу sdвойникованных кристаллов и структурные единицы будут занимать положения точек равной кратности. При этом точечная группа симметрии двойника должна быть надгруппой класса симметрии компонента. Поскольку здесь речь идет о возможности фазовых переходов второго рода, то следует отметить, что их исследование с позиции только точечных групп [18] недостаточно. Пространственные группы α - и β -кварца показывают, что между этими двумя модификациями возможен фазовый переход второго рода. Пространственная же группа β -кварца не имеет надгрупп гексагональной голоэдри, и поэтому переход в высокотемпературный тридимит (при любой пространственной группе гексагональной голоэдри) нельзя рассматривать как фазовый переход второго рода.

Из сказанного можно сформулировать следующее. Если при полиморфизме пространственная группа симметрии новой модификации описывается подгруппой федоровской группы исходного кристалла, то могут возникнуть двойники, тройники, четверники, шестерники и т. д., причем исчезнувшие элементы симметрии пространственной группы исходного кристалла могут стать элементами симметрии границ срастания двойников, тройников и т. д., т. е. будут элементами связи компонентов новой модификации.

Двойникованием на микроуровне («рентгеновское» двойникование) объясняются многочисленные случаи полиптии, нередко встречающиеся среди минералов (ZnS) и искусственных соединений (SiC), а также некоторые сверхструктуры, рентгенограммы которых индицируются при удвоенных параметрах.* У всех таких образований, внешне неотличимых от монокристаллов, ряд свойств определяется двойниковыми границами.

ПРОСТЫЕ ФОРМЫ ДВОЙНИКОВ

Под простой формой двойника будем понимать (аналогично простой форме кристалла) совокупность симметричных граней, ребер и вершин в данной двойниковой группе симметрии.

Гранные формы. В работе О. Виттке и Д. Карридо [99] перечислены двухцветные гранные формы. В записи этих форм отмечается только количество цветов (цветность). Общее число форм осталось неизвестным. В работе И. И. Шафрановского и В. А. Письменного [60] двухцветные гранные формы изображены рисунками, причем многие формы пропущены, так как при их выводе авторы исходили не из 58 двухцветных кристаллографических групп, а перебирали возможные способы раскраски моделей классических простых форм в два цвета.** Результаты этих

* Некоторые приемы расшифровки таких образований приведены в книге К. Дорнбергер-Шифф «Лекции по ОД-структурам» (1969 г.).— *Ред.*

** Этот метод привел к тому, что число, например, двухцветных кубов оказалось равным трем, а не шести, как это следует из табл. 9, моноэдров в нижней категории только два вместо четырех и т. д. Число некоторых форм определено правильно.

работ при рассмотрении форм двойников неудобны, так как в них отсутствуют формулы плоских односторонних точечных двухцветных групп (11 групп) для каждой двойниковой группы симметрии. Поэтому мы сочли полезным составить таблицу (табл. 30), в которой для каждой группы симметрии двойника были бы перечислены все возможные односторонние двухцветные и одноцветные группы, характеризующие симметрию граней простых форм двойника, для которых символы даны в двойниковой установке. Эти группы симметрии найдены из стереографических проекций двухцветных точечных групп, приведенных в книге В. А. Копчика [22].

В столбце А таблицы приведены точечные группы симметрии двойников (58 кристаллографических групп) и три одноцветные группы (1, 3 и 23), для которых нет двухцветных аналогов. Для двухцветных групп в скобках отмечена одноцветная подгруппа индекса 2. Такая таблица представляется удобной потому, что в ней указаны и все разновидности простых форм по Г. Б. Боккию [8]—146 форм, как в табл. 2. Для того чтобы найти симметрию этих форм, достаточно упразднить штрихи во всех формулах, стоящих на первом месте в столбце Б. На втором месте в этом столбце, после запятой, указана группа симметрии границы срастания (двусторонняя граница), образуемая этими формами. Если в записи указана только одна формула, то это значит, что внешняя форма и внутренняя граница имеют одни и те же формулы симметрии. Из формул, стоящих на втором месте, путем удаления штрихов может быть найдена двусторонняя симметрия плоскостей кристалла, что показано стрелками в табл. 2. Однако это можно найти в данной таблице не для всех 32 классов, так как, например, для всех centrosymmetric одноцветных классов все двусторонние плоскости должны иметь центр, а двойниковые границы для этих классов симметрии должны быть ацентрические.

Обратим внимание на две группы симметрии двойников— $4'$ и $4'/m$. Здесь все двусторонние границы срастания не имеют переворачивающих операций симметрии, что отмечено значком $'$. Граница таких двойников описывается односторонними группами (в данном случае $4'$), а для описания симметрии дисконтинуума здесь пригодны все 17 групп, а не 16, как это отмечалось У. Холзером [90], так как он считал, что группа $P1$ не описывает двойниковой односторонней границы.

Границы срастания, которые описываются односторонними точечными и пространственными группами, представляют особый интерес и до настоящего времени часто выпадали из поля зрения при исследовании двойников. Такие границы встречены нами на двойниках искусственных кристаллов сфалерита с симметрией $6'mm'$. Граница визуально проходила по плоскости тетраэдра, причем срастались грань (111) одного кристалла с гранью $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ другого кристалла, повернутого на 60° вокруг 3 относительно первого. Поиск аналогичных двойников у кварца не увенчался

Симметрия граней простых двойниковых форм

Группа симметрии двойников	Симметрия граней простых двойниковых форм						
	100	010	001	hko	0hk	h0l	hkl
А	Б						
1	1						
$\bar{1}$ ' (1)	1, $\bar{1}$ '						
2' (1)	1, 2'	2', 1	1, 2'	1, 1	1, 2'	1, 1	1, 1
m' (1)	m', 1	1, m'	m', 1	1, 1	m', 1	1, 1	1, 1
2'/m (m)	m, 2'/m	2', $\bar{1}$ '	m, 2'/m	1, $\bar{1}$ '	m, 2'/m	1, $\bar{1}$ '	1, $\bar{1}$ '
2/m' (2)	m', $\bar{1}$ '	2, 2/m'	m', $\bar{1}$ '	1, $\bar{1}$ '	m', $\bar{1}$ '	1, $\bar{1}$ '	1, $\bar{1}$ '
2'/m' ($\bar{1}$)	m', 2'	2', m'	m', 2'	1, 1	m', 2'	1, 1	1, 1
2m'm' (2)	m', m'	2m'm', 1	1, 1	m', 1	1, 1	1, 1	1, 1
2'mm' (m)	m, 2'mm'	m', 2'	2'mm', 1	1, 2'	m', 1	m, 1	1, 1
22'2' (2)	2, 22'2'	2', 2'	1, 2'	1, 1	1, 1	1, 1	1, 1
mm'm' (2/m)	2m'm', 22'2'	2'mm', 2'mm'	m', 2'	m, 1	m', 2'	1, 1	1, 1
m'm'm' (222)	2m'm', 2/m'			m', $\bar{1}$ '		1, $\bar{1}$ '	1, $\bar{1}$ '
mmm' (2mm)	2mm, mmm'	2'mm', 2'/m	m, 2'/m	m', $\bar{1}$ '	m, 2'/m	1, $\bar{1}$ '	1, $\bar{1}$ '
	001	100, 010	110	hko	h0l, 0kl	hhl	hkl
4' (2)	4', 1			1, 1			
4'/m (2/m)	4', 1	m, 1			1, 1		
4/m' (4)	4, 4/m'	m', $\bar{1}$ '			1, $\bar{1}$ '		
4'/m' ($\bar{4}$)	4', 2/m'	m', 1'			1, $\bar{1}$ '		
4'mm' (2mm)	4'mm', 1	m, 1	m', m'	1, 1	m, 1	m', 1	1, 1
4m'm' (4)	4m'm', 1	m', m'		1, 1	m', 1		1, 1
4'22' (222)	4', 22'2'	2, 1	2', 2'	1, 1	1, 2'		1, 1
42'2' (4)	4, 42'2'	2', 2'		1, 1	1, 2'		1, 1
4'/m'mm' (mmm)	4'mm', 4'2'm	2mm, 1	2'mm', 2'mm'	m, 1	m', 2'		1, 1
4/m'm'm' (4/m)	4m'm', 42'2'	2'mm', 2'mm'		m, 1	m', 2'		1, 1
4/m'mm (4mm)	4mm, 4/m'mm	2'mm', 2'/m		m', $\bar{1}$ '	m, 2'/m		1, $\bar{1}$ '
4/m'm'm' (422)	4m'm', 4/m'	2m'm', 2/m'		m', $\bar{1}$ '			1, $\bar{1}$ '
4'/m'mm' ($\bar{4}2m$)	4'mm', mmm'	2m'm', 2'/m	2'mm', 2'/m	m', $\bar{1}$ '	m, 2'/m		1, $\bar{1}$ '
$\bar{4}$ ' (2)	2, $\bar{4}$ '			1, 1			
$\bar{4}$ '2'm (2mm)	2mm, $\bar{4}$ '2'm	2', 2'	m, 1	1, 1	1, 2'	m, 1	1, 1
$\bar{4}2'm'$ ($\bar{4}$)	2m'm', 22'2'	2', 2'	m', m'	1, 1	1, 2'	m', 1	1, 1
$\bar{4}$ '2m' (222)	2m'm', $\bar{4}$ '	2, 1	m', m'	1, 1	m', 1		1, 1

A	B						
	0001	11 $\bar{2}$ 0	10 $\bar{1}$ 0	$hk\bar{1}0$	$hh\bar{2}hl$	$h0hl$	$hk\bar{1}l$
3	3			1			
$\bar{3}'$ (3)	3, $\bar{3}'$			1, $\bar{1}'$			
$3m'$ (3)	$3m', 1$	$m', 1$	$1, m'$	$1, 1$ $m', 1$		1, 1	
$32'$ (3)	3, $32'$	$2', 1$	$1, 2'$	1, 1		1, 2'	1, 1
$\bar{3}m'$ ($\bar{3}$)	$3m', 32'$	$2', m'$	$m', 2'$	1, 1		$m', 2'$	1, 1
$\bar{3}'m'$ (32)	$3m', \bar{3}'$	$2, 2/m'$	$m', \bar{1}'$	1, $\bar{1}'$		$m', \bar{1}'$	1, $\bar{1}'$
$\bar{3}'m$ ($3m$)	$3m, \bar{3}'m$	$2', \bar{1}'$	$m, 2'/m$	1, $\bar{1}'$		$m, 2'/m$	1, $\bar{1}'$
$6'$ (3)	$6', 1$		$1, 2'$			1, 1	
$6'/m'$ ($\bar{3}$)	$6', \bar{6}'$		$m', \bar{1}'$			1, $\bar{1}'$	
$6/m'$ (6)	$6, 6/m'$		$m', \bar{1}'$			1, $\bar{1}'$	
$6'/m$ ($\bar{6}$)	$6', \bar{3}'$		$m, 2'/m$			1, $\bar{1}'$	
$6'mm'$ ($3m$)	$6'mm', 1$	$m, 2'mm'$	$m', 2'$	$1, 2'$ $m, 1$	$m', 1$		1, 1
$6m'm'$ (6)	$6m'm', 1$	m', m'		1, 1	$m', 1$		1, 1
$6'22'$ (32)	$6', 32'$	$2, 22'2'$	$2', 2'$	1, 2'		1, 1	
$62'2'$ (6)	$6, 62'2'$	$2', 2'$		1, 1	1, 2'		1, 1
$6'/m'mm'$ ($\bar{3}m$)	$6'mm',$ $\bar{6}'2'm$	$2m'm',$ $22'2'$	$2'mm',$ $2'mm'$	$m', 2'$		$m, 1$	1, 1
$6/mm'm'$ ($6/m$)	$6m'm',$ $62'2'$	$2'mm', 2'mm'$		$m, 1$		$m', 2'$	1, 1
$6/m'mm$ ($6mm$)	$6mm,$ $6/m'mm$	$2'mm', 2'/m$		$m', \bar{1}'$		$m, 2'/m$	1, $\bar{1}'$
$6'/mmm'$ ($\bar{6}2m$)	$6'mm',$ $\bar{3}'m$	$2mm,$ $m'mm$	$2'mm',$ $2'/m$	$m, 2'/m$		$m', \bar{1}'$	1, $\bar{1}'$
$6/m'm'm'$ (622)	$6m'm',$ $6/m'$	$2m'm', 2'/m'$			$m', \bar{1}'$		1, $\bar{1}'$
$\bar{6}$ (3)	3, $\bar{6}'$		$m', 1$			1, 1	
$\bar{6}'2'm$ ($3m$)	$3m, \bar{6}'2'm$	$2'm'm, 1$	$m', 2'$	$m', 1$ $m, 1$		1, 2'	1, 1
$\bar{6}'2m'$ (32)	$3m', \bar{6}'$	$2m'm', 1$	m', m'	$m', 1$		1, 1	
$\bar{6}2'm'$ ($\bar{6}$)	$3m', 32'$	$2'mm', 1$	$m, 2'mm'$	$m, 1$ $m', 1$		1, 2'	1, 1
		100	110	111	$hk0$	hhl, llh	hkl
23	2	1	3	1			
$m'\bar{3}'$ (23)	$2m'm', 2/m'$	$m', \bar{1}'$	$3, \bar{3}'$	$m', \bar{1}'$		1, $\bar{1}'$	
$\bar{4}'3m'$ (23)	$2m'm', \bar{4}'$	m', m'	$3m', 1$	1, 1	$m', 1$		1, 1
$4'32'$ (23)	$4'22'2'$	$2', 2'$	$3, 32'$	1, 1		1, 2'	1, 1
$m\bar{3}m'$ ($m\bar{3}$)	$4'mm', \bar{4}'2'm$	$2'mm', 2'mm'$	$3m', 32'$	$m, 1$	$m', 2'$		1, 1
$m'\bar{3}'m$ ($\bar{4}3m$)	$4'mm', mmm'$	$2'mm', 2'/m$	$3m, \bar{3}'m$	$m', \bar{1}'$	$m, 2'/m$		1, $\bar{1}'$
$m'\bar{3}'m'$ (432)	$4m'm', 4/m'$	$2m'm', 2'/m'$	$3m', \bar{3}'$		$m', \bar{1}'$		1, $\bar{1}'$

успехом. Окончательное суждение о строении таких двойниковых границ может быть высказано после накопления экспериментального материала.

Как было сказано выше, физикам и петрографам известны некогерентные границы, сопровождающиеся нередко макроскопическими напряжениями. Такие границы, как отмечается в литературе, не совпадают с плоскостями двойникования m' . Однако этого условия недостаточно. Как уже говорилось, граница может иметь извилистый характер, но будет содержать отрицательные операции симметрии $2'$ и $\bar{1}'$. Некогерентной границей скорее всего следует считать такую границу срастания, которая не содержит переворачивающих операций симметрии: $2'$, m' , $\bar{1}'$ и $4'$. Эти границы могут описываться односторонними плоскими группами симметрии как континуума, так и дисконтинуума и могут не иметь макроскопических напряжений. Совершенно не обязательно, чтобы такие границы были образованы одноименными гранями компонентов. Симметрия односторонней границы может быть найдена исходя из суперпозиции групп симметрии срастающихся плоскостей. Из элементов симметрии таких границ сохраняются только те, которые являются общими для обеих срастающихся плоскостей (принцип симметрии Кюри). Например, при срастании куба и октаэдра кристаллов класса $m\bar{3}m$ граница может дать только две группы симметрии — m и 1 .

Поскольку в кристаллографии принято результаты вывода представлять в виде таблиц и итоговым числом, то нами были заново выведены все простые гранные двухцветные формы. Следует заметить, что вывод двухцветных форм может быть осуществлен только на уровне 146 простых форм по Г. Б. Бокию, так как различие двухцветных форм, даже когда отдельная грань одноцветна, определяется двухцветным классом. Вывод можно осуществить различными путями, но для того, чтобы избежать ошибок при подсчете общего числа, удобнее всего пользоваться самым элементарным способом с помощью табл. 9, из которой число различных двухцветных форм находится по числу двухцветных групп, в которых данная форма может встречаться. Результаты такого элементарного вывода приведены в прил. 3. Общее число двухцветных форм оказалось равным 305,* а не 147, как в работе И. И. Шафрановского и В. А. Письменного [60].

Реберные формы. Ребра двойника представлены частью ребер одного компонента и ребрами пересечения граней двух компонентов (черно-белыми ребрами). Симметрия двухцветных ребер двойников описывается пятью группами, дающими при учете ориентировки двухцветных элементов симметрии относительно ребра шесть случаев: $2'$, m' , $\perp m'$, $2m'm'$, $2'mm'$, $2'\perp mm'$. Вывод реберных форм двойников осуществляется так же, как и вывод одно-

* Незадолго до смерти В. А. Мокиевский уточнил этот результат. Число двухцветных простых форм равно 304 [Мокиевский В. А., Махмуд Алия А., 1977 г.]— *Ред.*

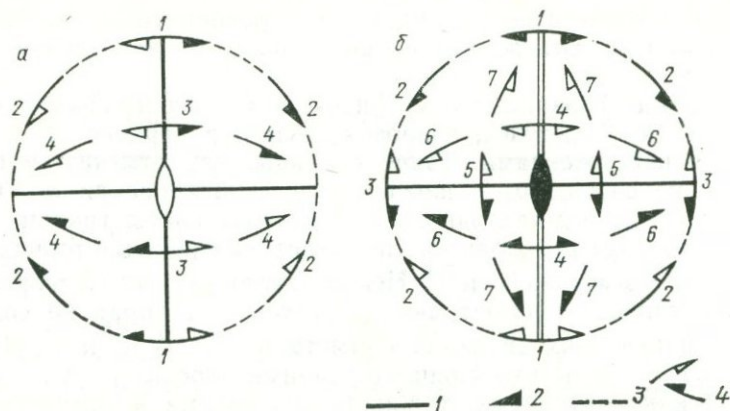


Рис. 61. Примеры вывода реберных форм для двухцветных классов.

a — $2m'm'$; *b* — $2'mm'$; 1 — плоскости m' ; 2 — ось $2'$; 3 — окружность проекции; 4 — проекции реберных форм. Ребра, принадлежащие к одной форме, помечены одной цифрой.

цветных реберных форм (с. 48, рис. 9). Для этого удобно пользоваться стереографическими проекциями черно-белых групп из книги В. А. Копчика [22]. Пример вывода двухцветных реберных форм для групп $2m'm'$, $2'mm'$ приведен на рис. 61. Если ребро одноцветно, то это является следствием пересечения граней одного компонента. Если же оно двухцветно, то возникло в результате пересечения граней двух компонентов или одного, если нормально к ребру проходит m' .

Все двухцветные реберные формы можно найти из таблицы одноцветных реберных форм, помещенной в прил. 1, и табл. 9 тем же методом, что и черно-белые гранные формы.

Вершинные формы. Вершины двойников могут быть образованы гранями как одного, так и обоих компонентов. Двухцветные вершины должны отвечать по симметрии 11 плоским двухцветным односторонним группам: $2'$, $4'$, $6'$, m' , $2m'm'$, $2'mm'$, $3m'$, $4m'm'$, $4'tmm'$, $6m'm'$, $6'tmm'$. В вершинах двойников могут сходиться ребра при входящих и выходящих углах. Очевидно, что число двухцветных вершинных форм будет равно числу двухцветных гранных форм. Некоторые вершины двойников имеют ту особенность, что часть ребер может проходить через точку пересечения (вершину), не претерпевая излома (см. рис. 70). Как будет показано ниже, это обстоятельство характерно для многогранников с входящими углами и находит отражение на стереографической проекции. Такие вершины двойников обычно являются черно-белыми. Нередко они имеют место и у монокристаллов, как, например, при пересекающейся штриховке и при случаях имитации монокристаллом двойника [61].

Перечислением двухцветных форм для каждого двойника не ограничивается его морфология. Точнее, это еще только часть морфологии двойников. При исследовании морфологии двойников

важно знать, какие простые гранные формы отдельных индивидов образуют те или иные формы в двойнике. Такое изучение, естественно, имеет смысл проводить только для так называемых «двойников прорастания», симметрия которых описывается двухцветной точечной группой. Еще раз обратим внимание на то, что термин «двойник прорастания» является условным, так как при достаточно крупных индивидах в любом «двойнике прорастания» можно выделить область, рассматриваемую как двойник срастания. Эти области нельзя выделить в том случае, когда двойникование происходит на уровне элементарных ячеек.

СИММЕТРИЯ ПРОСТЫХ ФОРМ КОМПОНЕНТОВ И ДВОЙНИКОВ

Для нахождения симметрии простых форм и двусторонних границ двойников для всех классов симметрии компонентов необходимо иметь сведения о точечной группе симметрии двойника, о симметрии простых форм в данной двойниковой группе, о классе симметрии компонентов и о симметрии простых форм компонента. Все эти сведения можно получить из предыдущего материала (табл. 2, 9, 12, 13, 30). Поскольку у двойников некоторые простые формы описываются одноцветными подгруппами двухцветных групп, таблицы двухцветных подгрупп шубниковских групп, приведенные у В. А. Копчика [22], не дают всех сведений для полной морфологической характеристики двойников. Для решения этой задачи удобнее всего использовать стереографические проекции двойников, построенные по способу, предложенному Н. Г. Соколовой [35], который заключается в том, что на стереографическую проекцию класса симметрии одного компонента в стандартной установке наносится проекция двойниковой группы. Второй компонент не показывается, так как его положение можно легко представить путем штрихованных операций двойниковой группы. Эти проекции дают возможность быстро находить, какие грани компонентов будут давать те или иные простые формы двойника. Из этих же проекций легко находится и двусторонняя симметрия границ срастания, и грани компонентов, образующих эти границы. Для контроля правильности результатов следует использовать табл. 12, 13, 25—27, 30. Данную задачу можно решать и без стереографических проекций, пользуясь только таблицами. Оба способа одинаково приемлемы, но второй лишен наглядности.

Рассмотрим подробно шпинелевый двойник (рис. 62), который является жестким. Символы плоскостей двойника будем давать в гексагональной установке, так как симметрия его $6'/m'mm'$. Грани $\{0001\}$ двойника совпадают с гранями $\{111\}$ компонентов. Грани октаэдра имеют симметрию $3m$ и могут дать только две плоские односторонние группы: $6'tm'$ и $3m'$ (табл. 25). Очевидно, что только первая группа будет удовлетворять условию шпинелевого двойника, что видно из рис. 62. Грани $\{1120\}$ имеют симметрию $2m'm'$ (табл. 30) и представлены у компонентов гранями

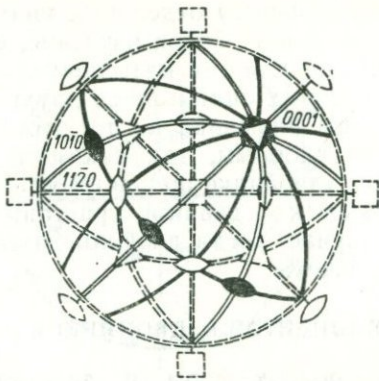


Рис. 62. Проекция шпинелевого двойника по Н. Г. Соколовой.

Обозначения двойниковых элементов симметрии аналогичны приведенным на рис. 61. Элементы симметрии компонента, не вошедшие в состав двойниковой группы симметрии, показаны штрихами.

{110}, имеющими симметрию $2mm$ (рис. 62). Грани с такой симметрией могут дать двойниковую одностороннюю группу только при вращении (табл. 26). Грани $\{10\bar{1}0\}$ двойника имеют симметрию $2'mm'$. Такую группу симметрии могут дать только грани компонентов с симметрией m (табл. 25). В классе $m\bar{3}m$ это могут быть только грани $\{hhl\}$ и $\{hk0\}$. Поскольку рассматриваемая простая форма двойника параллельна $[111]$ компонента, данному условию симметрии будет удовлетворять только грань (211) (рис. 62). Симметрия граней $\{hk\bar{1}0\}$ у двойника отвечает m' . Эта форма также принадлежит к зоне $[111]$ компонента и может быть образована только гранями $\{hkl\}$ зоны $[111]$. Грани $\{hh2\bar{h}l\}$ двойника имеют симметрию m и могут быть получены из граней компонентов с симметрией 1 и m (табл. 25, 26). Из рис. 62 видно, что зона, в которой лежат нормали к граням $\{hh2\bar{h}l\}$, проходит через проекции нормалей к граням $\{hkl\}$, $\{113\}$ и $\{120\}$ зоны $[211]$ компонента. Эти грани компонента действительно имеют симметрию 1 и m . Симметрия $\{h0\bar{h}l\}$ отвечает m . Ее могут дать только те грани компонентов, которые содержат m в качестве подгруппы. В данном случае это будут грани зон $[110]$ компонента, оси которых лежат в плоскости (0001) двойника, а именно $\{100\}$, $\{111\}$, $\{110\}$, $\{hhl\}$ и $\{llh\}$. Грани $\{hk\bar{1}l\}$ двойника имеют симметрию 1 , но могут быть представлены всеми плоскостями компонента, проекции которых находятся внутри сферического треугольника общих форм в двойниковой группе симметрии. Как видно из рис. 62, формы $\{hk\bar{1}l\}$ двойника могут быть представлены гранями $\{hkl\}$, $\{hhl\}$, $\{llh\}$ и $\{hk0\}$ компонента.

Двусторонняя симметрия границ срастания находится аналогичным образом. Для шпинелевого двойника плоские границы срастания, имеющие переворачивающие (отрицательные) операции симметрии, должны быть параллельны m' и $2'$. Это будут те плоскости компонента, которые принадлежат к зонам $[0001]$ и $[1010]$ двойника, так как параллельно этим плоскостям всегда проходят двойниковые оси $2'$. Границы, образованные другими

гранями, не будут содержать отрицательных операций симметрии, и группа симметрии нами будет в дальнейшем условно отмечаться единицей. Как было сказано выше, это не совсем точно, так как в ряде случаев внутренние границы, не содержащие отрицательных операций симметрии, могут быть описаны односторонними точечными и пространственными группами. Здесь же мы ограничимся рассмотрением только таких границ, группа симметрии которых содержит отрицательные операции симметрии.

Вернемся к шпинелевому двойнику. Граница, параллельная (0001), имеет симметрию $\bar{6}'2'm$ (табл. 30). Эта граница образована гранями $\{111\}$ компонентов. Из табл. 25 видно, что грани с симметрией $3m$ действительно дают жесткую двустороннюю границу с симметрией $\bar{6}'2'm$. Другая жесткая группа симметрии границы, которую может дать грань с симметрией $3m - \bar{3}'m$, для шпинелевого двойника не подходит, так как содержит $\bar{1}'$ и не является двухцветной подгруппой группы симметрии двойника (см. табл. 24). Грань $(11\bar{2}0)$ представлена в двойнике гранями компонентов $\{110\}$ с симметрией $2mm$. Из трех двусторонних двойниковых групп только одна $2'2'$ будет удовлетворять шпинелевому двойнику (табл. 25, 26, 30). Подобное рассмотрение остальных двусторонних границ можно продолжить. Но мы на этом остановимся, так как методика совершенно аналогична описанной и при помощи проекции (рис. 62) приобретает большую наглядность. Важно отметить, что границы, как односторонние, так и двусторонние, у жестких двойников могут быть и нежесткими, но обязательно минимум одна односторонняя или одна двусторонняя граница должна быть жесткой. У нежестких двойников все границы должны быть нежесткими и отвечать по симметрии границам кручения или наклона.

В табл. 31 подробно описаны наиболее широко известные двойники минералов и мягкие двойники класса $m\bar{3}m$, которые могут встретиться при пластической деформации, так как излюбленным материалом для исследователей пластичности кристаллов служат образцы поваренной соли, фтористого лития, хлористого цезия и другие кристаллы кубической голоэдри. В столбце А указаны символы граней простых форм двойника в двойниковой установке и их симметрия. В столбце Б приводятся символы и симметрия простых форм компонентов. Если символы не указаны, то это значит, что они соответствуют символам, приведенным в столбце А. В столбце В приведены группы симметрии внутренних границ. В заголовках для каждого двойника указаны класс симметрии компонента, название минерала и группа симметрии двойника. Такая же характеристика двойников, но менее подробная, дается для всех законов двойникования в работе В. А. Мокиевского и Н. Г. Соколовой [1969]. Здесь эти данные не приводятся.

Симметрия внешних и внутренних границ некоторых двойников

Символ и симметрия граней	Символ и симметрия граней индивидов двойника	Симметрия границ	Символ и симметрия граней	Символ и симметрия граней индивидов двойника	Симметрия границ
А	Б	В	А	Б	В
1. Жесткие двойники			32 Бразильский двойник кварца $\bar{3}'m'$		
$\bar{4}3m$ Сфалерит $m'\bar{3}'m$					
100, $4'mm'$	$2mm$	mmm'	0001, $3m'$	3	$\bar{3}'$
110, $2'mm'$	m	$2'/m$	11 $\bar{2}0$, 2	2	$2/m'$
111, $3m$	$3m$	$\bar{3}'m$	10 $\bar{1}0$, m'	1	$\bar{1}'$
$hk0$, m'	1	$\bar{1}'$	$hk\bar{1}0$, 1	1	$\bar{1}'$
hhl , m	m	$2'/m$	$hh\bar{2}hl$, 1	1	$\bar{1}'$
hkl , 1	1	$\bar{1}'$	$h\bar{0}hl$, m'	1	$\bar{1}'$
$m\bar{3}$ Пирит $m\bar{3}m'$			$hk\bar{1}l$, 1	1	$\bar{1}'$
100, $4'mm'$	$2mm$	$\bar{4}'2'm$	32 Дофинейский двойник кварца $6'22'$		
110, $2'mm'$	m	$2'mm'$	0001, 6	3	$32'$
111, $3m'$	3	$32'$	11 $\bar{2}0$, 2	2	$22'2'$
$hk0$, m	m	1	10 $\bar{1}0$, $2'$	1	$2'$
hhl , m'	1	$2'$	$hk\bar{1}0$, 1	1	$2'$
hkl , 1	1	1	$hh\bar{2}hl$, 1	1	$2'$
$m\bar{3}m$ Шпинель $6'/m'mm'$			$h\bar{0}hl$, 1	1	1
0001, $6'mm'$	(111) $3m$	$\bar{6}'2'm$	$hk\bar{1}l$, 1	1	1
11 $\bar{2}0$, $2m'm'$	(110) $2mm$	$22'2'$	$m\bar{3}m$ Без названия $4'/mmm'$		
10 $\bar{1}0$, $2'mm'$	(112) m	$2'mm'$	001, $4'mm'$	(110) $2mm$	$\bar{4}'2'm$
$hk\bar{1}0$, m'	(hkl) зоны [111] 1	$2'$	100, $2mm$	(100) $4mm$	1
$hh\bar{2}hl$, m'	Грани зон [112] — (hkl) 1, (120) m , (113) m	$2'$	110, $2'mm'$	(110) $2mm$	$2'mm'$
$h\bar{0}hl$, m	Грани зон [110] — (100) $4mm$, (111) $3m$, (hhl) m , (110) $2mm$	1	$hk0$, m	(hhl) m	1
$hk\bar{1}l$, 1	Остальные грани, не входящие в состав предыдущих форм	1	Грани зон [110] — (hhl) m , (111) $3m$		
$\bar{3}m$ Кальцит $6'/m'mm'$			$h0l$, $0kl$, m	Грани зон [100] и [110] — (111) $3m$, (100) $4mm$, (hhl) m , ($hk0$) m	1
0001, $6'mm'$	$3m$	$\bar{6}'2'm$	hhl , m'	(hkl) 1, (hhl) m , ($hk0$) m	$2'$
11 $\bar{2}0$, $2m'm'$	2	$22'2'$	hkl , 1	Остальные формы	1
10 $\bar{1}0$, $2'mm'$	m	$2'mm'$			
$hk\bar{1}0$, m'	1	$2'$			
$hh\bar{2}hl$, m'	1	$2'$			
$h\bar{0}hl$, m	m	1			
$hk\bar{1}l$, 1	1	1			

Символ и симметрия граней	Символ и симметрия граней индивидов двойника	Симметрия границ	Символ и симметрия граней	Символ и симметрия граней индивидов двойника	Симметрия границ
А	Б	В	А	Б	В

2. Нежесткие двойники

$\bar{3}m$ Кальцит $mm'm'$

100, $2m'm'$	$(11\bar{2}0) 2$	$22'2'$
010, 001, $2'mm'$	$(h\bar{0}hl) m$	$2'mm'$
$hk0, h0l, m'$	$(h\bar{h}2hl) 1, (h\bar{0}hl) m, (hk\bar{l}) 1$	$2'$
$0kl, m$	$(0001) 3m,$	1
hkl, m	$(h\bar{0}hl) m, (10\bar{1}0) m$	1
	Остальные формы	1

$\bar{1}$ Карлсбадский двойник $2'/m'$

010, $2'$	Грань \perp [001] 1	m'
$h0l, m'$		$2'$
$hkl, 1$	Грани зоны [001] — (100), (010), $(hk0) 1$	1
	Остальные формы	1

$\bar{1}$ Альбитовый двойник $2'/m$

010, $2'$	$(010) 1$	m'
$h0l, m'$	Грани зоны, ось которой \perp (010) 1	$2'$
$hkl, 1$		Остальные формы

Мягкие двойники класса $m\bar{3}m$, возникновение которых возможно при пластической деформации

Двойник $4/m'm'm'$

001, $4m'm'$	$(100) 4mm$	$42'2'$
100, 110, $2'mm'$	$(hk0) m$	$2'mm'$
$hk0, m$	$(100) 4mm,$ $(110) 2mm, (hk0) m$	1
$hhl, h0l, m'$		$(hhl) m, (hkl) 1$
$hkl, 1$	Остальные формы	1

Двойник $\bar{3}m'$

0001, $3m'$	$(111) 3m$	$32'$
$11\bar{2}0, 2'$	(hkl) зоны [111] 1	m'
$10\bar{1}0, m'$	(hkl) зоны [111] 1	$2'$
$hk\bar{l}0, 1$	(hkl) зоны [111] 1, (110) $2mm,$ (112) m	1
$hh\bar{2}hl, 1$	$(hhl) m,$ $(hk0) m, (hkl) 1$	1
$hk\bar{l}, 1$	Остальные формы	1

Двойник $mm'm'$

100, $2m'm'$	$(110) 2mm$	$22'2'$
001, 010, $2'mm'$	$(hhl) m$	$2'mm'$
$hk0, m'$	$(hkl) 1$	$2'$
$h0l, m'$	Грани зон $[hhl], (hhl)$ и $(hk0) m, (hkl) 1$	$2'$
$0kl, m$		Грани зоны $[110] - (hhl) m,$ (111) $3m,$ (100) $4mm,$ (110) $2mm$
$hkl, 1$	Остальные формы	1

Двойник $2'/m'$

010, $2'$	$(hkl) 1$	m'
$h0l, m'$	Грани зоны $[hkl] - (hkl) 1,$ $(hhl) m, (hk0) m$	$2'$
$hkl, 1$		Остальные формы

О ВХОДЯЩИХ УГЛАХ ДВОЙНИКОВ

В морфологии двойников входящие углы играют существенную роль. Они, как было сказано выше, являются признаком, помогающим обнаружить наличие двойника. Помимо входящих углов у сдвойникованных кристаллов имеются и «выходящие» углы, на которые обычно не обращается внимание исследователей. Входящие и «выходящие» углы могут быть образованы как одноименными, так и разноименными гранями компонентов. Уже отмечалось значение входящих углов для роста сдвойникованных кристаллов алмаза, когда входящие углы играли роль удобных «кресел» для посадки частиц при кристаллизации. Однако не всегда при двойниковании могут возникать входящие углы и не всегда эти углы являются источниками слоев роста, так же как и входящие углы у монокристаллов. «Выходящие» углы двойников совершенно не изучены. Они, очевидно, могут играть ту же роль при образовании кристаллов, что и реберные формы у монокристаллов. Этот вопрос требует тщательных экспериментальных исследований и наблюдений на природных кристаллах.

Симметрия входящих и «выходящих» углов, образованных одноименными гранями, может отвечать только пяти группам: 1 , $2'$, m' , $\perp m$ и $2'mm'$. Этими же группами описывается, как уже отмечалось, симметрия ребер у монокристаллов (штрихи нужно зачеркнуть) и симметрия двойниковых швов. Симметрия входящих и «выходящих» углов, образованных разноименными гранями компонентов, может отвечать только двум группам: 1 и $\perp m$. В последнем случае обе грани, образующие входящий угол, должны содержать в своих односторонних группах симметрии операцию m . По симметрии входящих углов можно найти ось вращения компонентов двойника, если последний, например, является мягким. Напомним, что мягкие двойники могут быть только в тех классах симметрии, кристаллы которых имеют грани с симметрией 2 , 4 , 6 , m , $2mm$, $3m$, $4mm$ и $6mm$.

Представим себе образование входящих углов при двойниковании. Эти углы могут возникать путем излома или изгиба данной грани вдоль одного из направлений, лежащих в грани, и вдоль направления, не лежащего в грани. Первый случай наиболее интересен, так как позволяет быстро найти двойниковую переориентировку. Рассмотрим грани с симметрией $3m$ и $4mm$. В плоскости грани с симметрией $3m$ принципиально можно выбрать три различных направления: вдоль m , перпендикулярно к m и косое направление. При изгибе (повороте) вокруг первого из них плоскость симметрии сохранится, но станет двойниковой m' и займет другое положение в кристалле. При изгибе вокруг второго направления сохранится одноцветная плоскость m , а при изгибе вокруг третьего направления симметрия входящего угла будет равна 1 . В случае грани с симметрией $4mm$ также возможны три направления оси изгиба, выраженные символами $[10]$, $[11]$ и $[pq]$. Первые два направления имеют одну и ту же симметрию

$2mm$, и при изгибе по этому направлению двойниковая граница даст группу $2'mm'$. Третий вариант $[pq]$ также приведет к двойниковой границе с симметрией $2'$. Вращение (перегиб) вокруг оси, не лежащей в плоскости грани, приведет к симметричной переориентировке только в том случае, если ось вращения будет лежать в плоскости симметрии. Возникнет только одна группа симметрии на границе m' . Это возможно лишь для граней, нормально к которым проходят плоскости симметрии.

ТАБЛИЦА 32

Симметрия границ, возникающих при изгибах и изломах граней

Симметрия грани	Симметрия границ	
	Ось параллельна грани	Ось наклонна грани
2	$2'$	1
4	$2'$	1
6	$2'$	1
m	$m', 1, m$	$m', 1$
$2mm$	$2'mm', 1$	$m', 1$
$3m$	$m', 1, m$	$m', 1$
$4mm$	$2'mm', 2'$	$m', 1$
$6mm$	$2'mm', 2'$	$m', 1$

В табл. 32 приведены все случаи симметрии входящих углов (границ), возникающих при изгибах или изломах граней. В ней фактически рассмотрено образование границ наклона, совпадающих по симметрии с входящими углами. Мягкие двойники могут быть получены и кручением. Для того чтобы кручение проходило путем мягкого двойникования, необходимо наличие в кристалле осей четного порядка, проходящих перпендикулярно к оси кручения. Сама же ось кручения может иметь любую симметрию.

По точечной группе симметрии двойника и при помощи табл. 31 можно предвидеть, какие грани компонентов дадут входящие и «выходящие» углы (Мокиевский В. А., Махмуд Алия А. [1977 г.]; [36—38]). Во всех случаях это могут быть только те грани, которые наклонены минимум к одному двойниковому элементу симметрии. Те грани кристаллов, которые проходят нормально к элементам симметрии связи и образуют конкретную плоскость двойника с односторонней двухцветной симметрией, никогда не дадут в двойнике срастания или прорастания входящих углов. Также не дадут входящих углов те грани, которые образуют конкретную границу срастания, описываемую односторонней классической и двухцветной группами симметрии или двусторонней двойниковой группой симметрии. Все остальные грани, независимо от того, одноименные они или разноименные, дадут входящие и «выходящие» углы. Если грани данной простой формы

компонентов в двойнике компланарны, то в двойнике прорастания они могут не дать входящих углов. Примером служит часть граней простых форм в дофинеином и бразильском двойниках кварца. Это может быть в тех случаях, когда группа симметрии двойника является надгруппой индекса 2 класса симметрии компонента, но с некоторыми исключениями, о чем речь будет ниже.

МОРФОЛОГИЧЕСКАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ДВОЙНИКОВ

В настоящее время представляется возможным дать только классификацию, основанную на внешней морфологии двойников. Внутренняя морфология двойников, т. е. морфологическая закономерность распределения границ срастания, требует специальной разработки и накопления эмпирического материала. Если внимательно просмотреть табл. 12 законов двойникования и табл. 31, то нетрудно заметить, что в ряде случаев символы граней кристалла и двойника сохраняются. В других случаях символы граней в двойниковой установке отличаются от символов граней компонента. Если в двойнике можно сохранить координатную систему (кристаллографические оси) той же самой, что и у компонента, то символы граней в двойнике и кристалле сохраняют численные значения индексов (без учета перестановки индексов и их знаков). В этих случаях все рациональные грани и направления двойника будут отвечать рациональным граням и направлениям кристалла. В других случаях может оказаться, что только некоторые грани двойника будут иметь те же символы, что и некоторые грани кристалла. Следовательно, только часть граней двойника будет отвечать рациональным граням кристалла, а остальные грани кристалла могут не получить в двойниковой установке рациональных символов.

При создании классификации мы стремились сделать ее как можно менее дробной. Не исключено, что при дальнейшей работе ее придется существенно переработать, расширить или сократить, так как морфология двойников является, как было сказано, мало разработанным отделом кристаллографии. Предлагаемая классификация касается только так называемых двойников прорастания, описываемых точечными двойниковыми группами симметрии. Насколько эта классификация переносима на двойники срастания и полисинтетические двойники, сейчас сказать трудно. Составляя классификацию, мы опирались не непосредственно на простые формы двойников, описанные выше, а на взаимное расположение координатной системы (кристаллографических осей) компонентов в пространстве. Из этого расположения вытекает возможность индентификации простых форм компонентов в двойниковой установке, при выборе которой следует руководствоваться принципом максимального сохранения хотя бы части общепринятых координатных осей компонентов при переходе к двойниковой установке. При этом естественно встречаются значительные трудности в тех

случаях, когда ни одна из координатных осей кристалла не совпадает с координатными осями двойника. Это особенно касается двойников, симметрия которых отвечает моноклинной сингонии. А такие двойники могут дать компоненты всех классов симметрий. Возможно, что в таких двойниках при выборе осей x и z следует руководствоваться осями наиболее развитых зон кристаллов или направлениями с наименьшими параметрами, лежащими в границе срастания, если таковая совпадает с двойниковой плоскостью. Последнее, однако, не всегда возможно, так как, например, у периклиновых двойников плагиоклазов плоскость срастания не совпадает с двойниковой плоскостью и положение ее относительно кристаллографических осей компонента далеко не постоянно. Кроме того, определение параметров элементарного параллелограмма в плоскости срастания может представить существенные трудности, особенно при наличии границы кручения. Касаясь возможности индифференцирования граней компонентов в двойниковой установке, мы допускаем и то, что такая работа не принесет большой пользы или вообще окажется ненужной.

По взаимному расположению координатных осей компонентов достаточно строго можно выделить следующие пять типов двойников.

1. Все одноименные оси координатных систем обоих компонентов параллельны. Это возможно только при соответствующем расположении элементов симметрии связи относительно осей координат. Для компонентов всех ацентрических классов параллельность координатной системы сохранится при наличии в группе симметрии двойника $\bar{1}'$. Естественно, что двойники из таких компонентов не будут иметь полярных направлений в границах срастания. Кроме того, параллельность координатных систем компонентов сохранится и при других условиях. В моноклинной сингонии плоскость m' должна быть нормальна к оси y , а ось $2'$ параллельна y . В ромбической сингонии m' должна быть нормальна к осям x, y, z , а $2'$ должна быть параллельна x и y , что возможно только для класса симметрии компонента $2mm$. В тетрагональной сингонии m' должна быть перпендикулярна к x и y , а $2'$ — параллельна этим осям. Тригональную и гексагональную сингонии следует рассматривать вместе. Здесь при четырехосной системе координат (x, y, z, u) m' должна быть нормальна либо к оси x , либо к оси y , либо параллельна осям x и u , а $2'$ — либо параллельна осям x и u , либо нормальна к осям x и u . В кубической сингонии m' должна быть нормальна к x , а $4'$ и $\bar{4}'$ — параллельны осям x, y, z . К этому типу двойников будут относиться такие, группы симметрии которых являются надгруппами индекса 2 класса симметрии кристалла, причем эти надгруппы должны относиться к той же сингонии, что и класс симметрии компонента (тригональная и гексагональная рассматриваются как одна сингония). Сюда относятся не только жесткие двойники, но и часть нежестких (полужестких).

Если двойник без $\bar{1}'$, то часть полярных направлений может сохраниться. Примером последнего случая могут служить двойники с симметрией $6'$ для компонента с симметрией 3. Здесь ось 3 и все косо расположенные к ней направления будут полярными, а нормально расположенные направления будут иметь симметрию $2'$. Симметрия всех направлений в двойниках записана в табл. 13 в виде групп симметрии стержней, из которых можно найти все полярные направления. Группа симметрии полярного стержня не должна содержать $\bar{1}$, $\bar{1}'$, 4 , $4'$, 6 , $6'$, а также нормальные к стержню 2 , $2'$, m и m' .

У этих двойников индицируются все грани и направления компонента в двойниковой установке. Так, например, у бразильского двойника кварца простые формы, отвечающие его группе симметрии $\bar{3}m'$, будут образованы следующими простыми формами кристалла: гексагональная призма $\{11\bar{2}0\}$ двойника будет представлена тригональной призмой того же символа у кристалла, гексагональная призма $\{10\bar{1}0\}$ будет образована гексагональной же призмой кристалла, но симметрия грани такой призмы в двойнике будет m' , а не 1, как в кристалле; пинакоид двойника изменит симметрию с 3 на $3m'$; тригональные трапецоэдры превратятся в тригональные скаленоэдры без изменения численных значений индексов и т. д. Такие двойники при прорастании нередко имитируют монокристаллы и были названы поэтому М. В. Классен-Неклюдовой [21] и В. Л. Инденбомом [1963 г.] двойниками без изменения формы или двойниками по решетчатой мероздрии [79]. Все группы симметрии двойников этого типа указаны в столбце Б табл. 33.

2. Одноименные оси координат компонентов взаимно перпендикулярны (столбец В табл. 33). Случай, когда взаимно перпендикулярны все одноименные оси, не возможен. Поэтому здесь будет два варианта. Одна из осей координат одного компонента параллельна такой же оси другого компонента, или параллельных одноименных осей компоненты не имеют. Два указанных варианта в табл. 33 не выделяются. К этому типу относятся такие жесткие двойники, группы симметрии которых являются тетрагональными и содержат обязательно $4'$ или $\bar{4}'$. Облик таких двойников крестообразный с прямым углом между балками креста. Двойниковые группы симметрии этих двойников ацентрические, если компоненты не содержат $\bar{1}$. В двойниковой установке надежно будут индицироваться одна, две или максимум три простые формы компонента. Не очень надежным примером может служить двойник ставролита, у которого оси x компонентов параллельны, а две другие одноименные оси (y и z) компонентов взаимно перпендикулярны. Неудачным этот пример является потому, что строго не доказана перпендикулярность одноименных осей. В справочных данных для такого двойника указывается общая грань ромбической призмы (032), координата ρ которой настолько близка

Морфологическая классификация двойников

А	Б	В	Г	Д	Е
1	$\bar{1}'$	—	$2', m'$	—	$2', m'$
$\bar{1}$	—	—	$2'/m'$	—	$2'/m'$
m	$2'/m$	—	$2'mm'$	—	$2', m' (M)$
2	$2/m'$	$4', \bar{4}'$	$22'2', 2m'm'$	—	$2' (M), m'$
$2/m$	—	$4'/m$	$mm'm'$	—	$2'/m' (M)$
$2mm$	mmm'	$4'mm',$ $\bar{4}'2'm$	$22'2',$ $2m'm' (M),$ $2'mm' (M)$	—	$2' (M), m' (M)$
222	$m'm'm'$	$4'22',$ $\bar{4}'2m'$	$22'2' (M),$ $2m'm'$	—	$2' (M), m'$
mmm	—	$4'/mmm$	—	—	$2'/m' (M)$
3	$\bar{3}', 6', \bar{6}',$ $32', 3m'$	—	$32', 3m'$	—	$2', m'$
$\bar{3}$	$6'/m', \bar{3}m'$	—	$\bar{3}m'$	—	$2'/m'$
$3m$	$\bar{3}'m, 6'mm',$ $\bar{6}'2'm$	—	$32', 3m' (M),$ $2'mm'$	$(2'mm')$	$2', m' (M)$
32	$\bar{3}'m', 6'22',$ $\bar{6}'2m'$	$4', \bar{4}'$	$32' (M), 3m'$ $22'2', 2m'm'$	—	$2'(M), m'$
$\bar{3}m$	$6'/m'mm'$	$4'/m$	$\bar{3}m' (M), mm'm'$	$(mm'm')$	$2'/m' (M)$
4	$4/m', 4m'm',$ $42'2'$	—	$4m'm', 42'2'$	—	$2' (M), m'$
$4/m$	$4/mm'm'$	—	$4/mm'm',$ $2'/m' (M)$	—	$2'/m' (M)$
$4mm$	$4/m'mm$	—	$42'2',$ $4m'm' (M),$ $2'mm' (M)$	$(2'mm')$	$2' (M), m' (M)$
422	$4/m'm'm'$	$4'22',$ $\bar{4}'2m'$	$42'2' (M),$ $4m'm', 2m'm',$ $22'2' (M)$	$(2m'm'),$ $(22'2' M)$	$2' (M), m'$
$4/mmm$	—	$4'/mmm'$	$4/mm'm' (M)$ $mm'm' (M)$	$(mm'm' M)$	$2'/m' (M)$
$\bar{4}$	$4'/m', \bar{4}2'm'$	—	$\bar{4}2'm'$	—	$2' (M), m'$
$\bar{4}2m$	$4'/m'mm'$	$4'22',$ $\bar{4}'2m'$	$\bar{4}2'm' (M),$ $2m'm',$ $22'2' (M),$ $2'mm' (M)$	$(22'2' M)$ $(2m'm')$ $(2'mm' M)$	$2' (M), m' (M)$
6	$6/m', 6m'm'$ $62'2'$	—	$6m'm', 62'2'$	—	$2' (M), m'$
$6mm$	$6/m'mm$	—	$6m'm' (M),$ $62'2',$ $2'mm' (M)$	$(2'mm')$	$2' (M), m' (M)$

А	Б	В	Г	Д	Е
622	$6/m'm'm'$	$4'22'$ $\bar{4}'2m'$	$6m'm'$, $22'2' (M)$, $62'2' (M)$, $2m'm'$	$(22'2')$ $(2m'm')$	$2' (M), m'$
$6/mmm$	—	$4'/mmm'$	$6/mm'm' (M)$, $mm'm' (M)$	$(mm'm')$	$2'/m' (M)$
$\bar{6}$	$6'/m$	—	$\bar{6}2'm', m' (M)$	—	$2', m' (M)$
$\bar{6}2m$	$6'/mmm'$	$4'mm'$, $\bar{4}'2'm$	$\bar{6}2'm' (M), 22'2'$ $2m'm' (M)$, $2'mm' (M)$	$(22'2')$ $(2'mm')$	$2' (M), m' (M)$
23	$m\bar{3}'$, $\bar{4}'3m'$, $4'32'$	—	$22'2' (M)$, $2m'm'$	$6', \bar{6}', 3m'$, $32'$	$2' (M), m'$
$m\bar{3}$	$m\bar{3}'m'$	—	$mm'm'$	$6'/m', \bar{3}m'$	$2'/m' (M)$
$\bar{4}3m$	$m'\bar{3}'m$	—	$\bar{4}2'm' (M)$	$6'mm'$, $3m (M)$, $\bar{6}'2'm$	$2'mm' (M)$, $2' (M), m' (M)$
432	$m'\bar{3}'m'$	$4'22'$, $4'2m'$	$4m'm'$, $2m'm'$, $42'2' (M)$, $22'2' (M)$	$\bar{6}'2m'$, $6'22', 3m'$, $32' (M)$	$2' (M), m'$
$m\bar{3}m$	—	$4'/mmm'$	$4/mm'm'$, $mm'm'$	$6'/m'mm'$, $\bar{3}m' (M)$	$2'/m' (M)$

к 45° , что трудно сказать, имеет ли место поворот вокруг оси x точно на 90° или этот угол отличается на $20'$. Можно сомневаться в достоверности определения угла поворота еще и по той причине, что кристаллы ставролита обычно весьма далеки от совершенства.

3. Только одна или две одноименные оси координат компонентов сохраняются параллельными. Остальные расположены косо друг к другу. В триклинной сингонии этот тип двойников реализуется тогда, когда m' перпендикулярна к одной из осей x, y, z или параллельна плоскостям xy, xz, yz , а ось $2'$ параллельна одной из осей x, y, z или нормальна к плоскостям xy, xz, yz . В ромбической сингонии m' должна быть параллельна одной из осей x, y, z , а $2'$ нормальна к одной из этих осей. Для компонентов средней категории также плоскость m' должна быть параллельна одной из осей, а $2'$ — нормальна к одной из осей координат. Аналогично правило для этих двойников, когда компоненты относятся к кубической сингонии. Список групп симметрии таких двойников приведен к колонке Г табл. 33. В этой колонке помещаются «полужесткие» и мягкие двойники. Некоторые из них (всегда «мягкие») по записи группы симметрии точно повторяют формулу класса сим-

метрии компонента, если упразднить штрихи. При небольших углах поворота вокруг одноцветных осей такие двойники представляют собой так называемые блоки мозаики, а кристаллы с такими блоками по внешнему виду мало отличаются от монокристаллов. При вытягивании германиевых лент (по методу Степанова) вдоль $[110]$ такие блоки мозаики имеют ось поворота, совпадающую с осью вытягивания, и могут рассматриваться как нежесткие двойники третьего типа с симметрией $mm'm'$. Аналогичные двойники с симметрией $32'$ имеются у природного кварца, о чем будет сказано ниже. При больших углах поворота эти двойники могут иметь крестообразный облик с косо расположенными балками или будут выглядеть в сечении плоскими звездами с различным (6, 8, 12) числом входящих углов — дитригональная, дитетрагональная и дигексагональная звезды. Надежно в двойниковой установке будут индцироваться только грани одной простой формы компонента, а именно той, грани которой нормальны к оси поворота. Этот тип двойников представлен большим числом групп симметрии и довольно широко распространен среди минералов и искусственных соединений.

4. К этому типу (колонка Д табл. 33) относим жесткие и нежесткие двойники с двухцветными группами гексагональной и тригональной симметрии, которые образуют компоненты кубической сингонии, и некоторые «нежесткие» двойники компонентов других сингоний. Нередко часть этих двойников независимо от класса симметрии компонента называют шпинелевыми или флюоритовыми. Для этих двойников характерно то, что координатные оси компонентов непараллельны в результате поворота одного компонента относительно другого вокруг общей оси третьего порядка либо на 60° в жесткое положение (шпинелевые двойники), либо на неопределенный угол вокруг 3 (кубические компоненты) или других направлений (полужесткие и мягкие двойники). При жесткой ориентировке в двойниковой установке будут надежно индцироваться по меньшей мере грани трех простых форм компонентов — октаэдра или тетраэдра, ромбододекаэдра и тетрагонтриоктаэдра или тригон-тритетраэдра $\{211\}$, параллельных главной оси симметрии двойника. При нежесткой ориентировке, например, надежно индцироваться в двойниковой установке будут только те грани $\{111\}$ компонентов кубической сингонии, которые нормальны к главной оси симметрии двойника.

Обратим внимание на то, что в этот тип двойников попал двойник с симметрией $\bar{3}m'$, который в табл. 12 стоит в колонке нежестких двойников. Как было сказано, по группе симметрии он относится к нежестким двойникам, но только в одном частном положении, когда оси $2'$ будут совпадать с направлениями $[112]$ компонента, двойник становится как бы жестким. Такая взаимная ориентировка компонентов может быть получена из двойника $6'/m'$ путем поворота одного кристалла относительно другого вокруг $[112]$, нормального к $6'$, на 180° . По форме этот двойник очень похож на классический шпинелевый. Грани $\{110\}$ и $\{112\}$,

параллельные $\bar{3}$, будут иметь те же символы, что и одноименные грани у шпинелевого двойника.

В связи с тем что для кристаллов тригональной, тетрагональной и гексагональной сингоний горизонтальные оси координат могут быть выбраны по-разному, например нормально к плоскостям симметрии или параллельно, в колонку Д условно (в скобках) введены некоторые группы симметрии двойников из компонентов этих сингоний. Если ось поворота координатной системы совпадает с одной из горизонтальных осей координат компонента, то двойник может быть отнесен к колонке Г, а если проходит под углом 30 или 45° к горизонтальной оси — то к колонке Д.

5. Сюда относятся низкосимметричные двойники, двухцветные группы симметрии которых представлены моноклинной сингонией ($2', m', 2'/m'$) (столбец Е). Среди этих двойников имеются полужесткие и мягкие. Здесь все одноименные координатные оси компонентов находятся под косыми и различными углами друг к другу, т. е. повороты компонентов двойника друг относительно друга могут осуществляться вокруг не только некоторых частных направлений в кристалле, но и вокруг общих направлений. Для этих двойников не является обязательным, чтобы общие одноименные грани компонентов имели простые символы или вообще были рациональными. Если двойниковые элементы симметрии совпадают с рациональными направлениями или плоскостями компонентов, то при индцировании в двойниковой установке эти направления и плоскости примут также рациональные символы. Однако здесь совершенно не ясно, чем следует руководствоваться при выборе координатных осей x и z в двойниковой установке. У двойников с симметрией $2'/m'$ в зависимости от сингонии компонента может быть либо один штрихованный элемент рациональным направлением или плоскостью кристалла, либо оба. Если у двойника плагиоклаза m' совпадает с (010), то $2'$ иррациональна, а если $2'$ совпадает с [010], то m' иррациональна. Эти низкосимметричные двойники часто остаются незамеченными при исследовании кристаллов в шлифах и аншлифах, так как из-за случайных сечений сросток может показаться незакономерным. Даже на крупных образцах не всегда удается легко увидеть ось и плоскость двойникования.

В тех случаях, когда нельзя достаточно надежно указать символ грани простой формы двойника, образованной той или иной формой компонента, следует либо писать название простой формы двойника, либо ставить ее символ в общем виде со штрихом за скобкой, а на втором месте — символ грани компонента, образующей данную форму двойника. Например, запись $(h0\bar{h}l) - (100)$ означает, что форма двойника $(h0\bar{h}l)$ образована гранями (100) компонента.

Приведенная классификация двойников позволила более четко выделить полужесткие и мягкие двойники. Кроме того, из табл. 33 легко устанавливается связь между жесткими и мягкими двойниками. Так, если постепенно увеличивать угол поворота в мягком

двойнике с симметрией $32'$ для класса симметрии компонента 32 , то при повороте на 60° будет получен жесткий двойник $6'22'$, например дофинеийский двойник кварца. Этот поворот может осуществляться при действии сосредоточенной нагрузки даже при комнатной температуре. Интересно отметить, что «для каждой грани при данной температуре существует своя предельная нагрузка при определенном времени ее действия, необходимая для образования механического двойника: меньшая нагрузка требует большего времени, и наоборот» [48]. Временная зависимость образования механического дофинеийского двойника, по всей вероятности, показывает, что поворот решетки вокруг 3 осуществляется постепенно и, возможно, стадийно.

В заключение остановимся на простом способе нахождения осей поворотов мягких двойников. Как уже было сказано, «мягкие» двойники возможны только для тех классов симметрии компонентов, где имеются четные оси и плоскости симметрии. Все «мягкие» двойники выделены в табл. 33 значком «м». Выше также было показано, как по симметрии входящего угла можно найти ось поворота (на неопределенный угол) «мягкого» двойника. Но на реальном двойнике не так легко с достаточной точностью найти эту ось, изучая только преломление граней во входящих углах. Кроме того, не всегда входящие углы образованы теми гранями, по симметрии которых можно легко найти ось поворота. Наиболее надежные сведения о положении оси поворота можно получить из стереографической проекции сдвойникованных кристаллов, полученной на основании гониометрического или рентгенометрического анализа. Только для трех групп симметрии мягких двойников ($2'$, m' , $2'/m'$) есть смысл прибегать к дополнительным построениям, чтобы найти ось поворота. Если группа симметрии мягкого двойника m' или $2'/m'$, то ось поворота является линией пересечения m' с t компонента. При этом полезно построить проекцию двойника по способу Н. Г. Соколовой [35]. Если группа симметрии мягкого двойника $2'$, то ось поворота нормальна к плоскости, параллельной четной оси симметрии компонента и $2'$. Для классов симметрии, где число четных осей и плоскостей симметрии три и более, число возможных осей поворота также будет три и более. Какая из осей является истинной, может показать только исследование границы срастания. И то не всегда при этом можно получить однозначный ответ.

К МОРФОЛОГИИ ДВОЙНИКОВ СРАСТАНИЯ И ПОЛИСИНТЕТИЧЕСКИХ ДВОЙНИКОВ

Уже отмечалось, что двойник срастания является частью полисинтетического двойника, симметрия которого описывается группой симметрии стержня. В группу симметрии двойникового стержня входят двойниковые винтовые оси 2_1 , 4_2 и 6_3 , а также плоскости a' и трансляция. Эти двухцветные элементы симметрии при рассмотрении симметрии двойников срастания нужно

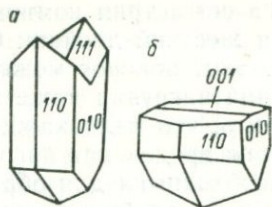


Рис. 63. Формы двойников срастания гипса. Рисунок заимствован из «Описательной минералогии» Э. С. Дана (русский перевод 1937 г.).

a — форма, у которой грани призмы {111} компонентов образуют входящие углы; *b* — форма без входящих углов.

заменить их одноцветными подгруппами вдвое меньшего порядка (1, 2 и 3). Одноцветные элементы симметрии, нормальные к оси стержня, пересекают его в одной точке, а двухцветные — в другой. Последние входят в состав группы симметрии границы срастания. Эта группа симметрии и определяет морфологию двойника срастания. Все двухцветные группы симметрии границы срастания показаны в табл. 25, из которой видно, что двойники срастания могут отвечать по двухцветной симметрии только низшей и средней категориям ($\bar{1}$, $2'$, m' , $2'/m$, $2/m'$, $2'mm'$, $22'2'$, mmm' , $\bar{3}$, $32'$, $\bar{3}'m$, $4/m'$, $42'2'$, $4/m'mm$, $\bar{4}'$, $\bar{4}'2'm$, $6/m'$, $62'2'$, $6/m'mm$, $\bar{6}'$, $\bar{6}'2'm$ — всего 21 группа).

Для примера рассмотрим двойник гипса, называемый в литературе «ласточкинским хвостом» (рис. 63). Группа симметрии такого двойника прорастания отвечает ромбической голоэдрии $mm'm'$, а двойника срастания — подгруппе $2'mm'$ этой точечной группы. Полисинтетический стержень из таких двойников срастания с осью, нормальной к (100), имеет симметрию $2_1a'm/22'm'$. Грани (100) и (010) компонентов останутся пинакоидами с теми же символами и в двойниковой установке. Грани ромбической призмы {110} компонентов в двойнике превратятся в две ромбические призмы, причем одна из них может дать входящие углы на границе или не проявиться. Грани призмы {111} компонентов образуют две ромбические пирамиды в двойнике: одну с выходящими углами, а другую — с входящими.

Идеальная симметрия двойника срастания должна отвечать симметрии границы срастания, а морфология описывается соответственными простыми формами, одноцветную и двухцветную симметрию которых можно найти в табл. 30. При этом следует иметь в виду, что по двухцветной симметрии грани форм двойников срастания могут отвечать только группам $2'$, m' и $2'mm'$, т. е. группам симметрии двойниковых швов и входящих углов. В двойнике прорастания симметрия отдельных граней простых двойниковых форм будет описываться двухцветными надгруппами этих трех групп.

Нельзя не обратить внимание на то, что форма и видимая симметрия компонентов двойника отличаются от идеальной (для изолированных компонентов). Такая деформация, как уже указывалось выше, обусловлена наличием границы срастания. Если компоненты двойника гипса разделить по границе срастания, то

их видимая симметрия будет m , а не $2/m$. Это явление можно наблюдать у всех идеально развитых двойников сростания. Нетрудно убедиться в том, что идеальная видимая симметрия компонента в двойнике сростания должна описываться плоской односторонней (пирамидальной) классической группой симметрии, являющейся подгруппой двухцветной группы симметрии двойника, причем элементы симметрии этой классической односторонней группы должны быть нормальны к двойниковой границе, если последняя является плоской. Таким образом, наивысшая группа симметрии конкретного компонента двойника может отвечать одному из 10 плоско-стных классов симметрии.* Как уже говорилось, двойниковая граница может в значительной степени влиять на рост сдвойникованных кристаллов. Для упомянутого двойника гипса граница является полярной, и поэтому рост двойника вдоль оси $2'$ в одном направлении будет отличаться от роста этого же двойника, но в противоположном направлении оси $2'$. Разница может проявляться не только в скоростях роста (растворения) простых форм, но и в самих формах роста (растворения). Тот же рис. 63 наглядно иллюстрирует сказанное. В одном случае (а) входящие и «выходящие» двойниковые ромбические пирамиды сложены гранями $\{111\}$ компонентов, а в другом случае (б) с разных концов оси $2'$ гипс огранен разными простыми формами. В минералогическом отделе музея при Ленинградском горном институте большинство (если не все) двойников гипса типа ласточкина хвоста огранены с различных концов оси $2'$ разными простыми формами компонентов. Описанная деформация компонентов двойника справедлива и для двойников молекул (пример с иодоформом, см. с. 153).

Для описания морфологии полисинтетического двойника необходимо ввести понятие о простых бесконечных формах двойников (гранных, реберных и вершинных). Простой формой дисконтинуума двойника называется совокупность граней, ребер и вершин двойника, связанных элементами симметрии дисконтинуума двойниковых стержней. Реберные и вершинные формы следует разделить на два типа: положительные (+) и отрицательные (—). При трансляции одна и та же гранная форма двойника может образовывать как входящие, так и выходящие углы (рис. 64). Поэтому удобнее для характеристики таких форм указывать только реберные формы, их симметрию и знак. Вершины можно не описывать. Название форм полисинтетического двойника следует заимствовать от форм двойника сростания, добавляя символы операций симметрии T , a' , 2_1 , 4_2 , 6_3 и знаки + или —, например ромбическая призма (T) (—), т. е. ромбическая призма трансляционная с отрицательными ребрами, или ромбическая призма (a') (+). Для изображения полисинтетических двойников также

* Для реальных двойников сростания симметрия формы компонента может изменяться по схеме, указанной на с. 16. Из-за наличия границы сростания наивысшая видимая симметрия компонента может быть равна симметрии конуса, а всего двойника — симметрии цилиндра.

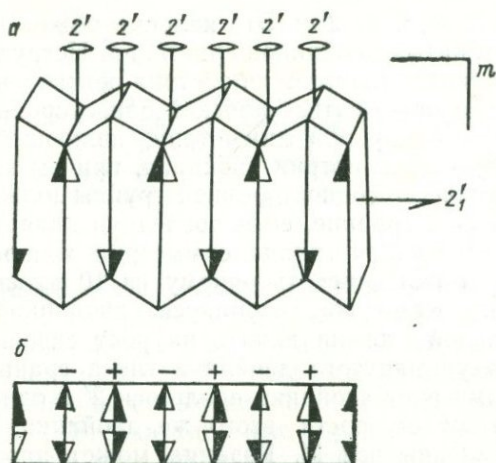


Рис. 64.

a — полисинтетический двойник из компонентов с симметрией $2/m$, образующих стержень с симметрией $2_1 m a' / 22' m$; *b* — вид этого стержня в плане. Знак (+) показывает ребро при выходящем угле, а знак (-) обозначает ребро при входящем угле. Стрелками показана симметрия границ срастания.

удобно использовать схемы, построенные с помощью стрелок как классической симметрии, так и двухцветной.

Видимая симметрия компонентов полисинтетического двойника отличается от видимой симметрии компонентов двойника срастания. Это отличие заключается в том, что к элементам симметрии компонента двойника срастания (к 10 односторонним группам классической симметрии) могут добавляться одноцветные элементы симметрии, нормальные к оси стержня, а для centrosимметричных компонентов добавляется и $\bar{1}'$. Таким образом, видимая кристаллографическая симметрия компонентов в полисинтетическом двойнике описывается 27 группами (32 — 5 кубических).^{*} Сказанное переносимо и на «полисинтетические» двойники молекул (полимеры), как на *цис*-, так и на *транс*-изомеры. Деформации молекул в полимерах будут подчиняться тем же закономерностям, что и видимая деформация компонентов в полисинтетических двойниках.

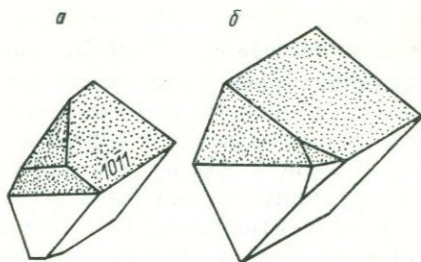
ЛОЖНЫЕ ФОРМЫ ДВОЙНИКОВ

При исследовании двойников гониометрическим методом, с помощью федоровского столика и рентгенометрически окончательные результаты даются в виде стереографических проекций, по которым может быть определена точечная группа симметрии двойника прорастания, срастания и полисинтетического. К сожалению, на точечные группы двойников, а тем более на симметрию двойниковых стержней внимание исследователей не обращается. При

^{*} Точечная симметрия полисинтетических двойников зависит от числа компонентов в сростке — четного или нечетного и описывается одноцветными или двухцветными группами симметрии [Любалин М. Д., Мокиевский В. А., 1976 г.] — *Ред.*

Рис. 65. Двойники кальцита с плоскостью двойникового (0112).

a — сохраняется классическая плоскость симметрии.
b — черно-белая.



изучении двойников на федоровском столике обычно фиксируют внимание на границе срастания, если она плоская, указывают ее символ и определяют положение $2'$ и m' . Однако двойники могут доставить более богатую информацию об условиях, в которых происходило их образование, если исследовать их симметрию и морфологию. Когда в распоряжении наблюдателя имеются двойники, у которых визуально или микроскопически можно достаточно хорошо изучить морфологию, то она, так же как и монокристаллы, может стать ключом для познания симметрии кристаллообразующей среды.

Для этого аналогично понятию о ложных формах кристаллов [57] вводится понятие о ложных формах двойников.* Ложной формой двойника будем называть совокупность таких его граней, вершин и ребер, которые связаны между собой элементами симметрии одноцветных и двухцветных подгрупп точечной двойниковой группы симметрии. Эти подгруппы, кроме 1, должны быть нетривиальными. Нужно заранее оговориться, что сами простые формы двойников носят несколько ложный (но в другом смысле) характер даже в тех случаях, когда по морфологии двойники относятся к столбцу Б табл. 33. Несмотря на это, искажение идеальной формы двойника под влиянием симметрии кристаллообразующей среды во многих случаях удается констатировать достаточно надежно.

На рис. 65 представлены два двойника кальцита, ложные формы которых показывают, что симметрия среды, где они росли, отвечала m . У первого двойника сохранилась классическая плоскость симметрии, а у второго — двойниковая. При таких исследованиях обязательно надо учитывать, что в результате двойникового идеальная форма и видимая симметрия компонентов должны измениться.** Напомним «сплюснутые» по (0001) шпинелевые двойники алмаза. Эти двойники должны иметь при срастании идеальную форму, отвечающую по симметрии группе $\bar{6}2'm$, а каждый компонент в отдельности должен иметь видимую сим-

* Ложные формы для двойников компонентов класса $m\bar{3}m$ выведены Н. Г. Соколовой в ее диссертации [1968 г.], см. также [36].— *Ред.*

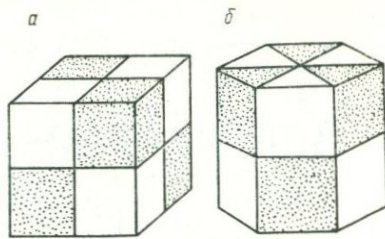
** Эти вопросы разобраны в работах [35—37] Н. Г. Соколовой — ученицей В. А. Мокиевского.— *Ред.*

метрию $3m$. Не следует приписывать среде такое искажение форм компонентов японского двойника кварца, при котором наблюдается «сплющивание» кристаллов вдоль направления $[10\bar{1}0]$, параллельного плоскости двойникования. Возвращаясь к алмазному двойнику, укажем, что описанный в литературе [62] шпинелевый двойник, имеющий форму «тетраэдра», а точнее ложной тригональной пирамиды, может быть объяснен более просто, чем у авторов статьи, считающих, что в описываемом случае имела место тенденция к переходу от гексагональной симметрии к кубической $\bar{4}3m$. Скорее же всего, эти двойники просто росли в среде с симметрией ∞m , причем ось ∞ была параллельна $6'$ двойника. Этот случай роста весьма обычен, так как все кристаллы, растущие в «неподвижном» растворе на дне кристаллизатора, находятся в такой среде. По принципу Кюри видимая симметрия двойника должна быть $3m$ и ложные формы должны отвечать этой группе, что и имеет место в описанном авторами примере.

ВНУТРЕННЯЯ МОРФОЛОГИЯ ДВОЙНИКОВ

Внутренняя морфология двойников складывается из пирамид роста компонентов (с. 44) и формы границ срастания. Если граница плоская или образована зоной граней компонентов, то описание формы границы и ее симметрии не составляет труда. Но у двойников прорастания обычно граница меняет свое расположение в двойнике самым прихотливым образом. Если при этом учитывать возможность перемещения границы под влиянием различных внешних факторов, то описание ее формы может представить существенные трудности, поскольку общие закономерности перемещения границы не известны. Для простоты представим себе некоторые идеальные двойники прорастания с плоскими внутренними границами, образованными гранями — одной или двумя простыми формами компонентов (рис. 66). Морфология таких границ может быть описана гранными пучками одноцветной и двухцветной симметрии (пучками плоскостей односторонней и двусторонней одноцветной и двухцветной симметрии). Если граница проходит по разным простым формам компонентов, то она является комбинацией гранных пучков, изображение которой в аксонометрической проекции представляет значительные трудности. На стереографической проекции эти пучки могут быть нанесены после гониометрического изучения, для чего двойник нужно разделить по границе. Такое разделение двойника далеко не всегда возможно. Чаще всего сдвойникованные кристаллы удается разъединить по границе только в двух случаях: 1) если граница образована индукционными гранями и 2) если по плоской границе проходит новая спайность (двойниковая спайность, не совпадающая со спайностью кристалла, как, например, у искусственного корунда). В остальных случаях граница срастания обычно довольно прочная и может быть даже прочнее, чем сцепление между двумя любыми

Рис. 66. Модели кубического (а) и гексагонального (б) двойников с плоскими границами срастания, которые описываются пучками плоскостей.



параллельными плоскостями кристалла. У мягких двойников границы могут быть представлены дислокационными стенками и часто не прослеживаются достаточно надежно.

Здесь мы рассмотрим в качестве примера некоторые закономерности распределения двойниковых границ в двойниках прорастания исландского шпата [Мокиевский В. А., Самусина С. Н., Скропышев А. В., 1968 г.].

Для двойников по (0001) исландского шпата имеются определенные закономерности, связывающие группу симметрии двойника с его внутренней и внешней морфологией.

Симметрия двойников прорастания по (0001) отвечает гексагональной голоэдри — $6'/m'mm'$ (табл. 31). Поскольку группа симметрии двойника является надгруппой класса симметрии кальцита (столбец Б табл. 33), то символы простых форм двойника будут те же, что и у исходных кристаллов. В табл. 31 показано, как изменяется симметрия граней исходных кристаллов в двойнике.

Симметрия внутренних двойниковых границ также показана в табл. 31. Из таблицы видно, что все простые формы, кроме двух последних, образуют симметричные двойниковые границы. Формы $\{h0\bar{h}l\}$ (ромбоздры) и $\{hk\bar{h}l\}$ (скаленоэдры) дают асимметричные границы, т. е. оба индивида двойника не связаны друг с другом операциями симметрии. Иначе говоря, можно ожидать, что при разламывании двойника поверхности наиболее легкого раскола будут проходить по $\{h0\bar{h}l\}$ и $\{hk\bar{h}l\}$ и будут образованы индукционными гранями указанных символов. По симметричным границам тоже могут проходить плоскости раскола, если они дадут новую спайность.

Предполагалось, что распределение индивидов в двойнике может описываться либо группой симметрии $6'/m'mm'$, либо ее подгруппами. Все подгруппы, как классические, так и двойниковые, приведены в табл. 24. Для тех случаев, когда рассматривается симметрия распределения индивидов двойника в плоскости какого-либо сечения (распила), из всех подгрупп нужно выбрать только односторонние (пирамидальные). Для исследования закономерностей распределения компонентов в двойнике или двойниковой границы, что фактически то же самое, были использованы 2 крупных образца, изображенные на рис. 67. Видимая на поверхности этих двойников граница была описана А. В. Шустовым [74].

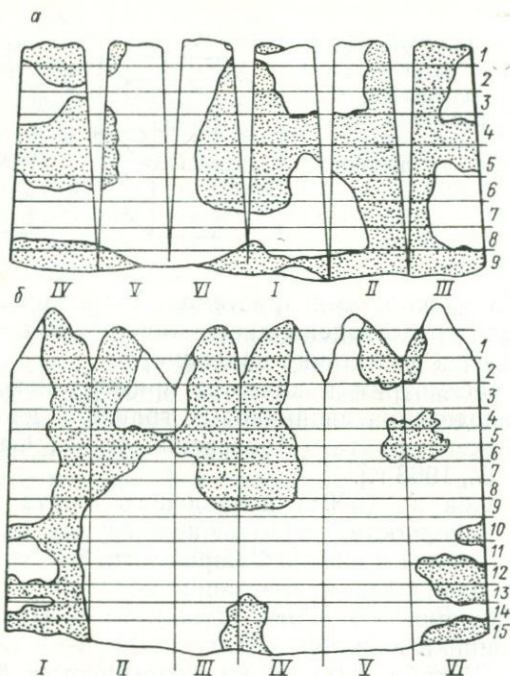


Рис. 67. Развертки двойников прорастания исландского шпата.

Показан двойниковый шов на их поверхности. Горизонтальные линии — плоскости распила. Римские цифры — номера граней, арабские — номера пластин; а — двойник 1; б — двойник 2.

Симметрия распределения сдвойникованных компонентов изучалась на плоскостях распила, перпендикулярных к $6'$. Толщина пластин, вырезанных из кристалла, колебалась в пределах 7—10 мм. Ширина распила была около 2 мм. Поскольку на распил уходило довольно много материала, в некоторых случаях переход двойниковой границы из одного среза в другой приходилось восстанавливать с некоторой степенью приближения. Плоскости среза протравливались в 5 %-ной HCl , после чего на них отчетливо были видны двойниковые границы. На рис. 68 изображены пластины, полученные из кристаллов 1 и 2 (рис. 67). Из рис. 68 видно, что пирамидальные группы симметрии на поверхности пластин близки к перечисленным в табл. 24. Здесь, конечно, не может быть речи о точном соблюдении симметрии, так же как и в любом реальном кристалле. Но близость картины распределения индивидов в двойнике к идеальной на некоторых срезах бросается в глаза. Идеальная картина могла быть получена только в том случае, если бы двойниковая граница проходила так, как показано на рис. 66.

В табл. 34 приводятся группы симметрии каждого среза. Из таблицы видно, что в некоторых случаях (кристалл 2, срез 136

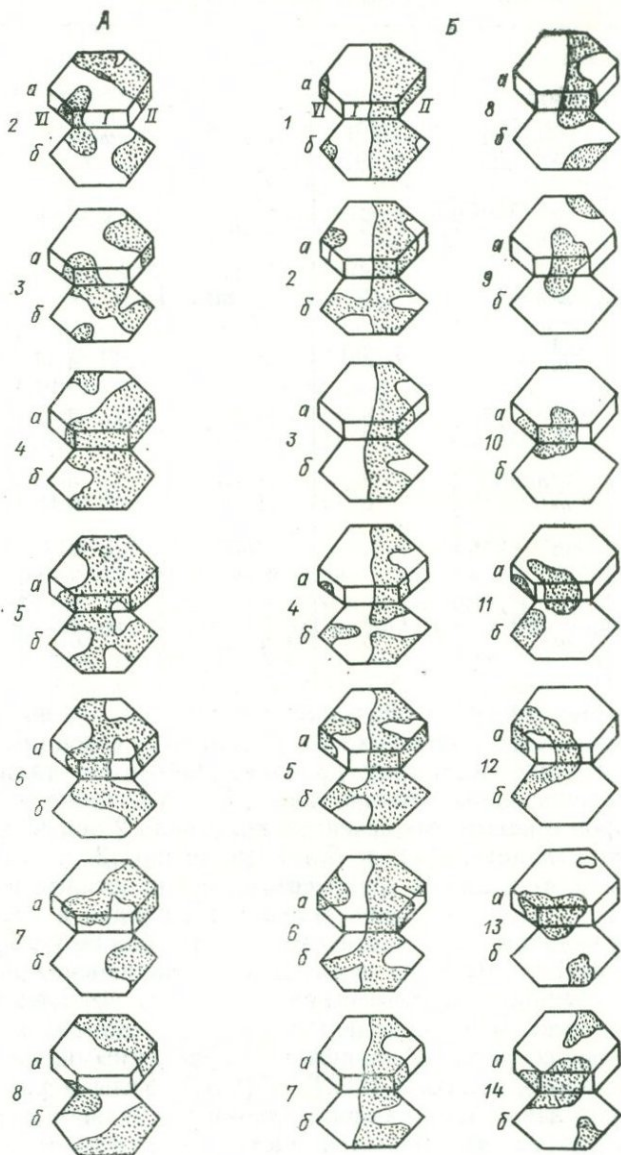


Рис. 68. Пластины, выпиленные из двойников 1 (А) и 2 (Б), изображенных на рис. 67.

Невидимая нижняя часть пластины показана в «отогнутом» состоянии и помечена буквой «б». Римские цифры — номера граней, арабские — номера пластин.

Группы симметрии срезов

Кристалл 1		Кристалл 2			
Номер пластины	Группа симметрии	Номер пластины	Группа симметрии	Номер пластины	Группа симметрии
2 а б	$2'mm'$ m	1 а б	$2'mm'$ $2'mm'$	8 а б	m m
3 а б	m $2'mm'$	2 а б	$2'mm'$ $6'mm'$	9 а б	1 m
4 а б	m m	3 а б	m m	10 а б	m m
5 а б	m $6'mm'$	4 а б	m $6'mm'$	11 а б	1 m
6 а б	$6'mm'$ m	5 а б	$2'mm'$ m	12 а б	m m
7 а б	m m	6 а б	$2'mm'$ $6'mm'$	13 а б	m 2
8 а б	$2'mm'$ m	7 а б	m m	14 а б	1 $2mm$

и 14б) симметрия среза описывается подгруппами, не входящими в группу симметрии двойника для данного сечения (13б) или вообще в группу симметрии двойника (14б). Но таких случаев из всех перечисленных только два. Узор двойниковой границы с двух сторон в некоторых сечениях кристалла 2 описывается группами mmm' (пластина 1) и $2mm$ (пластины 3 и 12), которые также не входят в состав групп симметрии кристалла и двойника. Причины непостоянства распределения индивидов в двойнике могут быть различными, в частности это колебания условий роста.

Для изучения строения поверхности соприкосновения компонентов пластины раскалывались вдоль двойниковых границ. Гониметрическими исследованиями было установлено, что все границы легкого раскола являются индукционными, сложенными, как и ожидалось, гранями $\{h0\bar{h}l\}$ и $\{hk\bar{l}l\}$. Углы ρ ромбоэдров и скаленоэдров зависят от наклона границы к главной оси. Причем было обнаружено, что большей частью эти формы относились к так называемым отрицательным ромбоэдрам и скаленоэдрам. В одном только случае на границе был обнаружен сильно размазанный сигнал от призмы $\{10\bar{1}0\}$. Этот раскол был неизбежен, так как граница меняла свой наклон относительно главной оси симметрии двойника.

Ни разу не удалось расколоть двойник по $\{0001\}$, даже в тех случаях, когда граница была очень близка к этому положению.

Симметричные (выше первого порядка) внутренние границы являются, по всей вероятности, весьма прочными. Мы пытались расколоть двойник с двойниковой плоскостью ($\bar{1}012$). Двойник раскололся по спайности и на сколе не было площадок ($\bar{1}012$). Индукционные поверхности в двойнике отвечают симметрии 1, и по ним расколы осуществляются сравнительно легко. Монокристалльные области у таких двойников более крупные в тех местах, где симметрия распределения индивидов наиболее низкая.

Морфология и распределение двойниковых границ в двойниках прорастания представляют практический интерес, так как от этого зависят размеры монокристалльных блоков и связанная с ними возможность использования сдвойникованных кристаллов в промышленности. Вскрытие связи распределения компонентов в двойнике с условиями кристаллизации для искусственных кристаллов очень важно, так как дает возможность управлять двойниковыми границами или избегать их при выращивании кристаллов.

ИЗОБРАЖЕНИЕ ДВОЙНИКОВ НА СТЕРЕОГРАФИЧЕСКОЙ ПРОЕКЦИИ

Для изображения двойников на стереографической проекции обычно наносят проекции нормалей к граням обоих компонентов. Для различения точек, относящихся к одному и второму компонентам, их или нумеруют, или раскрашивают в два цвета. Способ Н. Г. Соколовой [35], на наш взгляд, более наглядный и убедительный и более удобный. Он, как было сказано, заключается в том, что на стереографическую проекцию элементов симметрии одного компонента в стандартной установке накладывается стереографическая проекция элементов симметрии двойниковой (двухцветной) группы. Второй компонент при этом не показывается, так как его ориентировка может быть легко представлена путем штрихованных операций симметрии. На таких проекциях легко показать области нежестких двойниковых ориентировок [Мокиевский А. В., Соколова Н. Г., 1969 г.].

Известно, что для двойников характерно, но не обязательно, наличие входящих двугранных углов. Входящие углы при образовании двойника могут существенно влиять на скорости роста компонентов. Поэтому полезно при изображении двойника на стереографической проекции показывать ее возможные входящие углы. Многогранники с входящими углами Е. С. Федоров называл койлоэдрами [42]. Е. С. Федоров отмечал, что «мы всегда можем такие многогранники разложить на совокупность выпуклых; поэтому они могут произведены совокупностью выпуклых многогранников». Там же Е. С. Федоров рассматривает приложимость теоремы Эйлера к койлоэдрам. Кроме того, он показал, что каждому койлоэдру отвечает обязательно выпуклый типический многогранник.

При выводе вершин и ребер двух пересекающихся простых гранных форм в одном классе симметрии (с. 48) мы принимали, что в результате пересечения должен образоваться также выпук-

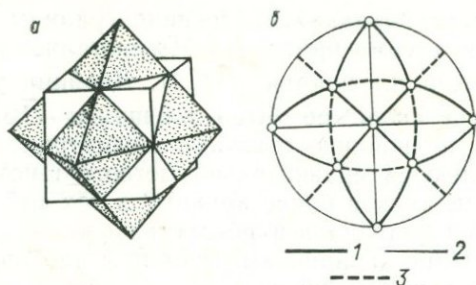


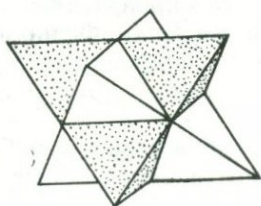
Рис. 69. Койлоэдр из куба и октаэдра (а) и его гномостереографическая проекция (б).

На проекции: 1 — ребра при входящих двугранных углах; 2 — ребра куба; 3 — ребра октаэдра.

лый многогранник. По этой причине на проекции не допускалось пересечение дуг, изображающих проекции ребер в точках, не совпадающих с гномостереографическими проекциями граней. Это условие тогда было нужно. Если такое ограничение снять, то мы придем к многогранникам с входящими углами.

На рис. 69, а изображен койлоэдр, являющийся результатом пересечения куба и октаэдра при параллельной ориентировке всех элементов симметрии фигур. На рис. 69, б дана гномостереографическая проекция граней, вершин и ребер такого многогранника. Из рис. 69 видно, что ребра при входящих двугранных углах отвечают ребрам выпуклого кубооктаэдра (рис. 5, б). Вершины, где сходятся ребра при входящих двугранных углах, также отвечают вершинам кубооктаэдра. Таким образом, в результате суперпозиции куба и октаэдра получается койлоэдр, у которого ребра и вершины при входящих углах отвечают ребрам и вершинам суперпозиционного выпуклого многогранника. Продолжая грани суперпозиционного многогранника до их пересечения, получим формы тех выпуклых многогранников, которые породили данный суперпозиционный. Это отмечал и Е. С. Федоров. Так, по Е. С. Федорову, например, продолжение граней октаэдра приводит к двум пересекающимся тетраэдрам (рис. 70). Но есть такие замкнутые выпуклые многогранники, грани которых при продолжении не дадут замкнутых многогранников. К ним относятся, например, куб и тетраэдр. Можно показать, что суперпозиционный многогранник должен иметь не менее восьми граней, если при пересечении оба многогранника не имеют ни одной параллельной грани. Это следует хотя бы из того, что минимальное число граней у пересекающихся замкнутых многогранников должно быть равно четырем (тетраэдр).

Рис. 70. Два пересекающихся тетраэдра (правильный октаэдр второй степени по Е. С. Федорову), являющиеся моделью двойника с симметрией $m\bar{3}m$.



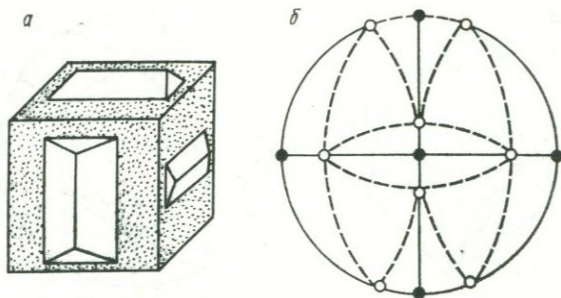


Рис. 71. Пересечение куба и пентагон-додекаэдра (а) и гномостереографическая проекция этого пересечения (б).

Из сказанного следует, что для нахождения всех ребер при входящих двугранных углах нужно найти ребра суперпозиционного выпуклого многогранника. При этом мыслимы два случая, а именно: 1) у суперпозиционного многогранника все ребра отвечают ребрам при входящих углах и 2) только часть ребер является ребрами при входящих углах. Первый случай возникнет тогда, когда ребра суперпозиционного многогранника являются новыми ребрами, которых нет у пересекающихся многогранников. Второй случай реализуется тогда, когда часть ребер суперпозиционного многогранника является новой, а другая часть заимствована у пересекающихся многогранников. Новая часть ребер в этом случае и будет ребрами при входящих углах. Иными словами, ребра при входящих двугранных углах будут теми ребрами суперпозиционного многогранника, которых нет ни у одного из пересекающихся многогранников.

Если пересекающиеся многогранники являются простыми формами в одном классе симметрии, то найденные ребра могут показывать входящие двугранные углы в виде штриховки. Из этого можно найти, например, какую штриховку образует на грани куба пентагон-додекаэдр или, наоборот, какую штриховку может дать куб на грани пентагон-додекаэдра (рис. 71). Койлоэдры на монокристаллах чаще всего проявляются в виде штриховки. Но могут быть случаи и более яркие, описанные И. И. Шафрановским [58], где даются простые формы с входящими углами.

Вывод возможных входящих двугранных углов наиболее интересен для случаев двойникования.* Двойниковые ориентировки

* В работе В. А. Мокиевского и Алии А. Махмуд «Формы двойников с входящими углами» [1977 г.] такой вывод осуществлен. Вывод основан на сформулированном В. А. Мокиевским положении о том, что входящие углы дают только те простые двухцветные формы, которые можно разложить на две простые формы каждого компонента двойника в отдельности. Это, по замечанию В. А. Мокиевского, отвечает старинным кристаллографическим понятиям о голоэдри и гемидри. В качестве исходной выступает простая двухцветная форма двойника, а в качестве гемидрической — соответствующая простая форма компонента, содержащая вдвое меньше граней. — *Ред.*

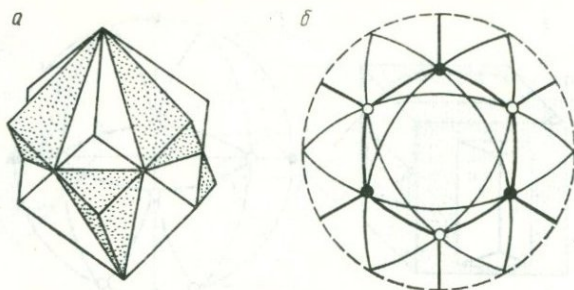


Рис. 72. Двойник прорастания из двух кубов или ромбоэдров (а) и его гномостереографическая проекция (б).

Жирные линии — ребра суперпозиционной дипирамиды.

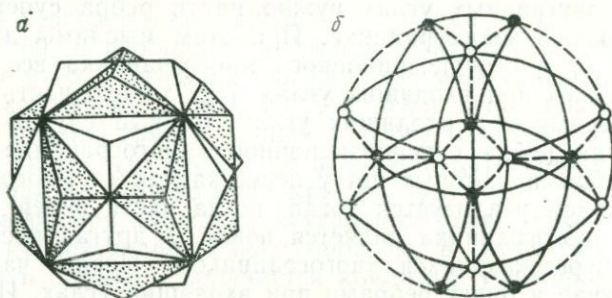


Рис. 73. Двойник «железный крест» (а) и его гномостереографическая проекция (б).

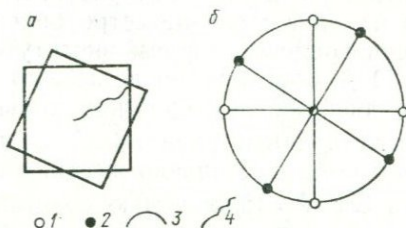
Штриховые линии — ребра суперпозиционного тетрагексаэдра.

кристаллов являются более общим случаем по сравнению с пересечением форм в одном классе симметрии, но все же представляют еще частные случаи по сравнению с произвольными ориентировками.

Симметрия разбиения сферы при двойниковой ориентировке должна описываться двойниковой группой. Рассмотрим шпинелевый двойник из двух кубов или его аналог — двойник из двух ромбоэдров (рис. 72). Построив гномостереографические проекции кубов в двойниковой ориентировке, мы увидим, что суперпозиционным многогранником является гексагональная дипирамида. Ребра этой дипирамиды не совпадают с ребрами кубов и являются поэтому ребрами при входящих двугранных углах. Для двойника пирита, именуемого железным крестом, состоящего из двух пентагон-додекаэдров, суперпозиционным многогранником является тетрагексаэдр (рис. 73), все ребра которого не совпадают с проекциями ребер пересекающихся пентагон-додекаэдров и являются ребрами при входящих двугранных углах. Двойник «же-

Рис. 74. Два куба, повернутые на произвольный угол вокруг оси четвертого порядка, (а) и гномостереографическая проекция этого поворота (б).

1 — проекции граней одного куба; 2 — второго куба; 3 — проекции ребер при входящих двугранных углах; 4 — возможный след, оставленный в сростке ребром при входящем угле при совместном росте обоих индивидов.



лезный крест» можно изобразить в виде тетрагексаэдра, но двухцветного. Дугами можно показать все ребра такого двойника.

Из таких проекций легко найти символы ребер (если они индицируются) при входящих углах как в двойниковой установке кристаллографических осей, так и в установке одного компонента.

От двойниковых ориентировок легко перейти и к более общему случаю — произвольной ориентировке двух равных многогранников или простых форм и двух неравных многогранников. Эти случаи могут быть полезны при анализе индукционных поверхностей кристаллов одного вещества или разных веществ. Нами такие случаи здесь подробно не рассматриваются. Остановимся только на одном примере многогранников, не находящихся в строгом смысле в произвольной ориентировке, а образующих мягкий двойник. На рис. 74 показаны два куба, повернутые (мягкий двойник с симметрией $4/m\bar{m}'m'$) на произвольный угол вокруг оси 4, а на проекции изображен такой койлоэдр. Если грани куба будут расти, то останется след от входящих ребер в виде поверхности, например индукционной. Возможные плоскости, слагающие эту поверхность, будут удовлетворять тем же условиям, что и плоскости пирамид роста, а именно 360° минус веер плоскостей, притупляющих входящий угол, размер которого отображен на проекции (рис. 74, б). Или, иначе, веер плоскостей, ограниченный гранями входящего угла.

МИНЕРАЛОГИЧЕСКИЕ ПРИМЕРЫ ЗАКОНОВ ДВОЙНИКОВАНИЯ И ИХ РАЗНОВИДНОСТЕЙ

После проведенных теоретических исследований представляло интерес проверить их на природных кристаллах. Особенно это касается законов двойникования. Насколько полно реализуются эти законы в природе и как часто они встречаются? Такая работа была проведена на излюбленных минералогами и кристаллографами образцах, каковыми являются пирит и кварц. Анализ двойников пирита был проведен Н. Г. Соколовой (1968 г.; [36]). Двойники полиморфных разновидностей кремнезема изучались автором настоящей работы совместно с Т. А. Карякиной [Карякина Т. А., Мокиевский В. А., 1968 г.].

Критически изучив литературные сведения по двойникам пирита и измерив на гониометре большое число сростков из музея при Ленинградском горном институте, Н. Г. Соколова нашла, что около 50 % образцов представляло собой двойники. Из 35 изученных двойниковых сростков только три явились «железными крестами» с симметрией $m\bar{3}m'$, с плоскостью срастания (110). Восемь было представлено жестким вариантом закона 1986 с симметрией $\bar{3}m'$ и с плоскостью срастания (112). Один сросток был представлен нежестким вариантом (198a) того же закона с плоскостью срастания (hkl) зоны [111]. Закон $6'/m'$ (по октаэдру) был встречен один раз. Двойников с симметрией $mm'm'$, где плоскости срастания $\{hkl\}$ — (120), (130), (450), (710), было пять, причем два имели плоскость срастания (120) (наиболее часто встречающийся пентагон-додекаэдр). Самые низкосимметричные мягкие двойники с группой $2'/m'$ с плоскостями срастания $\{hkl\}$ составляли большинство (17 двойников из 35). Эти двойники не так легко заметить, и очень часто при анализе сростков их пропускают. Таким образом, Н. Г. Соколова нашла все случаи двойникования пирита, предвиденные теоретически.

Остановимся еще на двойниках полиморфных разновидностей кремнезема. Эта работа была предпринята в связи с выходом в свет двух книг («Минералы», 1965 г.; Frondel С. [85]), в которых описываются двойники полиморфных модификаций кремнезема. В первой делается попытка описания некоторых двойников при помощи групп симметрии. К сожалению, это описание содержит ряд неточностей. В книге К. Фронделя двойники полиморфных модификаций кремнезема описываются без помощи групп симметрии, и по этой причине понимание некоторых, особенно редких, двойников вызывает большие трудности.

Описание двойников начнем с низкотемпературной модификации SiO_2 — α -кварца. Напомним, что такую же структуру и симметрию имеют GeO_2 и BeF_2 . Класс симметрии α -кварца 32 (рис. 75, а). Двойники могут дать следующие группы двухцветной симметрии (табл. 22): $\bar{3}'m'$, $6'22'$, $\bar{6}'2m'$, $3m'$, $32'$, $4'$, $\bar{4}'$, $2m'm'$, $22'2'$, $2'$, m' . Поскольку α -кварц не имеет центра симметрии, то centrosymmetric двойник может быть только один, а именно $\bar{3}'m'$ — бразильский двойник (рис. 75, б). Класс 32 имеет еще только две надгруппы вдвое большего порядка, которые представлены часто встречающимися дофинейскими двойниками $6'22'$ (рис. 75, в) и довольно редким простым двойником Либиша $\bar{6}'2m'$ (рис. 75, г). Этим исчерпываются все простые двойники с параллельными осями симметрии. Как было показано, теоретически возможны более сложные двойники, которые называются комплексными (двойники двойников). Повышение группы α -кварца в четыре раза дает комплексный двойник (четверник) с симметрией $6'/mmm$ (32), в образовании которого участвуют четыре компонента (рис. 75, д). Такой двойник известен под названием комплексного двойника Либиша. Число компонентов, принимающих

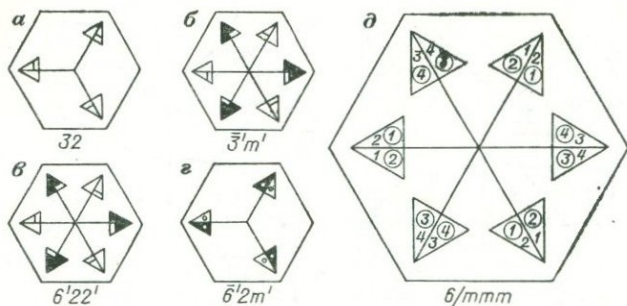


Рис. 75. Схематическое изображение кристалла кварца (а) и его двойников с параллельными осями координат (б—д) при помощи двусторонних черно-белых стрелок.

На рис. д раскраска в четыре цвета заменена нумерацией, отвечающей числу компонентов комплексного двойника Либша.

участие в комплексном двойнике, как указывалось выше, равно частному от деления порядка группы двойника на порядок группы симметрии индивидов. Рассмотрев комплексные двойники с таких позиций, приходим к выводу, что кристаллы α -кварца могут дать еще только один комплекс (четверник) с кубической симметрией 432 (32), где будут участвовать также четыре кристалла. Такие комплексы пока не описаны, но они в принципе не исключаются.

Известно, что во всех двойниках, группы симметрии которых содержат плоскости симметрии m' или $4'$, могут участвовать правые и левые индивиды α -кварца. Двойники без плоскостей симметрии составлены либо только левыми кристаллами (левые двойники), либо только правыми кристаллами (правые двойники). Это заключение, хотя и тривиально, но редко учитывается при описании двойников в статейных материалах.

Кроме перечисленных трех простых двойников α -кварц дает еще ряд двойников с более низкой симметрией. Из них особенно хорошо известен минерологам японский двойник. В монографии К. Фронделя приводятся четыре типа этих двойников. Подтипы, выделенные К. Фронделем, являются попросту разными аспектами этих четырех типов. Заметим, что подтипов (различных аспектов) может быть вообще множество.

Чем же характеризуются японские двойники? К ним относятся двойники, у которых плоскостью срастания служат грани $\{11\bar{2}2\}$ и лежащие в них ряды $[1\bar{2}13]$ параллельны. Напомним, что грань $(11\bar{2}2)$, как и все грани тригональных дипирамид, имеет симметрию 1, и, следовательно, ряд $[1\bar{2}13]$, лежащий в этой грани, имеет ту же симметрию, причем этот ряд параллелен грани гексагональной призмы.

Уже указывалось, что если ряд на поверхности грани имеет симметрию 1, то возможно восемь случаев параллельности этого

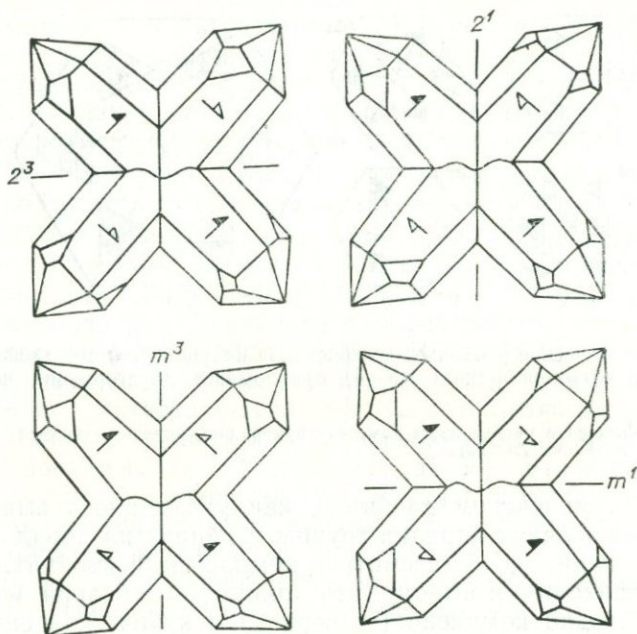


Рис. 76. Четыре типа японских двойников кварца.

ряда [Hartman P., 1956 г.], из которых семь отвечают двойниковому положению, а восьмой — параллельному сростку (монокристаллу). По симметрии эти семь случаев, упоминавшихся на с. 132, записываются так: 2^1 , 2^2 , 2^3 , m^1 , m^2 , m^3 , $\bar{1}'$. Последний случай $\bar{1}'$ отвечает бразильскому закону двойникования.

Из остальных шести случаев в японском двойнике могут реализоваться, как показано в табл. 14, только четыре: 2^3 , 2^1 , m^1 и m^3 . Случаи 2^2 и m^2 приведут соответственно к дофинеysкому и бразильскому законам, так как ряд $[\bar{1}213]$ параллелен $\{10\bar{1}0\}$. Таким образом, если в образовании японского двойника принимают участие монокристаллы α -кварца, то возможно только четыре типа двойников: 2^1 и 2^3 (оба индивида либо правые, либо левые), m^1 и m^3 (один индивид правый, а другой — левый). На рис. 76 эти типы изображены схематически. Стрелками показана симметрия граней $\{10\bar{1}0\}$, равная 1, а не m , как в работе К. Фронделя.

Поскольку у японского двойника параллельны грани не только дипирамиды $\{11\bar{2}2\}$, но и призмы $\{10\bar{1}0\}$, эти двойники выводятся и из возможных групп симметрии для случаев параллельности рядов $[\bar{1}213]$, лежащих в плоскости $\{10\bar{1}0\}$. При таком выводе выпадут случаи m^3 и 2^3 , так как они приведут также к бразильскому и дофинеysкому двойникам, а останутся 2^1 , 2^2 , m^1 и m^2 (табл. 14).

Среди двойников кварца в литературе перечисляется множество других, у которых общими гранями являются дипирамиды

разных символов и ряды, лежащие в гранях этих дипирамид $[pp2\bar{p}r]$. Очевидно, что это почти полные аналоги нежестких японских двойников и для каждого из них может быть четыре перечисленных выше типа. Все эти двойники α -кварца выводятся путем вращения индивидов, составляющих параллельный сросток, бразильский, дофинеийский и простой двойник Либиша, вокруг нормалей к различным граням.

При рассмотрении поворотов компонентов двойника вокруг некоторых направлений следует учитывать те обстоятельства, что только при повороте вокруг нормали к двойниковой оси, содержащей $2'$, или вокруг направления, лежащего в m' , появятся двойники, группы симметрии которых будут содержать $2'$ и m' . Повороты компонентов двойника вокруг нормалей к 2 или вокруг направления, лежащего в m (если к этим направлениям нет перпендикулярной $2'$), приведет к не двойниковому положению. Если группа симметрии монокристалла или двойника содержит соответственно $\bar{1}$, $\bar{1}'$, то поворот индивидов на 180° вокруг любого направления приведет к появлению плоскости симметрии m' , так как такой поворот равносителен действию инверсионной оси второго порядка.

Из рис. 75, а видно, что если вращать один из индивидов параллельного сростка вокруг нормали к $(10\bar{1}0)$, то получится серия двойников с симметрией $2'$ (серия двойников по дипирамидам $\{hh2\bar{h}l\}$), с параллельными гранями призмы $\{10\bar{1}0\}$. При повороте на 180° получается дофинеийский двойник:

$$32 \rightleftharpoons 2' \rightleftharpoons 6'22' \text{ (дофинеийский).}$$

(тип японского)

Если один из компонентов бразильского двойника (рис. 75, б) вращать вокруг нормали к $(10\bar{1}0)$, то в результате останется только одна плоскость симметрии m' . При повороте на 180° получается простой двойник Либиша:

$$\bar{3}'m' \rightleftharpoons m' \rightleftharpoons 6'2m' \text{ (простой двойник Либиша).}$$

(тип японского)

Таким образом, приходим к выводу, что двойники, у которых параллельны грани $\{10\bar{1}0\}$ и $\{hh2\bar{h}l\}$ и ряды, лежащие в них $[pp2\bar{p}r]$, относятся к типу японских двойников.

При вращении кристаллов вокруг нормалей к грани $(11\bar{2}0)$ нужно иметь в виду, что нормаль к $(11\bar{2}0)$ одновременно является одноцветной осью второго порядка. Поворачивая индивиды, находящиеся в параллельном положении вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$, на произвольный угол, приходим к симметрии, равной 1, т. е. двойников не образуется, за исключением поворота на 90° , когда возникает симметрия $4'$. Поворот на 180° приводит к исходному

положению с симметрией 32 . Схема вращения будет выглядеть так:

$$32 \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{4}' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons 32.$$

Поворот компонентов бразильского двойника вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$ на 180° вернет нас снова к бразильскому двойнику. Все промежуточные положения характеризуются симметрией 1 (двойников не дают), кроме поворота на 90° , когда возникает двойник с симметрией $4'$. Однако такие двойники в природе пока не описаны.

$$\bar{3}'m' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{4}' \rightleftharpoons 1 \rightleftharpoons \bar{3}'m'.$$

Зато вращение компонентов в положении простого двойника Либиша вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$ приведет к серии двойников с общими гранями либо положительного $\{h0\bar{h}l\}$, либо отрицательного $\{0h\bar{h}l\}$ ромбоэдров, совмещаемых плоскостью симметрии m' . Поскольку эта плоскость проходит вдоль оси 2 , то группа симметрии этих двойников будет $2m'm'$. Здесь имеет место такая схема:

$$\bar{6}'2m' \rightleftharpoons 2m'm' \rightleftharpoons \bar{6}'2m'.$$

Поворот на 180° приводит к симметрии $\bar{6}2m'$, т. е. к простому двойнику Либиша.

При вращении вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$ компонентов дофинеи-ского двойника получим серию двойников с симметрией $2'2'2'$. Поворот на 180° дает дофинеи-ский двойник $6'2'2'$:

$$6'2'2' \rightleftharpoons 2'2'2' \rightleftharpoons 6'2'2'.$$

Серия двойников с симметрией $2'2'2'$ и $2m'm'$ характерна тем, что здесь общими являются не только грани ромбоэдров, но и грани тригональной призмы. Такие двойники описаны в литературе; к ним относятся двойники по закону Рихтенштейн-Гризенталь [поворот вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$ на $76^\circ 26'$] и по циннвальдскому закону [поворот вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$ на $38^\circ 13'$].

Если поворот вокруг нормали к $(11\bar{2}0)$ совершать все время в одну сторону, а соприкасающимися гранями будут $\{11\bar{2}0\}$, то произойдет закручивание левых индивидов в левую сторону, а правых — вправо. Стержневая симметрия таких образований будет отвечать симметрии закрученной ленты [67]. Точечная симметрия будет отвечать предельной группе $\infty 2$.

Вращение компонентов из четырех исходных положений с параллельными осями вокруг перпендикуляра к (0001) привело к новым двойникам, еще не описанным в литературе. При этом ось вращения $[0001]$ одновременно является тройной осью. Схематически эти повороты могут быть записаны в следующем виде:

$$32 \rightleftharpoons 32' \rightleftharpoons 6'2'2';$$

$$\bar{3}'m' \rightleftharpoons 3m' \rightleftharpoons \bar{6}'2m'.$$

Мозаичные кристаллы, блоки которых повернуты на небольшой угол вокруг тройной оси, таким образом могут быть описаны как двойники с симметрией $32'$ или $3m'$. Значение угла поворота не важно, так как любой поворот вокруг $[0001]$ от 0 до 60° дает симметрию $32'$ или $3m'$. На рис. 77 приведена фотография мозаичного кристалла, грани призмы которого представлены узкими вытянутыми блоками, повернутыми вокруг тройной оси. Углы поворота для разных блоков колеблются от $20'$ до 2° . Сигналы от отдельных блоков в гониометре представляют собой серию узких параллельных полосок.

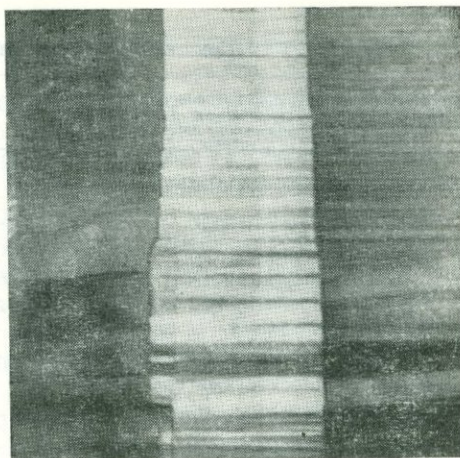


Рис. 77. Участок грани $(10\bar{1}1)$ мозаичного кристалла кварца. $\times 14$.

Параллельность сигналов от отдельных блоков доказывает, что тройная ось у них действительно является общей. Симметрия описываемых двойников $32'$, плоскость срастания $\{hk\bar{i}0\}$ и может быть иррациональна. С границами таких двойников часто связаны свили.

В табл. 35 сведены все достоверно известные из литературы законы двойникования α -кварца с непараллельными осями. Все законы разбиты на три серии, для которых указаны двухцветные группы симметрии и основные плоскости срастания. В первом столбце даны названия законов, во втором — углы между осями $[0001] : [0001]$.

Двойники остальных модификаций кремнезема могут быть выведены аналогичным путем. Для высокотемпературного β -кварца (класс симметрии которого 622) возможны следующие группы двухцветной симметрии двойников: $62'2'$, $6m'm'$, $22'2'$, $2m'm'$, $6/m'm'm'$, $4'22'$, $\bar{4}'2m'$, $2'$, m' . Вывод возможных двойниковых законов для высокотемпературного β -кварца может быть произведен из двух исходных положений индивидов с симметрией 622 (монокристалл) и $6/m'm'm'$ (аналог бразильского закона α -кварца). Аналогами японского типа двойникования α -кварца в высокотемпературном кварце являются брейтгауптские двойники [угол $[0001] : [0001] = 48^\circ 54'$ равен углу вращения нормали к $(10\bar{1}0)$] и вереспатакские двойники (угол $[0001] : [0001] = 80^\circ 34'$) с точечной двухцветной симметрией $22'2'$ или $2m'm'$. Точечную двухцветную симметрию $22'2'$ и $2m'm'$ имеют также эстерельские двойники (аналоги закона Рихтенштейн-Гризенталь) и сардинские

Двойники α -кварца с наклонными осями

Основные плоскости срастания и двухцветная симметрия двойников; название двойникового закона	Угол между осями 3	Примечание
Двойники с плоскостями срастания $\{10\bar{1}0\}$, $\{hh\bar{2}hl\}$, $2'$, m' : цвиккауский закон закон Гольдшмидта закон Брейтгаупта японский закон прямоугольный закон Фриделя	42°47' 47 43 48 54 84 33 90	Угол $[0001] : [0001] =$ = углу вращения во- круг \perp к (1010)
Двойники с плоскостями срастания $\{11\bar{2}0\}$, $\{h0\bar{h}l\}$, $22'2'$, $2m'm'$: цинвальдский закон закон Рихтенштейн-Гризенталь закон Селла	38 13 76 26 64 50	Угол $[0001] : [0001] =$ = углу вращения во- круг \perp к $(11\bar{2}0)$
Двойники с плоскостями срастания $\{h0\bar{h}l\}$, $\{hk\bar{i}l\}$, $2'$, m' : закон Циндель-А тифлисский закон летшентальский закон закон Циндель-Л закон Зедорф-I закон Зедорф-II закон Дизентис	53 49 109 39 58 05 74 89 42 14 90 43 31	Поворот вокруг \perp к $(hk\bar{i}l)$ на 180°

двойники (аналоги закона Селла). Самшвилдовские двойники относятся к группе двойниковых законов с общими плоскостями $\{h0\bar{h}l\}$, $\{hk\bar{i}l\}$, описываются двухцветной группой с симметрией $2'$ и m' и могут быть выведены вращением индивидов вокруг нормали к $\{h0\bar{h}l\}$ на $30^\circ 40'$. Двойники по закону Пьер-Леве и уилкотские двойники с общими плоскостями соответственно $\{21\bar{3}3\}$ и $\{21\bar{3}1\}$ и углами между осями шестого порядка $83^\circ 30'$ и $33^\circ 8'$ должны описываться двухцветной группой с симметрией $2'$ и m' . Двухцветная группа симметрии белоудских и корнуэллских двойников пока не может быть точно установлена ввиду отсутствия достаточных данных.

У тридимита двойники известны только для высокотемпературной модификации с классом симметрии $6/mmm$, поскольку данные по морфологии низко- и среднетемпературного тридимита отсутствуют.

В классе симметрии $6/mmm$ не может быть двойников с параллельными осями. Двойники с двухцветными точечными группами $2m'm'$, $6/mm'm'$, $mm'm'$ выводятся путем вращения компонентов параллельного сростка вокруг нормалей к граням кристалла. Широко распространенные двойники тридимита с плоскостью срастания $(10\bar{1}6)$ и $(30\bar{3}4)$ и углами $[0001] : [0001]$ соответственно

$35^{\circ}18'$ и $64^{\circ}50'$ описываются двухцветной группой симметрии $mm'm'$.

Известные по литературе данные о двойниках кристобалита не позволяют пока что однозначно определить их двухцветную группу симметрии. Возможные двухцветные группы класса симметрии 422 (?) (низкотемпературный тридимит) и 23 (?) (высокотемпературный тридимит) приведены в табл. 12.

Моноклинная модификация кремнезема — коэзит относится к призматическому классу симметрии $2/m$, для которого возможны следующие двухцветные группы двойников прорастания: $mm'm'$, $4'/m$, $2'/m$. Двойники коэзита, описанные у К. Фронделя [85], по (100) дают двухцветную группу симметрии $mm'm'$, а по (021) — $2'/m'$.

Разобранные примеры показывают, что в ряде случаев число законов двойникования следует сократить. Примером могут служить двойники японской серии, которых, в принципе, может быть бесчисленное множество. Двойники такого типа, как указывалось, относятся к так называемым «нежестким» двойникам, так как симметрии этих двойников сохраняются неизменными при вращении компонентов вокруг определенных направлений.

Таким образом, для хорошо изученного α -кварца имеются все двойники, перечисленные в табл. 12, за исключением двойников с симметрией $4'$ и $\bar{4}'$. Двойники с такими осями также отсутствуют и в перечне двойников β -кварца.

На примере японских двойников продемонстрировано реальное проявление разновидностей двойниковых законов, перечисленных в табл. 14.

ВЗАИМНАЯ ОРИЕНТИРОВКА КРИСТАЛЛОВ, ВЫЗВАННАЯ ЭПИТАКСИЕЙ*

Образование двойников может быть вызвано различными причинами. Здесь мы рассмотрим только возможные случаи взаимной ориентировки кристаллов, вызванные эпитаксией.

А. В. Шубников различает пять способов образования двойников [68]: 1) срастание кристаллов при случайном соприкосновении во время роста, 2) параллельное наложение молекул на зародышевый двойник, 3) отложение молекул на готовом кристалле в двойниковом положении, 4) при полиморфных превращениях и 5) при механических воздействиях. Очевидно, что дать исчерпывающий перечень всех причин образования двойников не представляется возможным. Но с геометрической стороны вопроса все причины могут быть рассмотрены из двух исходных позиций: либо за двойниковую переориентировку компонентов несет ответственность двойниковая граница, как, например, у двойников роста («ошибки» упаковки при политипии, смешано-слоистые срастания глинистых минералов и т. д.), либо двойниковая граница возни-

* См. работу [Мокиевский В. А., Чащинов Ю. Н., 1969 г.].

кает вследствие переориентировки компонентов под влиянием внешних воздействий (фазовые переходы, механические двойники и т. д.). Здесь будут рассмотрены только двойниковые и более сложные переориентировки кристаллов, возникающих за счет границы. Как уже было сказано, двойниковую группу можно рассматривать как некоторую самостоятельную фазу, которая может быть представлена веществом того же химического состава, что и компоненты (политипия, двойники при фазовых переходах, механические двойники), или посторонним химическим веществом. В обоих случаях причина двойниковой переориентировки может быть рассмотрена с позиции эпитаксии. Закономерная ориентировка компонентов двойника, вызванная эпитаксией, была замечена А. Е. Ферсманом и названа им вынужденным двойникованием. Вынужденное двойникование уже описывалось в литературе ([52]; Чащинов Ю. Н., Мокневский В. А. [1966 г.]). Если за переориентировку кристаллов несет ответственность граница, то двойникование и эпитаксия могут быть рассмотрены с единых позиций — образование эпитаксиальных текстур.

Однородность монокристаллических эпитаксиальных слоев (пленок) в большинстве случаев нарушается различного рода дефектами. Такими дефектами в основном являются: 1) дислокации, наследуемые пленкой из подложки и возникающие в самом эпитаксиальном слое, 2) примеси (легирующие и случайные), распределенные в пленке неравномерно по разным причинам, и в первую очередь по пирамидам роста граней, в том числе и вицинальных, 3) так называемые дефекты упаковки, проявляющие себя в виде участков пленки с другой ориентировкой. В ряде же случаев находят применение поликристаллические пленки, которые заведомо представляют текстуру с той или иной симметрией.

Для получения эпитаксиальных слоев используются плоские поверхности, приготовленные из монокристалла путем шлифования и полировки. Эти поверхности лишь приблизительно отвечают задаваемой плоскости кристалла. Поэтому в ряде случаев нельзя ожидать монокристаллического слоя. Естественные грани кристалла используются в качестве подложки значительно реже, так как они почти всегда усложнены различного рода фигурами роста и растворения.

Здесь будут рассмотрены только те случаи эпитаксиальных текстур, возникновение которых связано с плоской поверхностью подложки. Автор придерживается определения текстуры, данного в работе [70], в которой под «текстурой» разумеется «всякое однородное тело нерешетчатой структуры, состоящее из множества элементарных частиц любой физической природы, определенным образом (по законам симметрии) ориентированных в пространстве».*

* Как будет видно из дальнейшего изложения, автор рассматривает не такие текстуры, а своеобразные сверхструктуры, имеющие решетчатое строение.—
Ред.

По симметрии эпитаксиальные текстуры, возникающие на кристаллической поверхности заданной ориентировки, можно разделить на следующие типы.

1. Текстуры, имеющие симметрию $\infty/\infty m$ и ∞/∞ . Такие текстуры отвечают беспорядочному расположению кристаллов слоя на поверхности подложки, т. е. подложка не имеет ориентирующего поля. При достаточно мелких кристаллах слоя лауэграмма, полученная в любой ориентировке слоя относительно направления рентгеновского луча, будет иметь одинаковые картины, отвечающие дебаеграммам. Подобная текстура была описана в работе автора совместно с Ян Фэн-цзюнь [1961 г.].

2. Текстуры с одной осью бесконечного порядка: ∞/mm , $\infty/2$, ∞/m , ∞m и ∞ . Ось бесконечного порядка может быть расположена нормально, параллельно и косо к поверхности подложки. Когда ось ∞ ориентирована нормально к поверхности подложки, кристаллы слоя соприкасаются гранями одной простой формы с поверхностью подложки. При косом и параллельном расположении оси ∞ к плоскости подложки кристаллы слоя касаются подложки различными простыми формами и в их ориентировке играла роль не заданная грань подложки, а косая или нормальная грань (косое или параллельное направление подложки). Г. Близнаков относит этот тип к эпитаксии первого рода [7]. Такие текстуры были описаны Н. Н. Стуловым [40] и другими авторами и возникают на некристаллических подложках (например, на стекле) или на кристаллических поверхностях, сохранивших по той или иной причине одно направление ориентирующего поля. Можно высказать предположение, что существует разновидность этого типа текстур — текстуры качания, у которых кристаллы слоя вращаются на определенный угол вокруг некоторой оси; симметрия таких текстур может быть кристаллографической, если подложкой служит кристалл.

3. Текстуры, группы симметрии которых не имеют осей бесконечного порядка. Этот тип представляет собой классическую эпитаксию, при которой кристалл слоя связан с кристаллом подложки двумя направлениями. Иначе говоря, определенная грань кристалла слоя срастается с определенной гранью кристалла подложки, причем определенное направление, лежащее в грани срастания кристалла слоя, параллельно определенному направлению, лежащему в плоскости подложки.

В задачу данного исследования входило нахождение всех точечных групп симметрии текстур третьего типа или второго рода по Г. Близнакову.

Элементарной частицей (компонентом) эпитаксиальной текстуры считаются кристаллические индивиды, параллельно расположенные на плоскости монокристаллической подложки. Представление о симметрии такой текстуры можно получить путем параллельного перемещения всех элементов симметрии компонентов в одну точку. Примером может служить хорошо известный случай эпитаксии KCl (класс $m\bar{3}m$) на мусковите (класс $2/m$),

когда (111) $[\bar{1}\bar{1}2]$ или $[112]$ соли $\parallel (001)$ $[100]$ слюды. В результате поворота ориентированных кристаллов KCl друг относительно друга на 180° вокруг тройной оси возникает эпитаксиальная текстура с симметрией $6/mmm$.

Здесь рассматриваются только пирамидальные группы симметрии односторонних текстур, возникающих при наращивании эпитаксиального осадка на одной стороне плоской подложки, и дипирамидальные группы симметрии двусторонних текстур, образующихся при наращивании ориентированных кристаллов на параллельных плоскостях подложки. Поэтому при определении симметрии текстуры достаточно учитывать 10 односторонних плоскостных точечных групп симметрии, которые дают 100 возможных сочетаний подложка—осадок.

Из вышеотмеченного представления симметрии эпитаксиальной текстуры вытекает, что аксиальная подгруппа наивысшего порядка группы симметрии грани кристалла—осадка, которая срастается с плоскостью подложки, всегда входит в состав группы симметрии односторонней текстуры. Можно также показать, что в группе симметрии односторонней текстуры будут содержаться плоскости, если последние имеются в группе симметрии этой грани. Отсюда группа симметрии односторонней эпитаксиальной текстуры обязательно включает группу симметрии контактной грани кристалла—осадка. На основании определения эпитаксии третьего типа (второго рода) следует, что группа симметрии односторонней текстуры должна содержать также аксиальную подгруппу наивысшего порядка группы симметрии плоскости подложки. Плоскости симметрии поверхности подложки войдут в состав группы симметрии такой текстуры в случае эквивалентности при эпитаксии энантиоморфных направлений на плоскости подложки. Приведенный пример нарастания KCl на слюде показывает, что в группе симметрии эпитаксиальной текстуры могут присутствовать операции симметрии, не входящие в состав групп симметрии подложки и контактной грани кристалла—осадка. Назовем такие операции «производными». Появление указанных операций в эпитаксиальной текстуре KCl обусловлено отсутствием существенных различий направлений $[100]$, $[\bar{1}00]$ с симметрией m на плоскости (001) мусковита. Таким образом, направление $[100]$ на поверхности (001) слюды в данном примере приходится рассматривать как направление с симметрией $2mm$. В более общем случае любой ряд на плоскости подложки при эпитаксии может «повысить» свою симметрию до $2mm$. Условное «повышение» симметрии ряда до m и $2mm$ вероятно, если кристаллы осадка имеют энантиоморфные грани или выпадают энантиоморфные модификации данного вещества.

В дальнейшем для каждой пары сростающихся плоскостей допускается возможное «повышение» группы симметрии направлений на плоскости подложки за счет добавления «производных» операций симметрии. При этом оси симметрии, содержащиеся в аксиальных подгруппах наивысшего порядка групп симметрии

плоскости подложки и контактной' грани кристалла—осадка, составят аксиальную подгруппу наивысшего порядка группы симметрии односторонней эпитаксиальной текстуры. Например, если группы симметрии плоскости подложки и грани кристалла—осадка содержат оси 3 и 4, то наивысшего порядка аксиальная подгруппа группы симметрии текстуры будет 12. Появление плоскостей в группе симметрии односторонней текстуры обязательно при наличии плоскостей в группе симметрии контактной грани кристалла—осадка и возможно, если таковые присутствуют в группе симметрии плоскости подложки.

Для удобства изображения текстур были использованы модели 10 указанных точечных групп с помощью стрелок (рис. 2). В качестве примера рассмотрим односторонние текстуры, возникающие при нарастании кристаллов плоскостью с симметрией 3 на плоскость подложки с симметрией 1. На рис. 78 изображены возможные в этом случае односторонние текстуры. Возникновение текстуры *a*, содержащей один компонент, в пояснениях не нуждается. Текстура *b* образуется при возможном «повышении» симметрии ряда подложки до *m* и равной вероятности осаждения на подложку энантиоморфных модификаций или при существовании энантиоморфных разновидностей граней одной простой формы кристаллов осадка. Текстура *в* получается в том случае, когда симметрия подложки «повышается» до 2. Текстура *г* объединяет случаи *b* и *в* и отвечает «повышению» симметрии ряда подложки до $2m$. Текстуры *b* и *в* состоят из двух компонентов, находящихся как бы в двойниковом положении, а текстура *г* — из четырех.

Симметрия двусторонней текстуры выводится путем добавления к односторонней группе симметрии подложки переворачивающих операций симметрии в такой последовательности: $\bar{1}$, *m*, 2, $\bar{4}$. Эти операции могут как присутствовать в двусторонней группе симметрии подложки, так и быть «производными» (кроме 4), «повышающими» двустороннюю симметрию определенного ряда подложки до mmm . Так, при эпитаксии Ge (класс $m\bar{3}m$) на параллельных плоскостях (111) и ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) GaAs (класс $\bar{4}3m$) кристаллы Ge осаждаются на них в параллельном положении друг относительно друга, несмотря на кристаллографическое различие плоскостей тетраэдров арсенида галлия. Следовательно, можно считать, что двусторонняя группа симметрии подложки «повысилась» до $\bar{3}m$. Каждой односторонней группе симметрии текстуры соответствует несколько двусторонних групп. Максимальное число двусторонних групп симметрии текстур, выводящихся из односторонней группы, равно пяти, так как ось 2 подложки может быть добавлена к плоскости симметрии односторонней текстуры в трех ориентировках: параллельно, перпендикулярно и косо. Если плоскость подложки имеет осевую симметрию, то добавление к односторонней группе симметрии операций $\bar{1}$, $\bar{4}$ или *m* необязательно приводит к появлению двусторонней текстуры, так как энантио-

Симметрия односторонних текстур	Симметрия двусторонних текстур				
	1	2	3	4	5
α $\bar{3}$	 $\bar{3}$	 $\bar{6}$			 $\bar{3}2$
β $3m$	 $\bar{3}m$	 $\bar{6}2m$	 $\bar{6}2m$	 $\bar{3}m$	 $\bar{3}2$
γ 6	 $6/m$	 $6/m$			 622
δ $6mm$	 $6/mmm$	 $6/mmm$	 $6/mmm$	 $6/mmm$	 622

Рис. 78. Модели текстур и их симметрии при эпитаксии (1, 3).

Цифры 1—4 внутри треугольников — номера компонентов. Обратные стороны треугольников помечены чертой, параллельной катету. Точки указывают наличие плоскости симметрии, параллельной плоскости чертежа.

морфные параллельные плоскости подложки могут оказаться неэквивалентными для осаждения эпитаксиального осадка с двух сторон. Модели некоторых двусторонних эпитаксиальных текстур и их симметрия показаны на рис. 78.

Все возможные группы симметрии односторонних и двусторонних текстур даны в табл. 36. В столбце А таблицы на первом месте указана односторонняя группа симметрии плоскости подложки, запятой отделена группа симметрии контактной грани кристалла—осадка, а точкой с запятой — группа симметрии границы срастания (кристалл—подложка), найденная в результате пересечения групп симметрии срастающихся плоскостей на основании принципа симметрии Кюри. В столбце Б перечислены все возможные группы односторонних и двусторонних текстур, причем последние заключены в скобки. Повторяющиеся группы симметрии

Симметрия эпитаксиальных текстур

Симметрия граней и гра- ницы	Симметрия текстур	Симметрия граней и гра- ницы	Симметрия текстур
А	Б	А	Б
1, 1; 1	1 ($\bar{1}$, m , $\bar{2}$) m ($2/m$, $2mm$, $2\cdot 2$) 2 ($2/m$, 222) $2mm$ (mmm , $222\cdot 2$)	2, 3; 1	6 ($6/m$, 622 , $\bar{1}2$) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$, $\bar{1}22m$)
1, 2; 1	2 ($2/m$, 222) $2mm$ (mmm , $222\cdot 2$)	2, 4; 2	4 ($4/m$, 422) $4mm$ ($4/mmm$, $422\cdot 2$)
1, 3; 1	3 ($\bar{3}$, $\bar{6}$, 32) $3m$ ($3m$, $\bar{6}2m$, $32\cdot 2$) 6 ($6/m$, 622) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$)	2, 6; 2	6 ($6/m$, 622 , $\bar{1}2$) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$, $\bar{1}22m$)
1, 4; 1	4 ($4/m$, 422) $4mm$ ($4/mmm$, $422\cdot 2$)	2, m ; 1	$2mm$ (mmm , $222\cdot 2$, $\bar{4}2m$)
1, 6; 1	6 ($6/m$, 622) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$)	[pq], [$p\bar{q}$], 1	$2mm\cdot 2$ ($mmm\cdot 2$, $222 \times$ $\times 4$, $\bar{4}2m\cdot 2$)
1, m ; 1	m ($2/m$, $2mm$, $2\cdot 2$) $2mm$ (mmm , $222\cdot 2$)	2, $2mm$; 2	$2mm$ (mmm , $222\cdot 2$, $\bar{4}2m$)
[pq], [$p\bar{q}$]; 1	$m\cdot 2$ ($2/m\cdot 2$, $2mm\cdot 2$, $2\cdot 4$) $2mm\cdot 2$ ($mmm\cdot 2$, $222\cdot 4$)	[pq], [$p\bar{q}$]; 2	$2mm\cdot 2$ ($mmm\cdot 2$, $222 \times$ $\times 4$, $\bar{4}2m\cdot 2$)
1, $2mm$; 1	$2mm$ (mmm , $222\cdot 2$)	2, $3m$; 1	$6mm$ ($6/mmm$, $622 \times$ $\times 2$, $\bar{1}22m$)
[pq], [$p\bar{q}$]; 1	$2mm\cdot 2$ ($mmm\cdot 2$, $222\cdot 4$)	[pq], [$p\bar{q}$], 1	$6mm\cdot 2$ ($6/mmm\cdot 2$, $622 \times$ $\times 4$, $\bar{1}22m\cdot 2$)
1, $3m$; 1	$3m$ ($\bar{3}m$, $\bar{6}2m$, $32\cdot 2$) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$)	2, $4mm$; 2	$4mm$ ($4/mmm$, $422\cdot 2$)
[pq], [$p\bar{q}$]; 1	$3m\cdot 2$ ($\bar{3}m\cdot 2$, $\bar{6}2m\cdot 2$, $32\cdot 4$) $6mm\cdot 2$ ($6/mmm \times$ $\times 2$, $622\cdot 4$)	[pq], [$p\bar{q}$]; 2	$4mm\cdot 2$ ($4/mmm\cdot 2$, $422\cdot 4$)
1, $4mm$; 1	$4mm$ ($4/mmm$, $422\cdot 2$)	2, $6mm$; 2	$6mm$ ($6/mmm$, $622 \times$ $\times 2$, $\bar{1}22m$)
[pq], [$p\bar{q}$]; 1	$4mm\cdot 2$ ($4/mmm\cdot 2$, $422\cdot 4$)	[pq], [$p\bar{q}$]; 2	$6mm\cdot 2$ ($6/mmm\cdot 2$, $622 \times$ $\times 4$, $\bar{1}22m\cdot 2$)
1, $6mm$; 1	$6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$)	3, 2; 1	6 ($6/m$, 622) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$)
[pq], [$p\bar{q}$]; 1	$6mm\cdot 2$ ($6/mmm\cdot 2$, $622\cdot 4$)	3, 3; 3	3 ($\bar{3}$, $\bar{6}$, 32) $3m$ ($\bar{3}m$, $\bar{6}2m$, $32\cdot 2$) 6 ($6/m$, 622) $6mm$ ($6/mmm$, $622\cdot 2$)
2, 1; 1	2 ($2/m$, 222 , $\bar{4}$) $2mm$ (mmm , $222\cdot 2$, $\bar{4}2m$)	3, 4; 1	12 ($12/m$, 1222) $12mm$ ($12/mmm$, $1222\cdot 2$)
2, 2; 2	2 ($2/m$, 222 , $\bar{4}$) $2mm$ (mmm , $222\cdot 2$, $\bar{4}2m$)		

Симметрия граней и гра- ницы	Симметрия текстур	Симметрия граней и гра- ницы	Симметрия текстур
А	Б	А	Б
3, 6; 3	6 (6/m, 622) 6mm (6/mmm, 622·2)	[pq], [p̄q̄]; 4	4mm·2 (4/mmm·2, 422 × × 4)
3, m; 1	3m (3̄m, 6̄2m, 32·2) 6mm (6/mmm, 622·2)	4, 6mm; 2	12mm (12/mmm, 1222·2)
[pq], [p̄q̄]; 1	3m·2 (3̄m·2, 6̄2m·2, 32 × × 4) 6mm·2 (6/mmm × × 2, 622·4)	[pq], [p̄q̄]; 2	12mm·2 (12/mmm × × 2, 1222·4)
3, 2mm; 1	6mm (6/mmm, 622·2)	6, 2; 2	6 (6/m, 622) 6mm (6/mmm, 622·2)
[pq], [p̄q̄]; 1	6mm·2 (6/mmm·2, 622 × × 4)	6, 6; 6	6 (6/m, 622) 6mm (6/mmm, 622·2)
3, 3m; 3	3m (3̄m, 6̄2m, 32·2) 6mm (6/mmm, 622 × × 2)	6, m; 1	6mm (6/mmm, 622·2)
[pq], [p̄q̄]; 3	3m·2 (3̄m·2, 6̄2m·2, 32 × × 4) 6mm·2 (6/mmm × × 2, 622·4)	[pq], [p̄q̄]; 1	6mm·2 (6/mmm·2, 622·4)
3, 4mm; 1	12mm (12/mmm, 1222·2)	6, 2mm; 2	6mm (6/mmm, 622·2)
[pq], [p̄q̄]; 1	12mm·2 (12/mmm × × 2, 1222·4)	[pq], [p̄q̄]; 2	6mm·2 (6/mmm·2, 622·4)
3, 6mm; 3	6mm (6/mmm, 622·2)	6, 3m; 3	6mm (6/mmm, 622·2)
[pq], [p̄q̄]; 3	6mm·2 (6/mmm·2, 622·4)	[pq], [p̄q̄]; 3	6mm·2 (6/mmm·2, 622·4)
4, 4; 4	4 (4/m, 422) 4mm (4/mmm, 422·2)	6, 4mm; 2	12mm (12/mmm, 1222·2)
4, 6; 2	12 (12/m, 1222) 12mm (12/mmm, 1222·2)	[pq], [p̄q̄]; 2	12mm·2 (12/mmm × × 2, 1222·4)
4, m; 1	4mm (4/mmm, 422·2)	6, 6mm; 6	6mm (6/mmm, 622·2)
[pq], [p̄q̄]; 1	4mm·2 (4/mmm·2, 422 × × 4)	[pq]; [p̄q̄]; 6	6mm·2 (6/mmm·2, 622·4)
4, 2mm; 2	4mm (4/mmm, 422·2)	m, 1; 1	1 (2) m (2/m, 2mm) 2 (222) 2mm (mmm)
[pq], [p̄q̄]; 2	4mm·2 (4/mmm·2, 422 × × 4)	m, 2; 1	2 (222) 2mm (mmm)
4, 3m; 1	12mm (12/mmm, 1222·2)	m, 3; 1	3 (32) 3m (3̄m, 6̄2m) 6 (622) 6mm (6/mmm)
[pq], [p̄q̄]; 1	12mm·2 (12/mmm × × 2, 1222·4)	m, 4; 1	4 (422) 4mm (4/mmm)
4, 4mm; 4	4mm (4/mmm, 422·2)	m, 6; 1	6 (622) 6mm (6/mmm)
		m, m; m	m (2/m, 2mm) 2mm (mmm)
		[pq]; 1	m (2·2) 2mm (222·2)
		[pq], [p̄q̄]; 1	m·2 (2/m·2, 2mm·2) × × 2mm·2 (mmm·2)

Симметрия граней и гра- ницы	Симметрия текстур	Симметрия граней и гра- ницы	Симметрия текстур
А	Б	А	Б
$m, 2m; m$	$2m (mmm)$	$[pq]; 2$	$6m (622\cdot 2)$
$[pq]; 1$	$2m (222\cdot 2)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 2$	$6m \cdot 2 (6/mmm \times$ $\times 2, \bar{1}22m \cdot 2)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$2m \cdot 2 (mmm \cdot 2)$		
$m, 3m; m$	$3m (\bar{3}m, \bar{6}2m) 6m$ $(6/mmm)$	$3m, 1; 1$	$3 (32) 3m (\bar{3}m, \bar{6}2m)$ $6 (622) 6m (6/mmm)$
$[pq]; 1$	$3m (32\cdot 2) 6m (622\cdot 2)$	$3m, 2; 1$	$6 (622) 6m (6/mmm)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$3m \cdot 2 (\bar{3}m \cdot 2, \bar{6}2m \cdot 2)$ $6m \cdot 2 (6/mmm \cdot 2)$	$3m, 3; 3$	$3 (32) 3m (\bar{3}m, \bar{6}2m)$ $6 (622) 6m (6/mmm)$
$m, 4m; m$	$4m (4/mmm)$	$3m, 4; 1$	$12 (1222) 12m (12/mmm)$
$[pq]; 1$	$4m (422\cdot 2)$	$3m, 6; 3$	$6 (622) 6m (6/mmm)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$4m \cdot 2 (4/mmm \cdot 2)$	$3m, 2m; m$	$6m (6/mmm)$
$m, 6m; m$	$6m (6/mmm)$	$[pq]; 1$	$6m (622\cdot 2)$
$[pq]; 1$	$6m (622\cdot 2)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$6m \cdot 2 (6/mmm \cdot 2)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$6m \cdot 2 (6/mmm \cdot 2)$	$3m, 3m; 3m$	$3m (\bar{3}m, \bar{6}2m) 6m$ $(6/mmm)$
$2m, 1; 1$	$2 (222) 2m (mmm, \bar{4}2m)$	$[pq]; 3$	$3m (32\cdot 2) 6m (622\cdot 2)$
$2m, 2; 2$	$2 (222) 2m (mmm, \bar{4}2m)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 3$	$3m \cdot 2 (\bar{3}m \cdot 2, \bar{6}2m \cdot 2)$ $6m \cdot 2 (6/mmm \cdot 2)$
$2m, 3; 1$	$6 (622) 6m (6/mmm,$ $\bar{1}22m)$	$3m, 4m; m$	$12m (12/mmm)$
		$[pq]; 1$	$12m (1222\cdot 2)$
$2m, 4; 2$	$4 (422) 4m (4/mmm)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$12m \cdot 2 (12/mmm \cdot 2)$
$2m, 6; 2$	$6 (622) 6m (6/mmm,$ $\bar{1}22m)$	$3m, 6m; 3m$	$6m (6/mmm)$
$2m, m; m$	$2m (mmm, \bar{4}2m)$	$[pq]; 3$	$6m (622\cdot 2)$
$[pq]; 1$	$2m (222\cdot 2)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 3$	$6m \cdot 2 (6/mmm \cdot 2)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$2m \cdot 2 (mmm \cdot 2, \bar{4}2m \cdot 2)$	$4m, 1; 1$	$4 (422) 4m (4/mmm)$
$2m, 2m; 2m$	$2m (mmm, \bar{4}2m)$	$4m, 2; 2$	$4 (422) 4m (4/mmm)$
$[pq]; 2$	$2m (222\cdot 2)$	$4m, 3; 1$	$12 (1222) 12m$ $(12/mmm)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 2$	$2m \cdot 2 (mmm \cdot 2, \bar{4}2m \cdot 2)$	$4m, 4; 4$	$4 (422) 4m (4/mmm)$
$2m, 3m; m$	$6m (6/mmm, \bar{1}22m)$	$4m, 6; 2$	$12 (1222) 12m$ $(12/mmm)$
$[pq]; 1$	$6m (622\cdot 2)$	$4m, 4m; 4m$	$4m (4/mmm)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 1$	$6m \cdot 2 (6/mmm \times$ $\times 2, \bar{1}22m \cdot 2)$	$[pq]; 4$	$4m (422\cdot 2)$
$\{2m, 4m; 2m\}$	$4m (4/mmm)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 4$	$4m \cdot 2 (4/mmm \cdot 2)$
$[pq]; 2$	$4m (422\cdot 2)$	$4m, 6m; 2m$	$12m (12/mmm)$
$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 2$	$4m \cdot 2 (4/mmm \cdot 2)$	$[pq]; 2$	$12m (1222\cdot 2)$
$2m, 6m; 2m$	$6m (6/mmm, \bar{1}22m)$	$[pq], [\bar{p}\bar{q}]; 2$	$12m \cdot 2 (12/mmm \cdot 2)$

Симметрия граней и границы	Симметрия текстур	Симметрия граней и границы	Симметрия текстур
А	Б	А	Б
6mm, 1; 1	6 (622) 6mm (6/mmm)	6mm, 2mm; 2mm	6mm (6/mmm)
6mm, 2; 2	6 (622) 6mm (6/mmm)	[pq]; 2	6mm (622·2)
6mm, 3; 3	6 (622) 6mm (6/mmm)	[pq], [p \bar{q}]; 2	6mm·2 (6/mmm·2)
6mm, 4; 2	12 (1222) 12mm (12/mmm)	6mm, 6mm; 6mm	6mm (6/mmm)
6mm, 6; 6	6 (622) 6mm (6/mmm)	[pq]; 6	6mm (622·2)
		[pq], [p \bar{q}]; 6	6mm·2 (6/mmm·2)

односторонних и двусторонних текстур не указаны. Если перестановка в столбце А групп симметрии до запятой и после нее не влечет за собой появление новых групп симметрии текстур, то приводится только один вариант. Из таблицы можно определить количество различно ориентированных компонентов, образующих текстуру. Для этого в большинстве случаев порядок группы симметрии текстуры нужно разделить на порядок группы, указанной в колонке А после запятой. Иногда порядок группы симметрии текстуры надо удвоить или учетверить, что указано в таблице знаком умножения на два или четыре. Если плоскость подложки и контактная грань кристалла—осадка имеют плоскости симметрии, ориентировка кристаллов эпитаксиального осадка и текстура могут быть обусловлены правыми и левыми направлениями в подложке и в грани компонента текстуры. Эти направления обозначены в таблице символами [pq] и [p \bar{q}].

В настоящей работе принимались во внимание только плоские односторонние и двусторонние группы симметрии подложки и односторонние группы симметрии грани нарастающих кристаллов. Остальные элементы симметрии кристалла—осадка не рассматривались. С учетом этих элементов симметрия текстуры изменится. Например, классическая односторонняя текстура из кристаллов KCl на мусковите имеет симметрию 6mm. Добавление центра симметрии, присутствующего у каждого компонента, повысит симметрию такой текстуры до 6/mmm, т. е. до группы симметрии «шпинелевого» двойника. Отсюда следует, что ряд двойниковых рэориентировок, часто наблюдаемых при синтезе эпитаксиальных слоев, вызван природой самой подложки или пленками других (примесных) соединений, возникающих периодически в процессе формирования слоя. Эти же явления могут способствовать образованию двойников и при выращивании крупных монокристаллов.

Наивысшая по симметрии эпитаксиальная текстура отвечает группе 12/mmm. Примером такой текстуры может служить окисная пленка на грани (100) меди, полученная при 170—450 °С

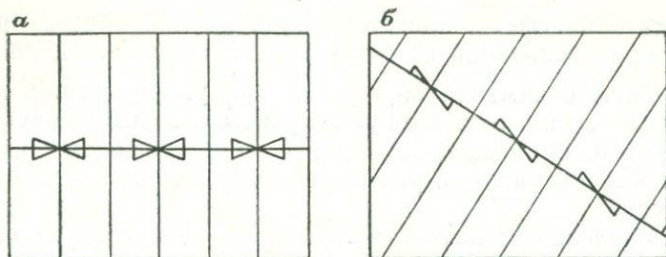


Рис. 79. Примеры «текстурирования» подложки с симметрией $2mm$ (m параллельна сторонам прямоугольника).

Линиями изображены оси канавок и гребни. Стрелками показаны симметрия и падение скатов канавок. Симметрия «текстурированных» подложек: $a - m/2m$; $b - 1/2$ (наклонной чертой отделены элементы симметрии, совпадающие с осью стержня текстуры, от элементов симметрии, нормальных к оси стержня).

[32]. Кристаллы Si_2O нарастают на (100) подложки гранями (111) так, что направления [110], лежащие в плоскостях срастания, параллельны. При такой ориентировке симметрия односторонней текстуры будет обязательно отвечать $12mm$, а двусторонней — $12/mmm$. Этот случай находится в табл. 36 для срастания $3m$, $4mm$ или наоборот.

«Беспорядочное» распределение кристаллов в текстуре, обладающей одной из перечисленных в таблице групп симметрии, можно в ряде случаев упорядочить, т. е. расположить отдельные кристаллы в строгом порядке, описываемом группой симметрии стержня или плоской группой дисконтинуума (80 групп). Симметрия односторонних и двусторонних стержней может отвечать 31-й группе симметрии лент [67]. Чтобы создать условия, благоприятные для упорядочения текстуры, необходимо «текстурировать» плоскость подложки. Задача «текстурирования» подложки сводится к удалению плоскостей, которые могут вызвать «беспорядочное» расположение кристаллов осадка. Такими плоскостями являются обычно высокосимметричные грани кристалла. Практически такую задачу можно выполнить путем нанесения на поверхность подложки данной ориентации механическим способом или травлением специальных канавок с определенными углами между скатами. Плоскости скатов должны быть низкосимметричными. Меняя направления вытянутости канавок, углы наклона скатов и т. д., можно придать текстуре желаемый рисунок, симметрия которого описывается 17 односторонними группами симметрии дисконтинуума и симметрией лент (бордюров).

На рис. 79 приведены некоторые варианты «текстурирования» плоскости подложки с точечной симметрией $2mm$ и указаны группы симметрии текстур, которые могут возникнуть при таком способе подготовки подложки. Легче всего поддаются упорядочению текстуры, состоящие из двух компонентов. Нами были упорядочены двойниковые текстуры пленок арсенида галлия на германии. Уже сообщалось [Чащинов Ю. Н., Мокиевский В. А.,

1966 г.], что на сфере, приготовленной из монокристалла германия, при кристаллизации из газовой фазы возникает двойник кристаллов GaAs с симметрией $m\bar{3}'m$. При упорядочении текстуры методом нанесения канавок нужно учитывать симметрию плоскости подложки, симметрию откосов (стенок) канавок, симметрию гребней (осей) канавок и, разумеется, симметрию плоскостей кристалла—слоя.

Для получения монокристаллического слоя следует выбирать такие плоскости подложки, которые по симметрии равны соответствующим плоскостям нарастающих кристаллов, т. е. в данном случае (Ge и GaAs) это будут $\{111\}$, $\{hhl\}$, $\{llh\}$ и $\{hkl\}$. На остальных плоскостях подложки при спонтанном зарождении кристаллов GaAs обязательно образование двойниковой текстуры, которую либо можно избежать, либо упорядочить. С целью предупреждения двойникового образования необходимо на поверхности подложки так нанести канавки, чтобы стенки последних были образованы плоскостями, равными по симметрии соответствующим плоскостям кристалла—слоя. При этом симметрия гребня канавки должна отвечать симметрии той грани кристалла—слоя, которая параллельна исходной грани подложки, или должна отвечать подгруппе этой грани кристалла—слоя. Исходная плоскость подложки должна быть по возможности исключена в ребрах между скатами канавок. Этим способом избежать появления двойниковой текстуры довольно трудно, но принципиально возможно.

Для получения монокристаллического слоя GaAs на поверхности (100) Ge следует направить оси канавок вдоль $[011]$ или $[0kl]$, тогда на стенках канавок обнажатся плоскости $\{hhl\}$ или $\{hkl\}$. Упорядочение двойниковой текстуры осуществляется надежнее и проще. На указанной плоскости (100) германиевой подложки нужно создать пересекающуюся под прямым углом систему канавок вдоль двух диагоналей этой грани или по косым направлениям относительно $[001]$. В первом случае двойниковая текстура будет обладать симметрией $P4mm$, а во втором — $P4$. Если оси канавок будут параллельны $[001]$, то на плоскостях скатов обнажатся поверхности $\{hko\}$ с симметрией m , что приведет к образованию двойниковой текстуры на плоскостях скатов канавок. Изменение симметрии двойниковой текстуры путем нанесения канавок вдоль различных направлений плоскости подложки ведет к изменению симметрии двойниковых границ, что может сказаться на некоторых свойствах текстур. Так, в разобранных примерах, если текстура имеет симметрию $P4mm$, то двойниковая граница, проходящая по грани куба, будет отвечать симметрии $mm'm$, а для двойниковой текстуры с симметрией $P4$ граница по $\{hko\}$ будет иметь только $\bar{1}$. Нанесением канавок на поверхности (110) германиевой подложки нельзя добиться получения условий для роста монокристаллического слоя GaAs, так как оси канавок, параллельные (110), всегда будут обладать двойной осью симметрии, которую плоскость ромбодекаэдра кристалла арсенида

галлия не имеет. Упорядочение двойниковой текстуры здесь осуществляется путем нанесения канавок вдоль длинной диагонали ромба. При этом вскрываются на стенках канавок плоскости $\{hhl\}$. Упорядоченная текстура, полученная таким способом, показана на рис. 80 и описана в работе Ю. Н. Чащинова и В. А. Мокиевского [1966 г.].

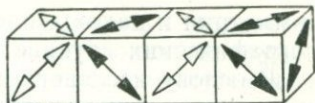


Рис. 80. Двойниковый стержень из кристаллов GaAs (класс $\bar{4}3m$) с симметрией $4_2' ma'/22'm'$, полученный на «текстурированной» грани (110) Ge из газовой фазы. Канавки на подложке наносились вдоль $[1\bar{1}0]$ (длинной диагонали ромба). Стрелками на модели двойникового стержня показана симметрия граней $\{100\}$ арсенида галлия.

Приведенные сведения по симметрии эпитаксиальных текстур можно использовать при исследованиях адсорбции и катализа на кристаллических поверхностях. Для этих целей необходимо учитывать 17 плоских групп симметрии дисконтинуума и точечные группы симметрии молекул.

Анализ эпитаксиальных текстур показал, что если двойниковая переориентировка вызвана эпитаксиальной двойниковой границей, состоящей из прослойки другой фазы, то часть операций симметрии двойниковых границ может быть «производной» и не будет отвечать истинной симметрии промежуточного слоя. Это обстоятельство вносит большие трудности и неопределенность в изучение структур двойниковых границ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данном разделе была рассмотрена кристаллография двойниковых образований.

В основу кристаллографического описания двойников были положены шубниковские двухцветные группы симметрии, применение которых для двойниковых сростаний носит условный характер. Для вывода всех групп симметрии двойников и законов двойникования были сформулированы основные определения: что такое двойник и что нужно понимать под законом двойникования. Из анализа шубниковских групп было найдено, что двойники можно по их симметрии разделить на жесткие и нежесткие. Это разделение позволило найти все точечные группы симметрии двойников для всех классов симметрии компонентов и дать конечное число законов двойникования, равное 231.

Для некоторых законов двойникования, описываемых группами $2'$, m' , $2'/m'$ и $2'mm'$, приведены все разновидности, отличающиеся друг от друга взаимной ориентировкой компонентов.

Для полисинтетических двойников выведены кристаллографические группы симметрии стержней, т. е. все возможные разновидности этих двойников.

Итогом изучения точечных групп симметрии двойников явилось обобщение этих групп для компонентов некристаллографической

симметрии и нахождение общих формул для двойников некристаллографических двухцветных групп для любых компонентов.

В основу исследования морфологии двойников были положены выведенные автором группы симметрии двойниковых границ, которые также подразделяются на жесткие и нежесткие. Кроме того, были найдены все группы симметрии границ наклона и кручения.

На основе 58 двухцветных групп были выведены все двухцветные гранные формы (305). Показан вывод двухцветных реберных форм на стереографические проекции и дан рецепт нахождения всех двухцветных разновидностей в различных классах антисимметрии. Вершинных двухцветных форм также 305.*

В работе приведен простой способ решения задачи: какие грани компонентов двойника будут образовывать те или иные простые формы в двойниковой группе симметрии, какая у них будет односторонняя симметрия в двойнике и какие они будут образовывать двойниковые границы.

Рассмотрение ориентировок компонентов во всех двойниковых законах дало возможность создать основу для проекта морфологической классификации двойников, в которой с особой отчетливостью показано различие между жесткими, полужесткими и мягкими двойниками.

С позиции симметрии двойниковых границ рассмотрена морфология двойников срастания, состоящих из двух компонентов, и полисинтетических двойников. Здесь показано, что отдельный компонент двойника претерпевает из-за двойниковой границы «деформацию» формы, в результате которой форма и симметрия компонента отличаются от формы и симметрии изолированного идеального кристалла.

В работе показано, что внутренняя морфология двойников складывается из внутренней морфологии компонентов и двойниковых границ, которые еще очень плохо изучены и вскрытие закономерностей распределения которых в двойниках прорастания встречает большие трудности. На примере двойников прорастания кальцита показан сложный с точки зрения кристаллографического описания характер этих границ.

Приведен новый способ изображения граней, ребер (в том числе и при входящих двугранных углах) и вершин двойников на гномостереографической проекции. Показано, что этот способ является способом изображения федоровских койлоэдров.

На минералогических примерах (пирит, кварц) показано, что все найденные теоретически законы двойникования и их разновидности для этих минералов встречаются в природе. Для кварца не обнаружены лишь двойники с симметрией $4'$ и $\bar{4}$.

В конце рассмотрены возможные причины образования двойников. Среди этих причин, как указывал А. Е. Ферсман, не последняя роль отводится эпитаксии. Поэтому в настоящем исследовании были рассмотрены группы симметрии эпитаксиальных

* Эти числа уточнены В. А. Мокиевским. См. примечание на с. 217.— *Ред.*

текстур на плоских подложках. Были выведены (совместно с Ю. М. Чашиновым) все односторонние и двусторонние группы симметрии этих текстур. Здесь же было показано, что путем специальной обработки подложек эти текстуры могут быть упорядочены. В случае упорядочения описание текстур осуществляется на основе плоских групп симметрии дисконтинуума и групп симметрии стержней. Высказано предположение о том, что при выращивании кристаллов возникновение двойников связано с образованием на поверхности кристалла двумерных посторонних фаз (например, окислов). Наши данные, полученные совместно с Р. Н. Эрлихом*, показали, что образование двойников и дефектов упаковки в автоэпитаксиальных слоях кремния после удаления окисных пленок в подложке практически прекращается.

Автор надеется, что дальнейшие исследования двойниковых образований значительно расширят область применения кристаллического материала. Многие, еще не известные свойства двойников и двойниковых границ могут оказаться полезными, так же как сейчас свойства однородных монокристаллов.

* Эти результаты опубликованы.— *Ред.*

НЕКОТОРЫЕ ЗАДАЧИ МОРФОЛОГИИ КРИСТАЛЛОВ

В настоящее время кристалломорфология постепенно превращается из науки описательной в науку о дефектах кристаллов (внутренняя морфология) и приобретает в связи с этим важное практическое значение при использовании как природных, так и искусственных кристаллов. Такое направление в развитии этой науки, сильно расширяющее круг ее задач, было заложено в работе Г. Г. Леммлейна о «Секториальном строении кристаллов» [1948 г.] и в небольшой заметке И. И. Шафрановского о ложных формах [57]. В самой общей формулировке основная задача морфологии кристаллов состоит в изучении внешних и внутренних границ на различных уровнях точности исследования. Главным методом при этом должен быть метод симметрии, при помощи которого совершается переход к формам, т. е. к моделированию изучаемых границ. Моделирование геометрическими фигурами в кристаллографии широко распространено и приносит огромную пользу (модели кристаллов, координационные полиэдры, различного рода индикатрисы и др.). Моделированы могут быть и дефекты кристаллов. В настоящей работе было показано, как от внешней морфологии при помощи стереографических проекций и цветной симметрии можно перейти к внутренней морфологии, т. е. к дефектам, которые связаны с внешней формой реального кристалла.

Несмотря на то что все дефекты кристаллов являются структурными, удобно условно разделить их на две группы: 1) дефекты, связанные с внешней формой кристалла (макродефекты), и 2) структурные дефекты (микродефекты). К первым относятся зоны роста, пирамиды роста и границы между ними, являющиеся следами перемещения ребер и вершин. К структурным дефектам относят точечные (вакансии, междуузлия и примесные атомы), линейные (дислокации), поверхностные (границы кристалла) и объемные (включения посторонней фазы). Дефекты, связанные с формой, являются макропроявлением скоплений структурных дефектов.

Остановимся на некоторых вопросах геометрического моделирования структурных дефектов. В кристаллографии выделяют следующие элементы структуры: узлы (точки), ряды (линии), плоские сетки (плоскости). Соответственно дефекты структуры могут

быть представлены как изъятие из структуры, внедрение в структуру, замещение, смещение (сдвиг) и поворот этих элементов или все возможные комбинации этих случаев.

Рассмотрим это только на примере дислокаций.* Полная краевая дислокация может быть представлена как изъятие или внедрение полуплоскости. Пусть толщина этой полуплоскости будет равна периоду повторяемости по направлению к ее нормали. Тогда легко найти все возможные случаи точечной симметрии краевой дислокации. Очевидно, что симметрия оси краевой дислокации должна отвечать симметрии края плоскости, т. е. симметрии ребра, которая описывается пятью случаями (см. рис. 2). Пусть, например, кристалл относится к классу $m\bar{3}m$, а введенная полуплоскость является (010). Край этой плоскости, параллельной оси дислокации, пусть будет отвечать [100]. Это направление на поверхности (001) имеет симметрию $2mm$ (рис. 1 и табл. 2). Это и будет группа симметрии оси дислокации. Если введена та же полуплоскость, но край ее отвечает направлению $[101]$, то это значит, что ось дислокации лежит в плоскости (101), в которой симметрия указанного направления будет также $2mm$. Если же край полуплоскости параллелен плоскости ($\bar{h}0l$), то симметрия оси дислокации будет m . Таким способом легко найти все случаи симметрии краевых дислокаций в любом классе симметрии. Для этого нужно знать символ введенной полуплоскости и символ направления, параллельного краю этой полуплоскости, и симметрию этого направления в плоскости, перпендикулярной к введенной полуплоскости. Все это можно обнаружить из рис. 1 и табл. 2. Зная класс симметрии кристалла, легко найти все группы симметрии краевых дислокаций.** Если класс симметрии имеет подгруппу $2mm$, то возможны все пять случаев симметрии дислокаций: $2mm$, 2 , m , $\perp m$ и 1 .

Формы дислокаций могут быть описаны простыми формами, возможными в группе $2mm$ и ее подгруппах. Но поскольку краевая дислокация является как бы линейным дефектом, то удобнее ее модель представить в виде стрелки, изображение которой находится из рис. 2. Такие морфологические модели очень удобны тем, что дают возможность представить особенности движения дислокации при приложении скальвающих напряжений, нормальных к оси дислокации. Если краевая дислокация имеет симметрию $2mm$ (рис. 2), то в результате приложении скальвающего напряжения, нормального к оси дислокации, в двух противоположных направлениях приведет к одному и тому же результату. Такие

* Незадолго до смерти В. А. Мокиевским были получены новые результаты, касающиеся точечных дефектов. Самой важной работой на эту тему является, по-видимому, статья «Вывод и систематика точечных дефектов структуры кристаллов» [1976 г.] (см. прил. 4—6).— *Ред.*

** В. А. Мокиевским с сотрудниками было выполнено несколько работ по экспериментальному изучению дислокаций различного типа (см., в частности, прил. 6).— *Ред.*

дислокации будут двигаться как индейская лодка каное. Скольжение будет двусторонним (неполярным). Если же ось дислокации имеет только перпендикулярную к ней плоскость симметрии, то ее движение в двух противоположных направлениях будет полярным (односторонним), как, например, движение лодки с тупой кормой. Если же перпендикулярно к оси дислокации проходит только ось симметрии 2, то движение в обе стороны будет неполярным, но возможно кручение (поворот оси дислокации в плоскости скольжения, т. е. смена полуплоскости). Это кручение будет односторонним (полярным). В табл. 37 показаны особенно-

ТАБЛИЦА 37

Характер движения дислокаций

Симметрия дислокации	Характер движения
$2m$	Неполярное скольжение Неполярное скольжение и полярное кручение
2	
$\perp m$	Полярное скольжение Неполярное скольжение и неполярное кручение
$\parallel m$	
1	Полярное скольжение и полярное кручение

сти движения краевых дислокаций под влиянием скальвающего напряжения, приложенного нормально к оси дислокации в плоскости скольжения [Мокневский В. А., 1968 г.]. Необходимо отметить, что выделенные случаи неполярного и полярного движения дислокаций точно совпадают с условиями полярного (одностороннего) и неполярного (двустороннего) скольжения, найденными М. Бургером [77] из других, но тоже симметричных соображений. Винтовая дислокация может обладать только двумя группами симметрии: 2 и 1, причем 2 должна лежать в плоскости сдвига и быть нормальной к оси дислокации (вектору Бюргерса).

Отмеченные выше (с. 199) полярное и неполярное кручение и результат кручения после релаксации также могут быть представлены моделями из стрелок.

Мы остановились только на частном примере морфологического моделирования дислокаций. Остальные дефекты структуры тоже могут быть наглядно показаны соответствующими моделями.

Вторая задача морфологии — это вопрос об управлении дефектами во время выращивания кристаллов. Эта задача сложная, но решение ее необходимо для практики. Здесь имеется один почти совершенно открытый вопрос о наследовании дефектов из затравки. При выращивании кристаллов экспериментаторы должны учитывать возможность управления ростом путем придания затравкам определенной формы. Аналогично живой природе кристалл наследует часть дефектов из затравки, другую часть при-

обретает и исключает при регенерации, а третью — получает и исключает уже при росте. Вопрос этот очень важен. Большое значение в связи с различием процесса регенерации на разных плоскостях имеет форма затравочного кристалла. От нее зависит, например, форма выращиваемого кристалла. Мы уже говорили о том, что свободная от свилеподобных дефектов область кристаллов KDP может быть увеличена при выращивании из пластин, вырезанных параллельно $\{101\}$.

Винтовые дислокации возникают, как это было показано еще Г. Г. Леммлейном, при стыке ветвей дендритов. При регенерации затравок такой стык осуществляется в замутненных областях при консервации включений маточной среды. Возникают дислокации, направление осей которых в значительной степени зависит от формы затравки и особенностей ее регенерации. Поэтому при выращивании бездислокационных кристаллов или кристаллов с заданным распределением и плотностью дислокаций форма затравки играет далеко не последнюю роль.

Поэтому, на наш взгляд, одной из важнейших задач морфологии кристаллов является исследование связи между формой затравок и распределением плотности дефектов при регенерации.

Третья задача морфологии — исследование причин образования ростовых двойников и закономерностей распределения двойниковых границ при выращивании кристаллов. При выращивании многих технически важных кристаллов (например, In As) двойникование является бичом производства. Когда не удается полностью избавиться от двойников, желательно увеличение монокристалльных областей. Для этого нужно уметь управлять двойниковыми границами. А этот вопрос, к сожалению, остается полностью открытым. Его решение является неотложной задачей. Если же, наоборот, sdвойникованные определенным образом кристаллы требуются технике, то вопрос об управлении двойниковыми границами приобретет еще большую важность.

Наконец, четвертая задача заключается в разработке внешней и внутренней морфологии деформированных кристаллов. Эта область, почти совершенно не затронутая морфологами, представляется интересной и практически важной. Для пластически деформированных кристаллов хлористого натрия и фтористого лития автором настоящей работы совместно с И. И. Афанасьевым [Мокриевский В. А., Афанасьев И. И., 1968 г.; Афанасьев И. И., Мокриевский В. А., 1966 г.] был осуществлен симметричный и морфологический анализ. Однако результаты этих работ являются, по сути дела, только началом исследований в указанной области.

Автор работы, будучи педагогом, не может отказаться от того, чтобы не сформулировать некоторые задачи для студенческого практикума, которые в настоящее время не применяются при преподавании кристаллографии, но могут быть полезными.

1. Изобразить в аксонометрической проекции куб класса G и его черно-белые аналоги при помощи стрелок, нанесенных на гранях или ребрах.

2. Изобразить на гномостереографической проекции грани, ребра и вершины тетрагон-триоктаэдра и его двухцветных разновидностей.

3. Найти симметрию всех направлений в кристалле класса G .

4. Вывести на стереографической проекции все реберные формы, возможные в классе G .

5. Найти все вершины и ребра и их симметрию при пересечении двух дидодекаэдров с заданными сферическими координатами и построить стереографические проекции пирамид роста.

6. Изобразить на стереографической проекции октаэдронд и кубонд.

7. Вывести группы симметрии двойников для класса симметрии компонента G и определить, какие из двойников будут жесткими и какие нежесткими.

8. Найти группы симметрии стержней (полисинтетических двойников) для заданной группы симметрии двойника G' .

9. Найти все черно-белые разновидности гексагональной дипирамиды и показать число цветов для граней каждой разновидности.

10. Определить точечную симметрию плоской границы по октаэдру для шпинелевого двойника из компонентов классов 432 и $m\bar{3}m$.

11. Построить гномостереографическую проекцию ребер при входящих двугранных углах двух октаэдров, находящихся в двойниковой ориентировке по шпинелевому закону.

12. Найти на стереографической проекции возможные оси поворотов мягких двойников для класса симметрии компонентов mmm .

13. Вывести все двухцветные разновидности реберных форм на гномостереографической проекции для всех черно-белых аналогов класса mmm .

14. Найти возможные односторонние группы симметрии эпитаксиальной текстуры при нарастании кристаллов гранями с симметрией 3 на плоскость подложки с симметрией 1 .

1. ТАБЛИЦЫ РЕБЕРНЫХ ФОРМ

В табл. 38—41 приводится полное описание простых реберных форм, возможных во всех кристаллографических классах симметрии. В столбце А таблиц указан номер реберного пучка, из которого данная форма выводится. Нумерация пучков соответствует приведенной на с. 35 и в табл. 3. Поскольку для вывода всех реберных форм было достаточно только четырех классов симметрии, а именно mmm , $6/mmm$, $4/mmm$ и $m\bar{3}m$, то были использованы реберные пучки № 1—11, 14—16, 18, 20—22, встречающиеся в этих классах.

В столбце Б таблиц указан порядковый номер простой реберной формы. Разновидности реберных форм отмечены добавлением к порядковому номеру букв а, б, ... Выделение разновидностей осуществлялось на основе критериев, описанных на с. 40. Сущность разновидностей уясняется из двух последних столбцов таблиц. Разновидность должна иметь число ребер, равное числу ребер основной формы, и класс симметрии разновидности должен быть одним из классов симметрии, в котором встречается основная форма. Так, например, шесть ребер ромбоэдра, пересекающих ось $[0001]$, образуют основную форму, встречающуюся в классах $\bar{3}m$, 32 и $\bar{3}$. Шесть же других ребер ромбоэдра, принадлежащих к тому же пучку № 12 (в табл. 39 № 10), образуют разновидность этой основной формы, которая возможна только в двух (из трех перечисленных) классах симметрии — $\bar{3}m$ и $\bar{3}$. В классе 32 эти ребра ромбоэдра дают две формы, каждая из которых состоит только из трех ребер. Для реберных форм кристаллов нижней категории разновидности отмечены в столбце Г номерами форм по В. И. Михееву и И. И. Шафрановскому (рис. 4).

В столбце В таблиц указано число ребер, входящих в данную форму.

Столбец Г таблиц содержит только некоторые символы граней, пересечение которых образует данную реберную форму. Построив гномостереографическую проекцию пучка, легко найти все символы граней, образующих данную реберную форму. Для реберных форм кристаллов нижней категории столбец Г имеет другое содержание. В нем отмечены параллельность или непараллельность ребер, название и номера формы по В. И. Михееву и И. И. Шафрановскому (рис. 4).

В столбце Д таблиц указаны классы симметрии, в которых данная форма может встречаться. Сразу за классом симметрии в скобках записана симметрия одного ребра. Для кристаллов нижней категории указаны еще некоторые символы граней в данном классе, которые образуют эту форму.

Характеристика реберной формы может быть более простой и понятной, чем та, которую давали В. И. Михеев, И. И. Шафрановский и С. И. Генделев. Мы предлагаем указывать на первом месте номер, а еще лучше, просто название пучка, на втором месте — число ребер, на третьем — символы пересекающихся граней и на четвертом — класс симметрии и симметрию ребра в скобках. Такие обозначения более громоздки, но легко читаемы и позволяют быстро с помощью гномостереографической проекции составить представление о реберной форме. Никаких рисунков и аксонометрических проекций для представления формы при этом не нужно. Шесть ребер ромбоэдра в классе $\bar{3}m$ могут быть описаны так: ромбоэдрический пучок (№ 12), 6, $(h\bar{0}hl) : (0h\bar{h}l)$, $\bar{3}m(m)$. При указании конкретных символов граней достаточно отмечать только число ребер, класс симметрии (если он до этого не указывался) и симметрию ребра (если в этом есть необходимость).

В конце табл. 41 приведены реберные формы для особых пучков, перпендикулярных к осям 3 и $\bar{3}$ кубических кристаллов. Эти формы могут иметь важное значение при описании некоторых особенностей кристаллов, вытягиваемых из расплава вдоль указанных осей симметрии.

Таким образом, приводимые таблицы содержат описание всех простых реберных форм кристаллов и их разновидностей (как по расположению ребер в пространстве, так и по симметрии отдельного ребра).

Реберные формы кристаллов низшей категории

Номер пучка	№ п/п	Число ребер	Описание формы, номер и название по В. И. Михееву и И. И. Шаfranовскому	Класс симметрии, симметрия ребра и символы граней, образующих данное ребро
А	Б	В	Г	Д
1	1	1	1, монореберник	$1 (1) (hkl) : (h'k'l')$, $2 (2) (hkl) : (\bar{h}kl)$, $m (m) (hkl) : (\bar{h}kl)$, $m (\perp m) (h0l) : (h'0l')$, $2mm (2mm) (h0l) : (\bar{h}0l)$
	2	2	2, параллельны (парареберник)	$\bar{1} (1) (hkl) : (h'k'l')$, $2 (1) (h0l) : (h'0l')$, $m (1) (hkl) : (h'k'l')$, $2/m (2) (hkl) : (\bar{h}kl)$, $2/m (\perp m) (h0l) : (h'0l')$, $222 (2) (hkl) : (\bar{h}kl)$, $2mm (m) (hk0) : (\bar{h}\bar{k}0)$, $2mm (\perp m) (h0l) : (h'0l')$, $mmm (2mm) (hk0) : (\bar{h}\bar{k}0)$
	3	4	7, параллельны (призменный ромбический)	$2/m (1) (hkl) : (h'k'l')$, $222 (1) (hk0) : (h'k'0)$, $2mm (1) (hk0) : (h'k'0')$, $mmm (\perp m) (hk0) : (h'k'0)$
2	4	8	15, параллельны по четыре ребра (параромб)	$mmm (1) (hkl) : (\bar{h}kl')$ или $(hkl) : (001)$ или $(hk0) : (001)$
	5	4	5, 6, 8, 11, параллельны (ромб)	$mmm (m) (hk\bar{l})$, $222 (1) (hkl) : (\bar{h}kl)$ или $(hkl) : (\bar{h}kl')$, $2mm (1) (hkl) : (\bar{h}kl')$, $2/m (1) (hkl) : (h'k'l')$
	6	4	9, параллельны (парадиреберник)	$2mm (1) (0kl) : (100)$ или $(hkl) : (\bar{h}k'l)$
	7	2	3, 4, непараллельны (диреберник)	$222 (2) (hkl) : (\bar{h}\bar{k}\bar{l})$, $2mm (m) (hkl) : (\bar{h}kl)$, $2 (1) (hkl) : (h'k'l')$, $m (1) (hkl) : (h'k'l')$
3	8	8	16, 17, 18, попарно параллельны (дипирамидальный ромбический)	$mmm (1) (hkl) : (h'k'l')$ или $(hkl) : (h0l)$
	9	4	10, непараллельны (скрещенник диререберный)	$222 (1) (hkl) : (h'k'l')$ или $(hkl) : (h0l)$
	10	4	12, 13, 14, непараллельны (пирамидальный ромбический)	$2mm (1) (hkl) : (h'k'l')$ или $(hkl) (h0l)$

Реберные формы тригональных и гексагональных кристаллов

Номер пучка	№ п/п	Число ребер	Символы граней, образующих данную форму	Классы симметрии и симметрия ребра
			Г	Д
1	11	6	$(10\bar{1}0) : (0\bar{1}10)$ $(11\bar{2}0) : (2\bar{1}10)$	$6/mmm (2mm)$, $622 (2)$, $6mm (m)$, $6/m (\perp m)$, $6 (1)$, $\bar{6}2m (\perp m)$, $\bar{3}m (m)$, $\bar{3}m (2)$, $32 (1)$, $3m (1)$, $\bar{3} (1)$
	11a	6	$(10\bar{1}0) : (11\bar{2}0)$	$62m (\perp m)$, $32 (1)$, $3m (1)$
	12	12	$(10\bar{1}0) : (11\bar{2}0)$	$6/mmm (\perp m)$, $622 (1)$, $6mm (1)$, $\bar{3}m (1)$
	13	3	$(2\bar{1}10) : (11\bar{2}0)$	$\bar{6} (\perp m)$, $\bar{6}2m (2mm)$; $32 (2)$, $3m (m)$
8	14	12	$(10\bar{1}0) : (0001)$	$6/mmm (\perp m)$, $622 (1)$, $6/m (1)$, $\bar{6}2m (1)$, $\bar{3}m (1)$
	15	6	$(10\bar{1}1) : (10\bar{1}\bar{1})$	$6/mmm (2mm)$, $622 (2)$, $6mm (\perp m)$, $6/m (m)$ $6 (1)$, $\bar{6}2m (m)$, $\bar{3}m (m)$, $\bar{3}m (2)$, $32 (1)$, $\bar{3} (1)$
	15a	6	$(0001) : (10\bar{1}0)$	$\bar{3}m (\perp m)$, $32 (1)$, $\bar{3} (1)$
	16	6	$(11\bar{2}0) : (0001)$	$\bar{6} (1)$, $\bar{6}2m (\perp m)$, $3 (1)$
	17	3	$(11\bar{2}1) : (11\bar{2}\bar{1})$	$\bar{6} (m)$, $\bar{6}2m (2mm)$, $32 (2)$, $3m (\perp m)$, $3 (1)$
	9	18	24	$(hk\bar{i}0) : (0001)$
19		12	$(hk\bar{i}l) : (hk\bar{i}\bar{l})$	$6mmm (1)$, $622 (1)$, $6mm (1)$, $\bar{3}m (1)$
19a		12	$(hk\bar{i}l) : (hk\bar{i}l')$	$622 (1)$
19b		12	$(hk\bar{i}l) : (hk\bar{i}l')$	$\bar{3}m (1)$
20		12	$(hk\bar{i}l) : (0001)$	$\bar{6}2m (1)$
21		6	$(hk\bar{i}l) : (hk\bar{i}\bar{l})$	$\bar{6}2m (1)$, $32 (1)$, $3m (1)$
21a		6	$(hk\bar{i}l) : (hk\bar{i}l')$	$32 (1)$
10		22	24	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$ $(10\bar{1}0) : (11\bar{2}1)$
	23	12	$(10\bar{1}1) : (0\bar{1}11)$ $(2\bar{1}11) : (11\bar{2}1)$	$6/mmm (m)$, $622 (1)$, $6/m (1)$, $\bar{6}2m (1)$, $\bar{3}m (1)$
	23a	12	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$ $(10\bar{1}0) : (11\bar{2}1)$	$622 (1)$

Номер пучка	№ п/п	Число ребер	Символы граней, образующих данную форму	Классы симметрии и симметрия ребра
			Г	Д
А	Б	В		
	23б	12	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$ $(10\bar{1}0) : (11\bar{2}1)$	$6/m (1)$
	23в	12	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$	$\bar{3}m (1)$
	23г	12	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$	$\bar{6}2m (1)$
	24	12	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$ $(10\bar{1}0) : (11\bar{2}1)$	$6mm (1)$
	25	6	$(10\bar{1}1) : (01\bar{1}1)$ $(2\bar{1}\bar{1}1) : (11\bar{2}1)$	$6mm (m), 6 (1), 3m (1)$
	25а	6	$(hk\bar{i}l) : (hk\bar{i}\bar{l})$	$622 (2), 6 (1)$
	26	6	$(10\bar{1}1) : (01\bar{1}1)$ $(11\bar{2}1) : (2\bar{1}\bar{1}1)$	$\bar{6}2m (m), 32 (1), \bar{6} (1)$
	26а	6	$(10\bar{1}0) : (11\bar{2}1)$	$32 (1)$
10	26б	6	$(11\bar{2}0) : (10\bar{1}1)$	$\bar{6} (1)$
	27	6	$(10\bar{1}1) : (01\bar{1}1)$	$\bar{3}m (m), 32 (1), \bar{3} (1)$
	27а	6	$(10\bar{1}1) : (1\bar{1}0\bar{1})$	$\bar{3}m (2), \bar{3} (1)$
	27б	6	$(2\bar{1}\bar{1}0) : (10\bar{1}1)$	$32 (1)$
	28	3	$(11\bar{2}1) : (2\bar{1}\bar{1}1)$	$3m (m), 3 (1)$
	28а	3	$(10\bar{1}1) : (1\bar{1}0\bar{1})$	$32 (2), 3 (1)$
11	29	24	$(11\bar{2}1) : (hk\bar{i}l)$ $(10\bar{1}1) : (hk\bar{i}l)$ $(hk\bar{i}0) : (h'k'i'l')$	$6/mmm (1)$
	30	12	То же	$622 (1)$
	31	12	”	$6mm (1)$
	32	12	”	$\bar{6}2m (1)$
	33	12	”	$\bar{3}m (1)$
	34	6	”	$32 (1)$
	35	6	”	$3m (1)$

Реберные формы тетрагональных кристаллов

А	Б	В	Г	Д
1	36	4	(100):(010)	$4/mmm (2mm)$, $422 (2)$, $4mm (m)$, $4/m (\perp m)$, $4 (1)$, $\bar{4} (1)$, $\bar{4}2m (2)$, $\bar{4}2m (m)$
	37	8	(100):(110)	$4/mmm (\perp m)$, $422 (1)$, $4mm (1)$, $\bar{4}2m (1)$
4	38	8	(100):(001)	$4/mmm (\perp m)$, $422 (1)$, $4/m (1)$, $\bar{4}2m (1)$
	39	4	(101):(10 $\bar{1}$) (111):(11 $\bar{1}$)	$4/mmm (2mm)$, $422 (2)$, $4mm (\perp m)$, $4/m (m)$ $4 (1)$, $\bar{4} (1)$, $\bar{4}2m (2)$, $\bar{4}2m (\perp m)$
	39a	4	(110):(001)	$\bar{4} (1)$, $\bar{4}2m (\perp m)$
	40	2	(111):($\bar{1}\bar{1}1$)	$\bar{4} (2)$, $\bar{4}2m (2mm)$
5	41	16	($hk0$):(001)	$4/mmm (1)$
	42	8	(hkl):($hk\bar{l}$)	$4/mmm (m)$, $422 (1)$, $4mm (1)$, $\bar{4}2m (1)$
	42a	8	($hk0$):(001)	$422 (1)$
	42б	8	($hk0$):(001)	$\bar{4}2m (1)$
6	43	16	(101):(111)	$4/mmm (1)$
	44	8	(101):(011) (111):($\bar{1}11$)	$4/mmm (m)$, $422 (1)$, $4/m (1)$, $\bar{4}2m (1)$
	44a	8	(101):(111)	$422 (1)$
	44б	8	То же	$4/m (1)$
	44в	8	„	$\bar{4}2m (1)$
	45	8	(101):(112)	$\bar{4}2m (1)$
	46	4	(111):($\bar{1}\bar{1}1$)	$4mm (m)$, $4 (1)$
	46a	4	(hkl):($hk\bar{l}$)	$422 (2)$, $4 (1)$
	47	8	(100):(111)	$4mm (1)$
	48	4	(101):(011)	$\bar{4} (1)$, $\bar{4}2m (m)$
7	49	16	(111):($hk0$)	$4/mmm (1)$
	50	8	То же	$422 (1)$
	51	8	„	$4mm (1)$
	52	8	„	$\bar{4}2m (1)$

Реберные формы кубических кристаллов

А	Б	В	Г	Д
14	53	24	(100) : (h0l)	$m\bar{3}m (\perp m)$, 432 (1), $\bar{4}3m$ (1)
	54	12	(100) : (001)	$m\bar{3}m (2mm)$, 432 (2), $\bar{4}3m (m)$, $m\bar{3} (\perp m)$, 23 (1)
	54a	12	(100) : (h0l)	$m\bar{3} (m)$, 23 (1)
	55	6	(h0l) : ($\bar{h}0l$)	$m\bar{3} (2mm)$, 23 (2)
	15	56	48	(110) : (211)
57		24	(110) : (101)	$m\bar{3}m (m)$, 432 (1), $m3$ (1)
57a		24	(110) : (211)	432 (1)
57б		24	(110) : (211)	$m3$ (1)
58		24	(110) : (211)	$\bar{4}3m$ (1)
59		12	(110) : (011)	$\bar{4}3m (m)$, 23 (1)
59a		12	(110) : (211)	23 (1)
16	60	12	(111) : ($\bar{1}\bar{1}1$)	$m\bar{3}m (2mm)$, 432 (2), $\bar{4}3m (\perp m)$, $m3 (m)$, 23 (1)
	60a	12	(111) : (100)	$\bar{4}3m (\perp m)$, 23 (1)
	61	24	(100) : (111) (111) : (011)	$m\bar{3}m (\perp m)$, 432 (1), $m3$ (1)
	62	6	(111) : ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	$\bar{4}3m (2mm)$, 23 (2)
18	63	48	(hkl) : (100) (hk0) : (hkl)	$m\bar{3}m$ (1)
	62	24	(hkl) : ($\bar{h}kl$)	$m\bar{3}m (\perp m)$, 432 (1), $\bar{4}3m$ (1)
	64a	24	(hkl) : (100)	432 (1)
	64б	24	(hkl) : (100)	$\bar{4}3m$ (1)
	65	12	(hkl) : ($\bar{h}kl$)	$m\bar{3} (m)$, 23 (1)
	65б	12	(100) : (hkl)	23 (1)
	66	24	(100) : (hkl)	$m\bar{3}$ (1)
	67	6	(hkl) : ($\bar{h}\bar{k}l$)	23 (2)
20	68	48	(hkl) : (h'k'0)	$m\bar{3}m$ (1)
	69	24	(h0l) : (0hl)	$m\bar{3}m (m)$, 432 (1), $m\bar{3}$ (1)
	69a	24	(hkl) : (h'k'0)	432 (1)
	69б	24	(hkl) : (h'k'0)	$m\bar{3}$ (1)
	70	24	(hkl) : (h'k'0)	$\bar{4}3m$ (1)
	71	12	(h0l) : (0hl)	$\bar{4}3m (m)$, 23 (1)
	71a	12	(hkl) : (kh \bar{l})	432 (2), 23 (1)
	71б	12	(hkl) : (h'k'0)	23 (1)

А	Б	В	Г	Д
21	72	48	$(hkl): (110)$	$m\bar{3}m (1)$
	73	24	$(hll): (lhl)$	$m3m (m), 432 (1), m3 (1)$
	73а	24	$(hkl): (110)$	$\bar{4}32 (1)$
	73б	24	$(hkl): (110)$	$m\bar{3} (1)$
	74	12	$(hll): (lhl)$	$\bar{4}3m (m), 23 (1)$
	74а	12	$(hkl): (khl)$	$432 (2), 23 (1)$
	74б	12	$(hkl): (110)$	$23 (1)$
	75	24	$(hkl): (110)$	$\bar{4}3m (m)$
	22	76	48	$(hk0): (h'k'l)$
77		24	То же	$432 (1)$
78		24	"	$\bar{4}3m (1)$
79		24	"	$m\bar{3} (1)$
80		12	"	$23 (1)$

Реберные формы, производные особых пучков кубической сингонии

21а [112]	1	48	$(hkl): (111)$	$m\bar{3}m (1)$
	2	24	$(hkl): (111)$	$432 (1)$
	3	24	То же	$\bar{4}3m (1)$
	4	24	"	$m\bar{3} (1)$
	5	12	"	$23 (1)$
	5а	12	"	$432 (2), 23 (1)$
22а [hkl] $h + k = l$	1	48	"	$m\bar{3}m (1)$
	2	24	"	$432 (1)$
	3	24	"	$\bar{4}3m (1)$
	4	24	"	$m\bar{3} (1)$
	5	12	"	$23 (1)$

2. К ВЫВОДУ ВЕРШИН И РЕБЕР ПРИ ПЕРЕСЕЧЕНИИ ПРОСТЫХ ГРАННЫХ ФОРМ

Гномостереографическое проектирование всех элементов многогранника (граней, вершин и ребер) позволяет быстро решать задачи нахождения всех вершин и ребер при пересечении простых гранных форм в одном классе симметрии при любом их развитии. Громоздкость методов начертательной геометрии для решения таких задач не дает уверенности, что все варианты будут исчерпаны.

Число вариантов, как было показано на с. 41, зависит от того, как на гномостереографической проекции расположены проекции ребер. Рассмотрим возможные случаи расположения проекций ребер при пересечении граней двух форм.

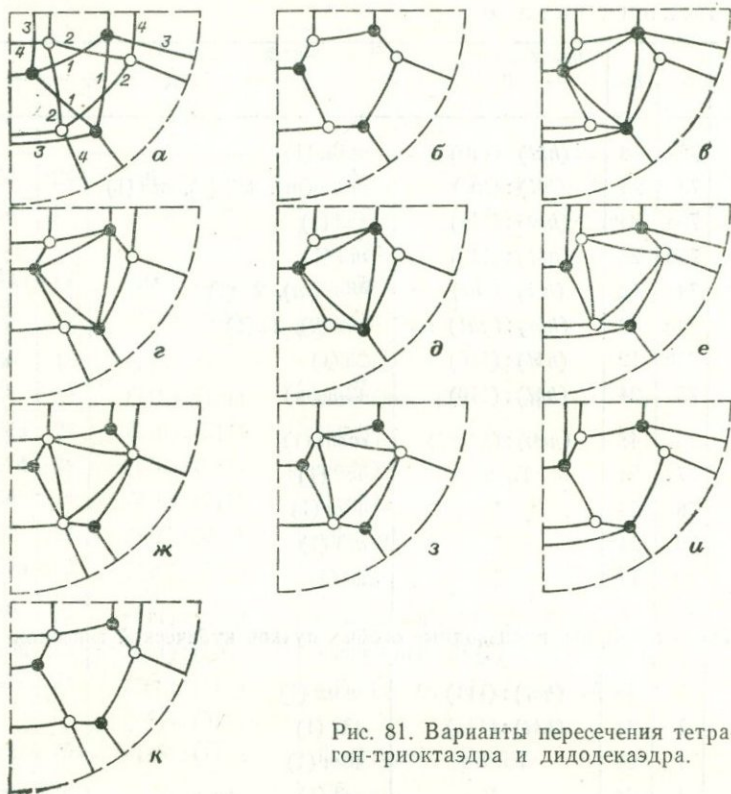


Рис. 81. Варианты пересечения тетрагон-триоктаэдра и дидодекаэдра.

Поскольку ребра на таких проекциях изображаются частями дуг, заключенных между двумя точками, возможны следующие случаи взаимного расположения этих дуг.

1. Дуги пересекаются в новых точках.

2. Дуги частично совпадают (гномостереографическая проекция ребра одной простой грани формы накладывается на такую же проекцию другой гранной формы, т. е. грани одной формы притупляют ребра другой формы или, что то же самое, ребра одной формы параллельны ребрам другой гранной формы).

3. Дуги не пересекаются в новых точках.

Эти варианты могут существовать каждый самостоятельно (1, 2 и 3) и давать комбинации (12), (13), (23) и (123) — всего семь случаев.

Случай (1) всегда дает три варианта, если пересекающиеся ребра принадлежат к одной реберной форме каждой из двух гранных форм, как это описано на с. 41 и показано на рис. 5. Если же пересекающиеся ребра принадлежат к разным простым реберным формам, то число вариантов возрастает и в этом случае находится при помощи возможных сочетаний. Пронумеруем (рис. 81, а) пересекающиеся ребра дидодекаэдра (черные кружки) нечетными цифрами 1 и 3, а тетрагон-триоктаэдра (белые кружки) четными — 2 и 4. При отсутствии ребра за номером будем ставить (-), а при наличии (+). Из элементарных соображений следует, что знаков (+) не может быть у всех пронумерованных и двух пересекающихся ребер. Тогда возможны следующие сочетания, показанные на рис. 81, б—к: б) 1(-) 2(-) 3(-) 4(-); в) 1(+) 2(-) 3(+) 4(-); г) 1(+) 2(-) 3(-) 4(+); д) 1(+) 2(-) 3(-) 4(-); е) 1(-) 2(+) 3(+) 4(-); ж) 1(-) 2(+) 3(-) 4(+); з) 1(-) 2(+) 3(-) 4(-); и) 1(-) 2(-) 3(+) 4(-); к) 1(-) 2(-) 3(-) 4(+) — всего девять случаев.

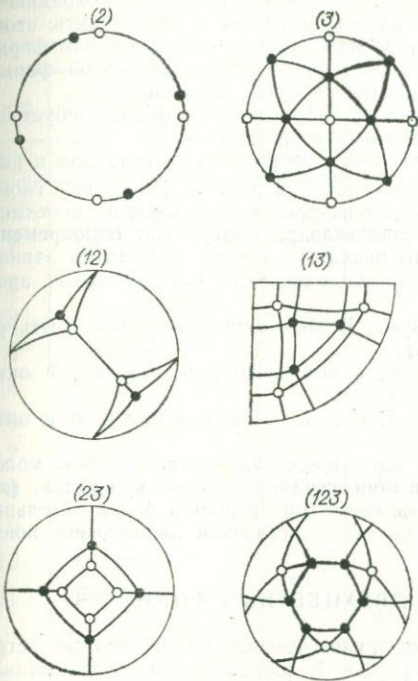


Рис. 82. Случаи взаимного расположения ребер двух пересекающихся простых гранных форм.

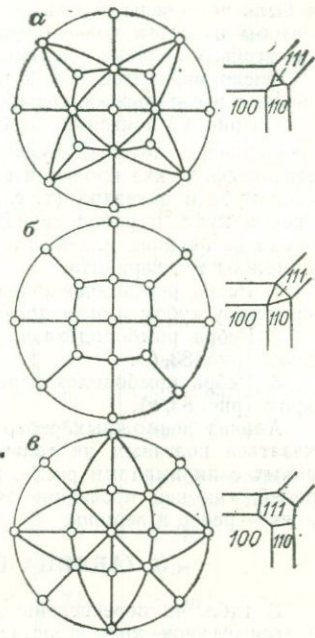


Рис. 83. Три случая пересечения куба, октаэдра и ромбододекаэдра.

Случай (2) изображен на рис. 82 в виде пересечения двух тетрагональных призм. Здесь возможен только один вариант.

Случай (3) реализуется, например, в комбинации куба и ромбододекаэдра (рис. 82). Здесь также возможен только один вариант.

Случай (12) показан на рис. 82 в виде пересечения двух тетрагональных тетраэдров. Поскольку часть ребер пересекается, опять возможны три варианта, описанные для случая (1).

Случай (13) может быть представлен в виде пересечения, например, двух тетрагон-триоктаэдров (рис. 82). Здесь также возможны три варианта.

Случай (23) показан на том же рисунке в виде пересечения двух тетрагональных дипирамид. Здесь, как и в случаях (2) и (3), возможен только один вариант.

В последнем случае (123), показанном на рис. 82 в виде пересечения ромбоэдра и скаленоэдра, возможны, как и для случая (1), три варианта.

Из рассмотренного следует, что число вариантов при пересечении двух гранных форм в одном классе симметрии может быть равно либо одному, либо трем и более. Если в записи случая пересечения стоит цифра 1, то возможно три и более вариантов, а если ее нет, то только один вариант. Поэтому иногда число вариантов легко определить и без проекций. Так, в случае пересечения куба и тетрагексаэдра (или пентагон-додекаэдра) легко обнаруживается, что часть ребер тетрагексаэдра параллельна ребрам куба, а другая часть ребер тетрагексаэдра (или пентагон-додекаэдра) при гномостереографическом проектировании не пересечет проекций ребер куба в новых точках, так как гномостереографические проекции граней тетрагексаэдра (или пентагон-додекаэдра) расположены на дугах зоны [100], что легко видно и без проекции ребер тетрагексаэдра. Поэтому это пересечение должно быть отнесено к случаю (23). Ребра,

гномостереографические проекции которых дают случай (3), всегда сохраняются на комбинациях двух простых форм. При разбиении сферы нужно следить, чтобы не были построены проекции новых ребер между гранями одной простой формы и чтобы в состав новых вершин не входило более двух граней одной формы, т. е. чтобы у простых граничных форм не появлялись новые вершины.

Число вариантов при комбинации трех и более простых форм требует отдельного исследования. Ограничимся только одним примером.

На рис. 83 показаны случаи пересечения трех форм — куба, октаэдра и ромбододекаэдра, которые возможны в классах $m\bar{3}$, 432 и $m\bar{3}m$. Поскольку гномостереографические проекции граней ромбододекаэдра расположены на проекциях ребер куба и октаэдра (т. е. грани ромбододекаэдра притупляются одновременно и ребра куба, и ребра октаэдра), то это значит, что число вариантов зависит только от наличия или отсутствия ребер ромбододекаэдра. Следовательно, здесь возможны три варианта.

1. Ребра ромбододекаэдра присутствуют. В этом случае не может быть ребер между кубом и октаэдром (рис. 83, а).

2. Ребра ромбододекаэдра отсутствуют, и нет ребер между кубом и октаэдром (рис. 83, б).

3. Ребра ромбододекаэдра отсутствуют, и есть ребра между кубом и октаэдром (рис. 83, в).

Анализ возможных ребер и вершин при пересечении граничных форм может оказаться полезным не только для описания неоднородностей кристалла, связанных с пирамидами роста, но и при исследовании скоростей роста отдельных граней, так как последние зависят от наличия источников зарождения новых слоев — ребер и вершин.

3. ТАБЛИЦА ГРАНЫХ ДВУХЦВЕТНЫХ ФОРМ

В табл. 42 перечислены двухцветные группы симметрии, в которых встречается та или иная простая гранная форма. В ряде случаев, когда одна и та же по названию простая форма имеет две или более неэквивалентных ориентировок относительно элементов симметрии двухцветной группы, дополнительно указываются символы этих форм в стандартной установке. Правые и левые формы не выделены. Их существование легко обнаруживается из записи двухцветной группы, так как они присутствуют во всех случаях, если одноцветная подгруппа разрешает энантиоморфизм (если эта подгруппа осевая). Операции m' и $\bar{1}'$ не исключают существования правых и левых форм. Так, например, обычный (одноцветный) диэдр может быть правым и левым только в классе 2, двухцветные же диэдры дают энантиоморфизм в классах $2'$, m' , $2m'm'$ и не энантиоморфны в классе $2'mm'$. Тригональный скаленоэдр в классе $\bar{3}m'$ также может быть правым и левым. Каждая отдельная грань простой двухцветной формы может быть двухцветной и одноцветной, что отмечено в скобках рядом с названием простой формы цифрами 1 и 2. Если указаны обе цифры, то это означает, что в некоторых классах грань одноцветная, а в других двухцветная. Табл. 42 дает перечисление двухцветных форм, аналогичных разновидностям простых форм по Г. Б. Бокию [8].

4. ВЫВОД И СИСТЕМАТИКА ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ *

Однородный и совершенный кристалл представляет собой как бы текстуру из слагающих его единиц (атомов, ионов, молекул), которая описывается (хотя и не полностью) федоровской группой. Нарушение этой текстуры (структуры) возможно и даже удобно рассматривать как вторичную текстуру из дефектов на основе матрицы, представляющей собой структуру совершенного кристалла. Создание кристаллов с определенной текстурой из дефектов даст возможность получать на старой основе (матрице) материалы с новыми физическими и химическими свойствами.

* См. статью В. А. Мокиевского [1976 г.].— *Ред.*

Перечень двухцветных форм

№ п/п	Название и группы симметрии	№ п/п	Название и группы симметрии	№ п/п	Название и группы симметрии
А	Б	А	Б	А	Б
	Моноэдры (2)	30	010 mmm'	62	$6'/mmm'$
1	$2'$	31	$\bar{4}'$	63	$6/m'm'm'$
2	m'	32	$4'22'$		Диэдры (1, 2)
3	$2m'm'$	33	$42'2'$	64	$2'$
4	$2'mm'$	34	$\bar{4}'2'm$	65	m'
5	$4'$	35	$\bar{4}2'm'$	66	$2m'm'$
6	$4'mm'$	36	$\bar{4}'2m'$	67	$h0l\ 2'mm'$
7	$4m'm'$	37	$4'/m$	68	$0kl\ 2'mm'$
8	$3m'$	38	$4/m'$		Ромбические призмы (1, 2)
9	$6'$	39	$4'/m'$		
10	$6'mm'$	40	$4'/mmm'$	69	$2'/m$
11	$6m'm'$	41	$4'/mm'm'$	70	$2/m'$
	Пинаконды (1, 2)	42	$4/m'mm$	71	$2'/m'$
12	$\bar{1}'$	43	$4/m'm'm'$	72	$hk0\ 22'2'$
13	$2'$	44	$4'/m'mm'$	73	$h0l\ 22'2'$
14	m'	45	$32'$	74	$2m'm'$
15	$\left\{ \begin{array}{l} 2'/m \\ 2/m' \\ 2'/m' \end{array} \right.$	46	$\bar{3}'$	75	$2'mm'$
16		47	$\bar{3}m'$	76	$hk0\ mm'm'$
17		48	$\bar{3}'m'$	77	$h0l\ mm'm'$
18	$\left\{ \begin{array}{l} 2'/m \\ 2/m' \\ 2'/m' \end{array} \right.$	49	$\bar{3}'m$	78	$m'm'm'$
19		50	$\bar{6}'$	79	$hk0\ mmm'$
20		51	$\bar{6}'2'm$	80	$h0l\ mmm'$
21	$100\ 22'2'$	52	$\bar{6}'2m'$		Ромбический тетраэдр (1)
22	$010\ 22'2'$	53	$\bar{6}2'm'$	81	$22'2'$
	001	54	$6'22'$		Ромбическая пирамида (1)
23	$2m'm'$	55	$62'2'$	82	$2m'm'$
24	$100\ 2'mm'$	56	$6'/m'$	83	$2'tm'$
25	$010\ 2'tm'$	57	$6/m'$		Ромбическая дипирамида (1)
26	$100\ mm'm'$	58	$6'/m$		
27	$010\ mm'm'$	59	$6'/m'mm'$	84	$mm'm'$
28	$m'm'm'$	60	$6'/mm'm'$		
29	$100\ mmm'$	61	$6'/m'mm$		

№ п/п		Название и группы симметрии	№ п/п		Название и группы симметрии	№ п/п		Название и группы симметрии
А	Б		А	Б		А	Б	
85		$m'm'm'$	114		$4m'm'$			Дитетрагональная пирамида (1)
86		mmm'			Тетрагональная дипирамида (1, 2)	143		$4'mm'$
		Тетрагональная призма	115		$h0l 4'22'$	144		$4m'm'$
87		$\bar{4}'$	116		$hhl 4'22'$			Дитетрагональная дипирамида (1)
88		$4'$	117		$42'2'$			
89	100	$4'mm'$	118		$\bar{4}'2'm$	145		$4'/mmm'$
90	110	$4'mm'$	119		$\bar{4}2'm'$	146		$4'/mm'm'$
91		$4m'm'$	120		$\bar{4}'2m'$	147		$4/m'mm$
92	100	$4'22'$	121		$4'/m$	148		$4/m'm'm'$
93	110	$4'22'$	122		$4/m'$	149		$4'/m'mm'$
94		$42'2'$	123		$4'/m'$			Тетрагональный тетраэдр (1, 2)
95	100	$\bar{4}'2'm$	124		$h0l 4'/mmm'$			
96	110	$\bar{4}'2'm$	125		$hhl 4'/mmm'$	150		$\bar{4}'$
97	100	$\bar{4}2'm'$	126		$4'/mm'm'$	151		$\bar{4}'2'm$
98	110	$\bar{4}2'm'$	127		$4'/m'mm$	152		$\bar{4}2'm'$
99	100	$\bar{4}'2m'$	128		$4'/m'm'm'$	153		$\bar{4}'2m'$
100	110	$\bar{4}'2m'$	129		$h0l 4'/m'mm'$			Тетрагональный трапецоэдр (1)
101		$4'/m$	130		$hhl 4'/m'mm'$			
102		$4/m'$			Дитетрагональная призма (1, 2)	154		$4'22'$
103		$4'/m'$				155		$42'2'$
104	100	$4'/mmm'$	131		$4'mm'$			Тетрагональный скаленоэдр (1)
105	110	$4'/mmm'$	132		$4m'm'$			
106		$4'/mm'm'$	133		$4'22'$			
107		$4'/m'mm$	134		$42'2'$	156		$\bar{4}'2'm$
108		$4'/m'm'm'$	135		$\bar{4}'2'm$	157		$\bar{4}2'm'$
109	100	$4'/m'mm'$	136		$\bar{4}2'm'$	158		$\bar{4}'2m'$
110	110	$4'/m'mm'$	137		$\bar{4}'2m'$			Тригональная призма (2)
		Тетрагональная пирамида (1, 2)	138		$4'/mmm'$			
			139		$4'/mm'm'$	159		$3m'$
111		$4'$	140		$4'/m'mm$	160		$32'$
112		$h0l 4'mm'$	141		$4'/m'm'm'$	161		$\bar{6}'$
113		$hhl 4'mm'$	142		$4'/mmm'$			

№ п/п	Название и группы симметрии	№ п/п	Название и группы симметрии	№ п/п	Название и группы симметрии
А	Б	А	Б	А	Б
162	$\bar{6}'2'm$		Дитригональная пирамида (1)	204	$6m'm'$
163	$\bar{6}'2m'$	182	$3m'$	205	$62'2'$
164	$\bar{6}2'm'$		Дитригональная дипирамида (1)	206	$10\bar{1}0\ 6'22'$
	Тригональная пирамида (2)	183	$\bar{6}'2'm$	207	$11\bar{2}0\ 6'22'$
165	$3m'$	184	$\bar{6}'2m'$	208	$6'/m'$
	Тригональная дипирамида (1, 2)	185	$\bar{6}2'm'$	209	$6/m'$
166	$32'$		Тригональный скаленоедр (1)	210	$6'/m$
167	$\bar{6}'$	186	$\bar{3}m'$	211	$10\bar{1}0\ 6'/m'mm'$
168	$\bar{6}'2'm$	187	$\bar{3}'m'$	212	$11\bar{2}0\ 6'/m'mm'$
169	$\bar{6}'2m'$	188	$\bar{3}'m$	213	$6/mm'm'$
170	$\bar{6}2'm'$		Гексагональная призма (1, 2)	214	$6/m'mm$
	Ромбоэдр (1, 2)	189	$3m'$	215	$10\bar{1}0\ 6'/mmm'$
171	$32'$	190	$32'$	216	$11\bar{2}0\ 6'/mmm'$
172	$\bar{3}'$	191	$\bar{3}'$	217	$6/m'm'm'$
173	$\bar{3}m'$	192	$10\bar{1}0\ \bar{3}'m$		Гексагональная пирамида (1, 2)
174	$\bar{3}'m'$	193	$11\bar{2}0\ \bar{3}'m$	218	$3m'$
175	$\bar{3}'m$	194	$10\bar{1}0\ \bar{3}m'$	219	$6'$
	Тригональный трапецоэдр (1)	195	$11\bar{2}0\ \bar{3}m$	220	$h\bar{h}2hl\ 6'mm'$
176	$32'$	196	$10\bar{1}0\ \bar{3}'m'$	221	$h0\bar{h}l\ 6'mm'$
	Дитригональная призма (1, 2)	197	$11\bar{2}0\ \bar{3}'m'$	222	$6m'm'$
177	$3m'$	198	$\bar{6}'2'm$		Гексагональная дипирамида (1, 2)
178	$32'$	199	$\bar{6}'2m'$	223	$\bar{3}m'$
179	$\bar{6}'2'm$	200	$\bar{6}2'm'$	224	$\bar{3}'m'$
180	$\bar{6}'2m'$	201	$6'$	225	$\bar{3}'m$
181	$\bar{6}2'm'$	202	$10\bar{1}0\ 6'mm'$	226	$\bar{6}'2'm$
		203	$11\bar{2}0\ 6'mm'$	227	$\bar{6}'2m'$

№ п/п	Название и группы симметрии	№ п/п	Название и группы симметрии	№ п/п	Название и группы симметрии
А	Б	А	Б	А	Б
228	$\bar{6}2' m'$		Дигексагональная	281	$m'\bar{3}'m$
229	$h0\bar{h}l$ $6'22'$		дипирамида (1)	282	$m'\bar{3}'m'$
230	$hh\bar{2}hl$ $6'22'$	258	$6'/m'mm'$		Тригон-три-
231	$62'2'$	259	$6/mm'm'$		октаэдр (1, 2)
232	$6'/m'$	260	$6'/m'mm$	283	$m'\bar{3}'$
233	$6/m'$	261	$6'/mmm'$	284	$4'32'$
234	$6'/m$	262	$6'/m'm'm'$	285	$m\bar{3}m'$
235	$h0\bar{h}l$ $6'/m'mm'$		Кубический	286	$m'\bar{3}'m$
236	$hh\bar{2}hl$ $6'/m'mm'$		тетраэдр (2)	288	$m'\bar{3}'m'$
237	$6/mm'm'm'$	263	$\bar{4}'3m'$		Тетрагон-три-
238	$6'/m'mm$		Тригон-трите-		октаэдр (1, 2)
239	$h0\bar{h}l$ $6'/mmm'$		раэдр (2)	289	$m'\bar{3}'$
240	$hh\bar{2}hl$ $6'/mmm'$	264	$\bar{4}'3m'$	290	$4'32'$
241	$6'/m'm'm'$		Тетрагон-трите-	291	$m\bar{3}m'$
	Гексагональный	265	раэдр (2)	292	$m'\bar{3}'m$
	трапецоэдр (1)		$\bar{4}'3m'$	293	$m'\bar{3}'m'$
242	$6'22'$		Гексатетраэдр (1)		Пентагон-
243	$62'2'$	266	$\bar{4}'3m'$	294	триоктаэдр (1)
	Дигексагональная		Куб (2)		$4'32'$
	призма (1, 2)	267	$m'\bar{3}'$		Гексоктаэдр (1)
244	$\bar{3}m'$	268	$\bar{4}'3m'$	295	$m\bar{3}m'$
245	$\bar{3}'m'$	269	$4'32'$	296	$m'\bar{3}'m$
246	$\bar{3}'m$	270	$m\bar{3}m'$	297	$m'\bar{3}'m'$
247	$6m'm'$	271	$m'\bar{3}m$		Ромбододекаэдр
248	$6'mm'$	272	$m'\bar{3}'m'$		(2)
249	$62'2'$		Тетрагексаэдр	298	$m'\bar{3}'$
250	$6'22'$		(1, 2)	299	$\bar{4}'3m'$
251	$6'/m'mm'$	273	$\bar{4}3m$	300	$4'32'$
252	$6/mm'm'm'$	274	432	301	$m\bar{3}'m'$
253	$6'/m'mm$	275	$m\bar{3}m'$	302	$m'\bar{3}'m$
254	$6'/mmm'$	276	$m'\bar{3}'m$	303	$m'\bar{3}'m'$
255	$6'/m'm'm'$	277	$m'\bar{3}'m'$		Пентагон-
	Дигексагональная		Октаэдр (1, 2)		додекаэдр (2)
	пирамида (1)	278	$m'\bar{3}'$	304	$m'\bar{3}'$
256	$6m'm'$	279	$\bar{4}'32'$		Дидодекаэдр (1)
257	$6'mm'$	280	$m\bar{3}m'$	305	$m'\bar{3}'$

Под дефектом кристалла будем понимать любое нарушение его симметрии. Такое определение дефекта охватывает нарушения внешней формы кристалла, его внутреннюю морфологию (или анатомию, как это сейчас модно называть) и искажения структуры на атомном уровне. Все дефекты кристаллов в принципе являются структурными. Внешняя форма, если она является поверхностью роста, в той или иной степени определяет скопление и распределение структурных дефектов, которые могут проявиться на макроскопическом уровне в виде различных геометрических образов (пирамиды роста, следы перемещения ребер и вершин и др.). Поскольку любая ростовая поверхность кристалла содержит неэквивалентные по симметрии элементы, то образование кристалла всегда сопровождается возникновением в нем дефектов, приводящих к неоднородности получаемого материала.

Федоровская группа описывает только правильные системы точек (узлов), но не показывает, как эти системы связаны друг с другом в структуре кристалла, поэтому здесь будут описаны только точечные дефекты правильных систем. Как известно, правильная система точек (узлов) данной пространственной группы характеризуется следующими параметрами: а) числом точек (узлов), б) координатами узлов и в) симметрией узлов. Вообще же число параметров любой системы зависит от того ее свойства, для описания которого эти параметры необходимы. Чем больше параметров характеризует какое-то свойство данной системы, тем больше уязвимых мест в ней может возникнуть. Здесь мы ограничимся чисто геометрическими характеристиками правильных систем точек.

Наряду с примесными междоузельными атомами и вакансиями в правильной системе точек может быть ряд дефектов, которые могут возникнуть в результате различных возмущающих причин. Эти дефекты в общем виде могут быть найдены независимо от порождающих их обстоятельств. Отдельный узел правильной системы может быть охарактеризован следующими параметрами: 1) координатами XYZ , 2) симметрией G , 3) формой (в случае многогранника гранями, вершинами и ребрами), 4) цветом. Среди этих параметров есть один, который, хотя и широко используется для представления структур, к сожалению, не учитывается при исследовании дефектов. Речь идет о форме узла, характеризующейся как симметрией, так и числом граней, вершин и ребер.

Симметрия узла, как известно, описывается точечной группой, являющейся подгруппой данной пространственной группы. Думается, что нарушение G скорее всего будет направлено в сторону подгрупп этой группы. Не исключено, однако, что в некоторых случаях симметрия узла может и повыситься, а в кристалле могут возникнуть локальные участки с более высокой симметрией, чем симметрия узлов данной правильной системы. Форма узла связана с его симметрией и может отражать, например, его координацию. Для молекулярных структур это может быть форма молекулы. Одной из причин изменения формы узла может быть точечный дефект в смежной правильной системе или изменение в атомном составе молекулы. Изменение только формы узла не обязательно влечет за собой изменение всех координат и симметрии узла.

Цветом узла, как известно, показывают сорт атома или иона. В зависимости от способа построения и цели координационного многогранника он может быть различно окрашен. Правильная система узлов идеальной структуры монотонна по цвету. Дефект нарушает это однообразие. Изменение окраски не всегда влечет за собой изменение симметрии узла, который при этом все же будет дефектным. На наш взгляд, полезно различать внутренний и наружный цвета координационного многогранника. Снаружи координационный многогранник можно раскрасить согласно его симметрии в разные цвета. Поэтому возможны три случая изменения цвета такого многогранника: а) внутреннего, б) наружного и в) одновременно того и другого.

Если не вдаваться в детали строения дефекта, которые могут быть связаны с его симметрией, формой и цветом и особенно с раскраской, то задача нахождения возможных нарушений сводится к числу сочетаний из четырех типов нарушений (1, 2, 3, 4) характеристических параметров, перечисленных выше. Удобно показывать только нарушенные параметры. Тогда будем иметь следующие случаи дефектов узла правильной системы.

А. Нарушен один параметр: 1, 2, 3, 4 — четыре случая.

Б. Нарушены два параметра: 12, 13, 14, 23, 24, 34 — шесть случаев.

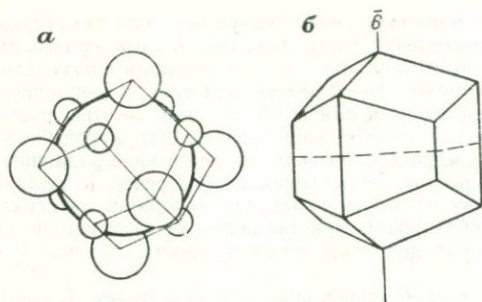


Рис. 84.

a — шар кубической плотнейшей упаковки с «заселенными» октаэдрическими и тетраэдрическими пустотами, центры которых соединены ребрами ромбододекаэдра; *б* — sdвойникованный по шпинелевому закону ромбододекаэдр — гексагональный додекаэдр, отвечающий шару гексагональной плотнейшей упаковки.

В. Нарушены три параметра: 123, 124, 134, 234 — четыре случая.

Г. Нарушены все четыре параметра: 1234 — один случай.

Таким образом, ограничив характеристику узла четырьмя параметрами, мы получаем 15 типов точечных дефектов правильной системы.

Для моделирования перечисленных типов дефектов удобнее всего воспользоваться координационными многогранниками, построенными по тому или иному принципу. Можно, например, воспользоваться широко известными 12-вершинниками (кубооктаэдрами), отображающими координацию шаров в плотнейших упаковках. Но эти многогранники не заполняют пространство без промежутков и не очень наглядно отображают расположение пустот.

Более удобной моделью, на наш взгляд, является фигура в виде ромбододекаэдра, представляющая собой координационный полиэдр для шара кубической упаковки (рис. 84). Грани этой фигуры делят расстояние между шарами пополам, два сорта вершин отвечают центрам тетраэдрических и октаэдрических пустот, а ребра показывают расстояния между пустотами. Остальные четыре параллелоэдра (три по Е. С. Федорову и один по Б. Н. Делоне) аналогичным образом характеризуют координацию и расположение пустот в соответствующих им структурах. Для любой структуры, как было показано Б. Н. Делоне [1937 г.], построенные таким же способом многогранники Дирихле будут отражать те же особенности структур, что и ромбододекаэдр для плотнейшей кубической упаковки.

Для алмазного структурного типа А. В. Шубниковым [1955 г.] описан многогранник Дирихле в виде комбинации тетраэдра и ромбододекаэдра с 16 вершинами, отображающими два сорта пустот в этих структурах. Плотнейшая гексагональная упаковка может быть моделирована стереоэдром в виде комбинации гексагональной призмы и тригональной дипирамиды (рис. 84, б). Симметрия этого стереоэдра может отвечать только двум классам — $\bar{6}2m$ и 32.

Обратим внимание на то, что такой стереоэдр является как бы sdвойникованным по шпинелевому закону ромбододекаэдром и поэтому его максимальная симметрия отвечает группе симметрии двойниковой границы по октаэдру для компонентов класса $m\bar{3}m$. Описанный стереоэдр будем называть гексагональным додекаэдром. Его вершины и ребра отражают те же особенности упаковки, что и ромбододекаэдр. Отметим, что если для моделирования идеальной структуры нет особой необходимости прибегать к построению разбиений по Дирихле, то при решении вопросов о моделировании дефектов в реальной структуре без таких построений обойтись трудно.

Координационные многогранники, построенные описанным способом, весьма наглядно изображаются на стереографической проекции. В ряде случаев (например, для плотноупакованных структур) на гномостереографической проекции можно показать структуру и ее дефекты в объеме, намного превышающем элементарную ячейку.

На рис. 85 показан слой плотнейшей кубической упаковки, каждый шар которой представлен гномостереографической проекцией ромбододекаэдра. Накладывая такие проекции (изготовленные, например, на кальке) друг на друга, можно получить представление о структуре далеко за рамками элементарной ячейки.

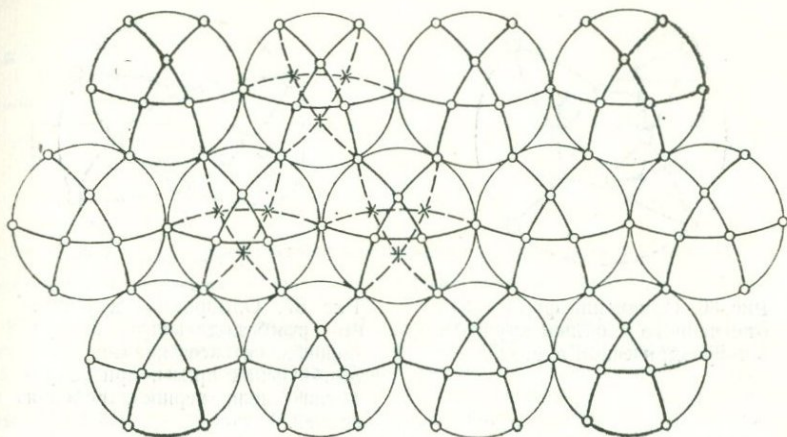


Рис. 85. Слой плотнейшей кубической упаковки, показанный гномостереографическими проекциями ромбододекаэдров.

Нижние грани ромбододекаэдров показаны только у части проекций.

Перейдем к краткому рассмотрению каждого типа дефекта в отдельности и их модельному представлению. Нарушение координат XYZ (случай А1) может быть связано, например, со смещением, поворотом и изменением объема узла. Разумеется, что не во всех случаях изменение координат координационного многогранника не отразится на его форме и симметрии. Смещение центра координационного многогранника вдоль плоскости симметрии или вдоль оси симметрии может не изменить или изменить несущественно остальные параметры узла. И это возможно только для таких правильных систем, точки которых имеют определенные группы симметрии.

Изменение группы симметрии G узлов (случай А2) может быть направлено как в сторону занижения, так и в сторону завышения симметрии. Например, если узел представлен кубом, то его симметрия, как известно, может отвечать пяти классам кубической сингонии, что показывается с помощью стрелок на его поверхности [Соколова Н. Г., Шафрановский И. И., Мокневский В. А., 1968 г.]. Такой дефект может возникнуть из-за нарушений в смежных координационных сферах.

Изменение формы узла-многогранника может происходить как без изменения числа его некоторых элементов (граней, вершин и ребер), так и с изменением всех или только некоторых из них (рис. 86). Нарушение формы (случай А3) невозможно без изменения координат некоторых элементов многогранника. Так, при изменении только граничных узлов изменяются координаты вершин, а остальные параметры могут остаться неизменными. Таким образом, координаты многогранника и его форма в ряде случаев являются взаимосвязанными параметрами.

Изменение цвета (случай А4) представляет собой идеальный случай изоморфного замещения. Однако при изменении цвета следует учитывать и возможные случаи изменения раскраски многогранника, которые могут быть вызваны изоморфными замещениями в соседних координационных сферах. На гномостереографической проекции структуры или координационного многогранника изменение цвета удобно обозначать нумерацией точек.

Нарушение координат многогранника и симметрии без изменения формы и цвета (случай В12) возможно, например, при изменении одновременно объема и класса симметрии в пределах одной сингонии. Исключение, конечно, составляют такие координационные многогранники, которые представлены гранями общих форм.

Изменение координат и формы (случай В13) для ряда фигур не осуществимо без появления новых граней. Такими многогранниками являются, напри-

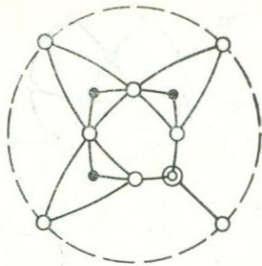


Рис. 86. Изменение формы узла, отмеченного двойным кружком, в тетраэдрической пустоте.

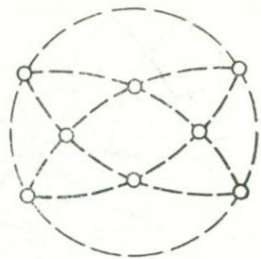


Рис. 87. Однородная деформация ромбододекаэдра, превращенного в комбинацию трех ромбических призм, при сохранении числа вершин, ребер и граней.

мер, куб, октаэдр и др. Формы низшей и средней категорий разрешают деформации без изменения симметрии.

Случай В14 предусматривает изменение координат и цвета координационного многогранника. Иллюстрацией может служить изоморфное замещение с изменением объема фигуры, причем окраска может измениться (или внутренняя, или наружная). В первом случае будем иметь изоморфное замещение центрального узла, а во втором — периферийных, расположенных в вершинах многогранника.

При одновременном изменении симметрии и формы (случай В23) произойдет изменение всех или части координат многогранника.

Изменение цвета и симметрии узла-многогранника (случай В24) при условии сохранения остальных параметров неизменными может быть представлено переходом фигуры в другой класс, разрешенный для нее, и переменной окраски или только изменением раскраски отдельных частей фигуры. Примером может служить переход октаэдра в два различно окрашенных тетраэдра.

Нарушение формы и цвета (случай В34) может осуществиться только при частичном нарушении координат многогранника. Класс симметрии допускает неограниченные вариации форм.

Случай В123, когда без изменения остается только цвет (или способ раскраски), может быть истолкован как изменение расстояний между узлами при упругой деформации координационного полиэдра или при фазовом переходе. Такая деформация может быть отображена на стереографической проекции (рис. 87).

Изменение координат, симметрии и цвета (случай В124) может быть проиллюстрировано одним из случаев изоморфизма, сопровождающегося изменением объема фигуры и переходом в другой класс симметрии. Сохранение только симметрии многогранника (случай В134) можно представить, например, таким узлом, вокруг которого скопились определенным образом расположенные примесные узлы (атомы, ионы), межузлия и др. Если вокруг шара плотнейшей кубической упаковки, моделированного ромбододекаэдром (рис. 84), в тетраэдрических пустотах расположатся примесные атомы, то восемь вершин этого многогранника должны быть притуплены раскрашенными в другой цвет плоскостями (111). Симметрия при этом не изменится, но появятся дополнительные ребра и вершины с новыми координатами, отражающими расположение вновь образовавшихся пустот.

Случай В234 возможен только при частичном сохранении координат многогранника. Это может быть просто замещением с изменением симметрии и формы узла. Если при деформации число граней, ребер и вершин не изменилось, то это значит, что окружение качественно тоже не изменилось. Если же появились новые грани, ребра и вершины, то и в координационной сфере произошли изменения.

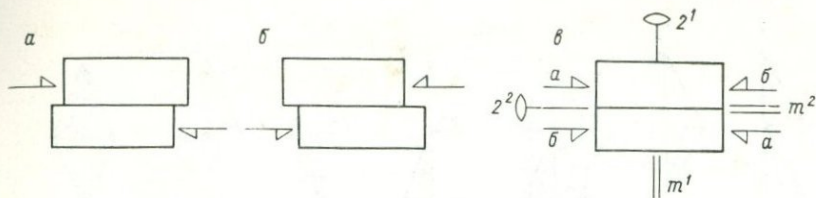


Рис. 88. Два варианта приложения касательных напряжений к кристаллу (а и б). в — иллюстрация совмещения вариантов а и б с помощью операций m^1 , m^2 и 2^1 и 2^2 .

Когда нарушены все четыре параметра (случай Г1234), дефект может быть отнесен к такому замещению узла, которое связано с изменением координационного числа и качества окружения. Отнесение искажения структуры к этому случаю следует делать только тогда, когда все координаты многогранника нарушены. Поэтому он может быть нелегко отличим, например, от предыдущего случая, когда допускается частичное нарушение координат многогранника.

5. НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ СКОЛЬЖЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ И СИММЕТРИЯ ДИСЛОКАЦИЙ*

Как известно, при описании скольжения в кристаллах выделяют элементы T (плоскость скольжения) и t (направление скольжения). От симметрии этих элементов во многом зависит результат скольжения. На рис. 88, а, б показаны два варианта приложения касательных напряжений. Эти варианты могут быть эквивалентны и не эквивалентны друг другу. Условия эквивалентности и неэквивалентности обоих вариантов были сформулированы М. Бургером в 1930 г. и недавно повторены А. Н. Орловым и Б. И. Смирновым [1968 г.]. Если имеет место неэквивалентность указанных вариантов, то скольжение называют односторонним (полярным). Если же наблюдается эквивалентность этих вариантов, то скольжение называют двусторонним (неполярным). Наличие одностороннего или двустороннего скольжения определяется очень просто, исходя из симметрии плоскости скольжения.

Оба варианта (рис. 88, а, б) приложения касательных напряжений объединены на рис. 88, в, из которого видно, что они совмещаются друг с другом при помощи следующих операций симметрии: m^1 , перпендикулярной к t ; m^2 , параллельной T ; 2^1 , перпендикулярной к T , и 2^2 , параллельной t . Эти операции симметрии дополняют группу симметрии касательных напряжений $2/m$ до mm^1m^2 . Таким образом, плоскость скольжения для обеспечения двусторонности процесса сдвигообразования либо должна иметь все четыре элемента симметрии (m^1 , m^2 , 2^1 , 2^2), т. е. направление t должно обладать группой симметрии mm^1m^2 , либо один или два из этих элементов должны входить в группу симметрии направления скольжения. Последнему условию будут отвечать 10 разновидностей групп симметрии (с учетом m^1 , m^2 , 2^1 , 2^2): 2^1m^1m , 2^2m^2m , 22^12^2 , $2^1/m^2$, $2^2/m^1$, 2^1 , 2^2 , m^1 , m^2 . Всего 11 разновидностей групп симметрии направления для двустороннего (неполярного) скольжения. Одностороннее скольжение может возникнуть в том случае, если направление скольжения будет иметь одну из пяти следующих групп симметрии: m (параллельно t и нормально к T), 2 (параллельно T и нормально к t), $2/m$, $\bar{1}$ и 1 . Здесь следует обратить внимание на то, что наличие центра симметрии может привести к одностороннему скольжению. Поэтому в одном кристалле принципиально возможны и одностороннее, и двустороннее скольжение. В некоторых кристаллах вероятно только одностороннее скольжение (кристаллы с симметрией 1 и $\bar{1}$).

Теперь перейдем к рассмотрению отмеченных выше особенностей скольжения с дислокационной точки зрения. Для этого разберем возможные группы симметрии полных краевой и винтовой дислокаций. Очевидно, что симметрия оси

* См. работу [Мокиевский В. А., 1973 г.]—Ред.

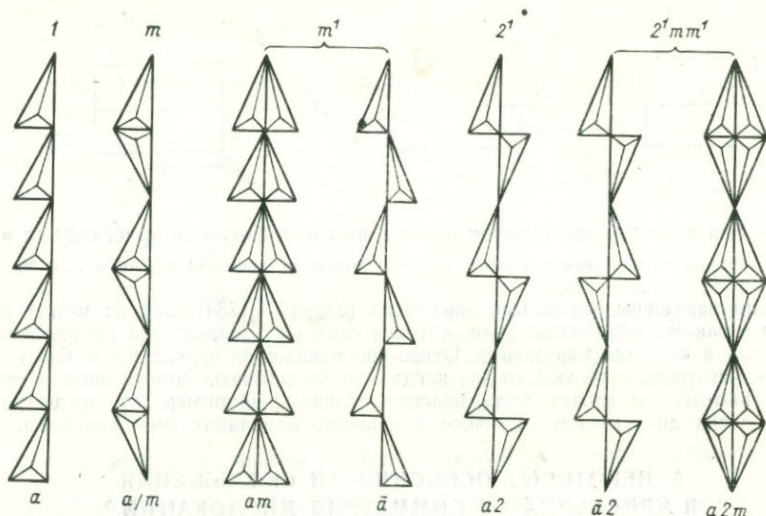


Рис. 89. Семь групп симметрии дисконтинуума дислокаций (бордюров), моделированных с помощью шубниковских тетраэдров.

Внизу — запись групп симметрии дисконтинуума (a — трансляция, \bar{a} — плоскость скользящего отражения); сверху — соответственно точечные группы симметрии, обозначения которых находятся в согласии с рис. 1.

краевой дислокации будет отвечать симметрии края «введенной» полуплоскости. Это будут группы симметрии ребер кристалла или пять точечных групп бордюров: $2^1 m m^1$, 2^1 , m^1 , m и 1 , где 2^1 нормальна к оси дислокации и к плоскости T , m^1 параллельна оси дислокации и нормальна к t , m нормальна к оси дислокации и параллельна t . Указанным пяти точечным группам симметрии дислокаций соответствуют семь групп симметрии дисконтинуума бордюров (рис. 89). Это и будут возможные группы симметрии структуры ядер дислокаций. Группы симметрии винтовых дислокаций могут отвечать только двум случаям — 2 и 1. Ось второго порядка при этом должна лежать в плоскости сдвига нормально к оси дислокации. Если винтовая дислокация проходит через весь кристалл и имеет симметрию 2, то ступени на противоположных поверхностях, образованные этой дислокацией, будут эквивалентны для генерации слоев роста или растворения. Если же симметрия дислокации равна 1, то генерация слоев роста (растворения) на противоположных ступенях будет различной независимо от того, имеет ли кристалл центр симметрии и плоскость симметрии, перпендикулярную к оси дислокации, или четные оси симметрии, нормальные к оси дислокации, но не лежащие в плоскости сдвига.

Движение указанных типов дислокаций (рис. 89) в кристалле при скольжении будет различным. Пусть плоскость скольжения (T) есть плоскость рис. 89, а направление скольжения (t) нормально к оси дислокации. Тогда ясно, что движение дислокации с точечной симметрией $2^1 m m^1$ в противоположные стороны вдоль t будет эквивалентно, так как концы направления скольжения совмещаются при помощи операций 2^1 и m^1 . Движение этих дислокаций отвечает двустороннему скольжению. Из аналогичных соображений двусторонним движением будут обладать дислокации с точечной симметрией 2^1 и m^1 . Тогда движение дислокаций с симметрией m и 1 будет односторонним (полярным).

В табл. 43 для двустороннего и одностороннего скольжений в левом столбце указаны группы симметрии направлений скольжения, а в правом — группы симметрии осей дислокаций, перпендикулярных к t и параллельных T . Все перечисленные случаи неполярного и полярного скольжений, рассмотренные без привлечения дислокаций, находятся в полном согласии с особенностями движения

**Группы симметрии направлений t и дислокаций
для двустороннего и одностороннего скольжений**

№ п/п	Симметрия t	Симметрия дислокаций
Двустороннее скольжение		
1	mm^1m^2	2^1mm^1
2	2^1mm^1	2^1mm^1
3	2^2mm^2	m
4	$2m^1m^2$	m^1
5	$2^1/m^2$	2^1
6	$2^2/m^1$	m^1
7	m^1	m^1
8	m^2	1
9	22^12^2	2^1
10	2^1	2^1
11	2^2	1
Одностороннее скольжение		
12	m	m^*
13	$2/m$	m
14	1	1
15	2	1
16	1	1

отвечающих им дислокаций (правый столбец). Однако некоторые случаи (№ 3, 8, 11, 13—15) требуют дополнительного разъяснения. Так, в случае 3 движение дислокации с симметрией m полярно, а симметрия направления t указывает на двустороннее скольжение.

Кажущееся противоречие устраняется, если учесть знак полярности движения дислокаций в условно «верхней» и «нижней» частях кристалла, разделенных плоскостью T (рис. 88). Если в обеих частях знаки полярности равны (дислокации могут двигаться только в одном направлении), то варианты a и b на рис. 88 будут эквивалентны и скольжение окажется двусторонним. Это значит, что при одном варианте приложения касательных напряжений движение дислокаций будет осуществляться только в одну сторону и только, например, в «верхней» части кристалла, а при втором варианте приложения касательных напряжений дислокации будут двигаться только в «нижней» части кристалла, но в ту же сторону, что и в первом случае. Если же знаки полярностей будут противоположными, то скольжение станет односторонним. Движение дислокаций наступит только при одном из вариантов приложения касательных напряжений. Знак полярности движения дислокаций в обеих частях кристалла будет одинаковым, если кристалл имеет плоскость симметрии m^2 или ось 2^2 (случай № 8 и 11 в табл. 43) или оба эти элемента симметрии присутствуют вместе (группа 2^2mm^2 , случай № 3). Если же у кристалла направление t имеет центр симметрии или ось 2 (случай № 14 и 15) или оба эти элемента входят в одну группу ($2/m$, случай № 13), то знаки полярности движения дислокаций будут в «верхней» и «нижней» частях противоположными и скольжение окажется односторонним.

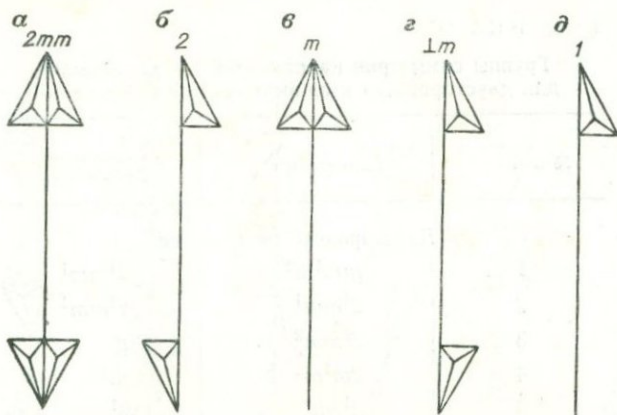


Рис. 90. Модели из стрелок, иллюстрирующие точечные группы симметрии дислокаций.

Таким образом, приходим к выводу, что «классическое» рассмотрение особенностей скольжения (без привлечения дислокаций) и анализ скольжения с позиций симметрии дислокаций дают одинаковые результаты. Это обстоятельство может оказаться полезным в тех случаях, когда при анализе скольжения один способ рассмотрения удобно заменить другим. Особенно оба подхода могут быть полезными при исследовании скольжения у низкосимметричных кристаллов. При анализе одностороннего скольжения нужно всегда иметь в виду то обстоятельство, что полярность движения дислокаций может проявляться очень слабо, и тогда случаи полярного и неполярного скольжений окажутся практически неразличимыми. Причины этого вскроют только специально поставленные эксперименты.

6. ВЫВОД СИММЕТРИИ ФИГУР ТРАВЛЕНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СИММЕТРИИ ДИСЛОКАЦИИ ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ КЛАССА $\bar{3}m^*$

Как отмечалось выше, симметрия полных дислокаций может быть описана следующими группами: $2mm$, 2 , m , $1m$ и 1 , которые удобно моделировать не только шубниковскими тетраэдрами (рис. 89) но и при помощи стрелок, условно совпадающих с осями дислокаций. Концы этих стрелок изображаются в виде асимметричных тетраэдров (рис. 90).

Симметрия краевых дислокаций может отвечать всем перечисленным пяти случаям. Поскольку оси винтовых дислокаций не могут иметь плоскостей симметрии, то им будут соответствовать только две группы: 2 и 1 .

Группы симметрии дислокаций являются подгруппами точечного класса симметрии кристалла. Поэтому для каждого кристалла легко определить, какие по симметрии дислокации в нем могут быть.

Селективное травление выявляет выходы осей дислокаций на поверхность кристалла. Очевидно, что симметрия фигур травления является подгруппой группы симметрии дислокации. Если оси дислокаций наклонны к поверхности, то возникающие ямки травления могут отвечать только двум группам: m и 1 . Если же оси дислокаций параллельны поверхности и достаточно близки к ней, то при травлении могут возникать канавки всех пяти случаев симметрии (рис. 91).

* Работа выполнена В. А. Мокиевским совместно с Г. И. Доливо-Добровольской [1973 г.]. См. также работу [Мокиевский В. А., Доливо-Добровольская Г. И., Любалин М. Д., 1972 г.].— *Ред.*

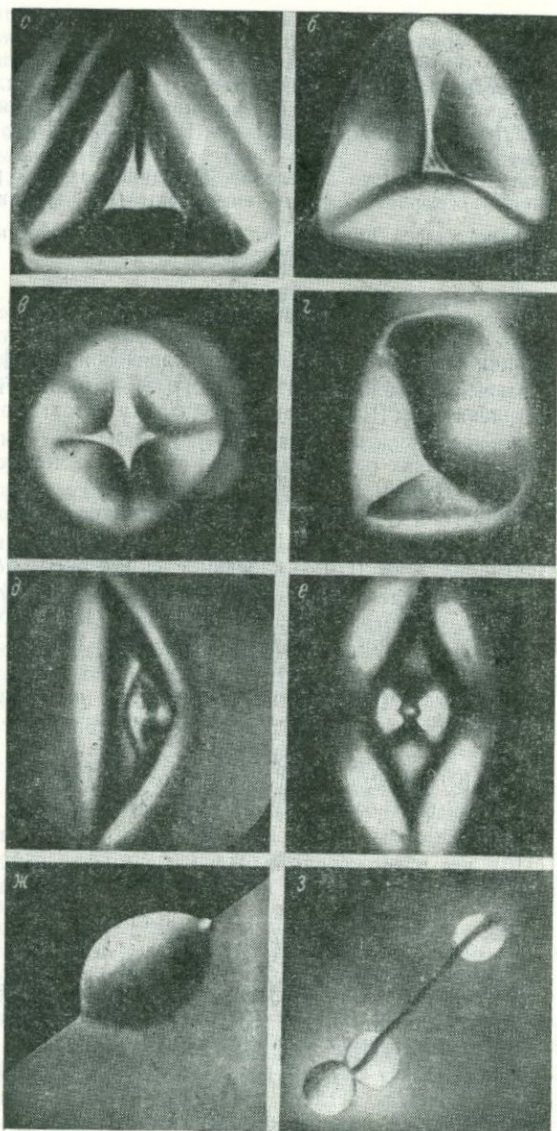


Рис. 91. Фигуры травления с различной симметрией, выявляемые селективным травлением на плоскостях (111), (001) и (011) кристаллов германия.

а, в, д, ж — ямки с симметрией $\bar{1}11$; *б* и *г* — ямки с симметрией $1\bar{1}1$; *з* — канавка с симметрией $1\bar{1}1$; *е* — ямка с повышенной симметрией $2\bar{1}1$; *з* — канавка с симметрией $1\bar{1}1$. Увеличение: *а, б, ж, з* — 254; *в, г* — 366; *д, е* — 1060.

Сказанное иллюстрируется на примере кристаллов класса $\bar{m}3m$. Очевидно, что в этих кристаллах возможны все пять случаев симметрии дислокаций. Ориентировки осей этих дислокаций могут быть различными. Внешние очертания фигур травления определяются симметрией плоскости наблюдения. Детали строения этих фигур связаны с симметрией отвечающих им дислокаций [Доливо-Добровольская Г. И., Любалин М. Д., Мокриевский В. А., 1972 г.] и с ориентировкой последних в объеме кристалла.

Рассмотрим симметрию фигур травления, возникающих при различной ориентировке дислокаций всех пяти случаев симметрии (рис. 90), выявляемых на плоскостях кристаллов класса $\bar{m}3m$. Этот анализ осуществляется очень просто при помощи стереографических проекций.

Дислокации $2mm$

1. Ось дислокации $[100] - 2^{001}m^{100}m^{010}$. На гранях зоны $[010]$ — ямки с симметрией m , за исключением граней (001) и $(00\bar{1})$, где имеются канавки с симметрией $2mm$. На гранях зоны $[100]$ — канавки, ** форма которых отвечает случаю $\perp m$ (рис. 90, г), за исключением граней (001) и $(00\bar{1})$, где имеются канавки с симметрией $2mm$. На гранях остальных зон — ямки с симметрией 1, за исключением указанных выше граней.

2. Ось дислокации $[110] - 2^{001}m^{110}m^{\bar{1}\bar{1}0}$. На гранях зоны $[\bar{1}\bar{1}0]$ — ямки с симметрией m , за исключением граней (001) и $(00\bar{1})$, где имеются канавки с симметрией $2mm$. На гранях зоны $[110]$ — канавки с симметрией $\perp m$, за исключением граней (001) и $(00\bar{1})$, где имеются канавки с симметрией $2mm$. На гранях остальных зон — ямки с симметрией 1, за исключением указанных выше граней.

3. Ось дислокации $[\bar{1}\bar{1}0] - 2^{110}m^{001}m^{1\bar{1}0}$. На гранях зоны $[\bar{1}\bar{1}0]$ — канавки с симметрией $\perp m$, за исключением граней (110) и $(\bar{1}\bar{1}0)$, где имеются канавки с симметрией $2mm$. На гранях зон $[001]$ — ямки с симметрией m , кроме граней (110) и $(\bar{1}\bar{1}0)$, где имеются канавки с симметрией $2mm$. На гранях остальных зон — ямки с симметрией 1, за исключением указанных выше граней.

4. Ось дислокации $[001] - 2^{110}m^{110}m^{001}$. На гранях зоны $[001]$ — канавки с симметрией $\perp m^{001}$, исключая плоскости (110) и $(\bar{1}\bar{1}0)$, где находятся канавки с симметрией $2mm$. На гранях зоны $[\bar{1}\bar{1}0]$ — ямки с симметрией m , за исключением граней (110) и $(\bar{1}\bar{1}0)$, где расположены канавки с симметрией $2mm$. На остальных гранях — ямки с симметрией 1, за исключением вышеуказанных граней.

Дислокации 2^{***}

1. Ось дислокации $[pq0] - 2^{001}$. На гранях зоны $[pq0]$ — канавки с симметрией 1, за исключением граней (001) и $(00\bar{1})$, где имеются канавки с симметрией 2. На остальных гранях — ямки с симметрией 1.

2. Ось дислокации $[111] - 2^{\bar{1}\bar{1}0}$. На гранях зоны $[110]$ — канавки с симметрией 1, за исключением граней $(\bar{1}\bar{1}0)$ и (110) , где имеются канавки с симметрией 2. На остальных гранях — ямки с симметрией 1.

3. Ось дислокации $[112]$ либо $[ppr] - 2^{1\bar{1}0}$. Форма фигур травления аналогична предыдущему случаю.

* Символы сверху показывают ориентировку элементов симметрии дислокаций.

** Принципиально возможны случаи, когда при травлении вместо ямки будет возникать бугорок, а вместо канавки — хребтик.

*** Оси винтовых дислокаций с симметрией 2 могут быть любыми направлениями, параллельными граням $\{100\}$ и $\{110\}$. Фигуры травления на этих гранях — канавки с симметрией 2. На остальных гранях либо канавки, либо ямки симметрии 1.

Дислокации m

1. Ось дислокации $[p0q]$ — m^{010} . На гранях зоны $[p0q]$ — канавки с симметрией 1; на гранях $(p0q)$ и $(\bar{p}0\bar{q})$ — канавки с симметрией m . На гранях остальных зон — ямки с симметрией 1, за исключением граней зоны $[010]$, где имеются ямки с симметрией m .

2. Ось дислокации $[ppr]$ или $[111]$ — m^{110} . На гранях зоны $[\bar{1}\bar{1}0]$ — ямки с симметрией m , за исключением граней (ppr) или (111) , где имеются канавки с симметрией m . На гранях остальных зон — ямки или канавки с симметрией 1.

Дислокации $\perp m$

1. Ось дислокации $[100]$ — m^{100} . На гранях зоны $[100]$ — канавки с симметрией $\perp m$, на остальных гранях — ямки с симметрией 1.

2. Ось дислокации $[110]$ — m^{110} . На гранях зоны $[110]$ — канавки с симметрией $\perp m$, на остальных гранях — ямки с симметрией 1.

Дислокации 1

1. Ось дислокации $[pq0]$, $[ppr]$, $[111]$ или $[pqr]$ — 1. На гранях зон, параллельных осям дислокаций, — канавки с симметрией 1, на остальных гранях — ямки с симметрией 1.

Подобное рассмотрение симметрии фигур травления может быть легко осуществимо для любого класса симметрии кристаллов, так как классификация дислокаций по их симметрии учитывает все типы дислокаций с любыми векторами Бюргерса, как с осями вдоль важнейших направлений в кристалле, так и дислокаций, направление которых характеризуется более сложными символами.

Рассмотрение фигур травления с целью определения их симметрии следует проводить на микроскопах, имеющих приставки фазового или интерференционного контраста. Это позволяет более отчетливо видеть детали строения фигур травления (рис. 91).

Отметим, что в некоторых случаях ямки травления явно дислокационного происхождения обнаруживают завышенную симметрию, совпадающую с симметрией плоскости наблюдения. Почти всегда это присуще кристаллам, подвергшимся длительному отжигу, и, очевидно, связано с образованием значительной «примесной атмосферы» вокруг ядра дислокаций.

Завышение симметрии может быть вызвано и слабой избирательностью применяемого травителя.

Тем не менее в большинстве случаев детали строения фигур травления однозначно свидетельствуют о симметрии и типе отвечающих им дислокаций, что позволяет использовать метод травления не только для подсчета плотности дислокаций, но и для определения их типов.

7. СИММЕТРИЙНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРИСТАЛЛОВ *

Связь пластической деформации кристалла с механическим воздействием однозначно устанавливается при помощи симметрии.

Фигура удара или давления [Mügge O., 1898 г., Smakula A., Klein M. W., 1951 г.] есть деформация в точке. Симметрия покоящейся точки, по А. В. Шубникову [69], равна $\infty/\infty m$, а симметрия точки, движущейся в одном направлении, ∞m . Такой симметрией обладает полярный вектор. Напряжение на грани, создаваемое этим вектором, может быть эквивалентно описано двумерным по-

* Работа выполнена совместно с И. И. Афанасьевым [1968 г.] — Ред.

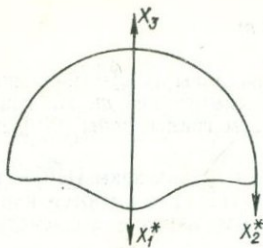


Рис. 92. Система координат X_i в пластически деформированном кристалле.

Оси координат совпадают с направлениями $\langle 100 \rangle$ *.

лярным тензором с симметрией ∞m [Шубников А. В., 1949 г.]. Такое воздействие изотропно в плоскости грани и анизотропно по нормали к ней. Поэтому возникающая при уколе фигура зависит только от пластической анизотропии данной грани. Связь симметрии воздействия с симметрией кристаллической грани устанавливается на основе принципа симметрии Кюри [23]. Этот принцип широко использовали для решения вопросов кристаллографии и кристаллофизики, но не учитывали при изучении пластичности кристаллов.

В настоящей статье сделана попытка применить этот принцип для исследования формы пластически деформированных кристаллов. Если кристалл испытывает определенное внешнее воздействие, то результирующую группу симметрии можно определить как подгруппу, общую для группы симметрии кристалла и воздействия. Симметрия двумерных полярных тензоров описывается четырьмя группами: ∞ , ∞m , 2 , $2m$. При точечных воздействиях, описываемых полярным вектором, пластическая деформация также полярна, т. е. симметрия пластически деформированного индивида описывается 10 пирамидальными точечными группами симметрии. Плоскую модель можно превратить в объемную при центрально-кольцевом прогибе плоской круглой пластинки, вырезанной параллельно какой-либо грани кристалла. Различие между уколами и такими прогибами заключается в том, что при центрально-кольцевом прогибе линейные размеры кристалла соизмеримы с линейными размерами усилия, а при уколе линейные размеры усилия бесконечно малы по сравнению с размерами кристалла.

Обобщение принципа симметрии Кюри и постулата Неймана можно записать в виде

$$G'' \supseteq G^0 \supseteq G',$$

где G'' — группа симметрии физического свойства, описываемого тензором второго ранга (структурно-нечувствительное свойство); G^0 — точечная группа симметрии кристалла; G' — группа симметрии пластически деформированного кристалла. Это значит, что при любом воздействии на кристалл элементы классической симметрии следствия всегда составляют группу, являющуюся либо подгруппой класса симметрии кристалла, либо его надгруппой. Пластически деформированные кристаллы обладают минимальной симметрией по сравнению с 32 точечными группами симметрии, а их разнообразие определяется числом подгрупп данной группы симметрии кристалла. Поскольку пластически деформированный кристалл представляет собой текстуру, то симметрия ее форм является объективным критерием для понимания закономерностей распределения элементов текстуры (переориентированных областей), проявляющих себя на поверхности кристалла в виде реберных форм.

Опыты на растяжение и сжатие кристаллов являются низкосимметричными вариантами деформации, которые определяются неоднородным распределением напряжений и поэтому плохо воспроизводятся. При центрально-кольцевом прогибе кристаллических пластинок результаты опытов вполне воспроизводимы, так как симметрия тензора воздействий согласуется с симметрией кристалла, т. е. в этих условиях кристалл максимально проявляет свою симметрию и содержит более полную информацию о ходе пластического течения. Символы ориентаций кристалла после деформаций обозначаются в криволинейных координатах звездочкой (рис. 92).

Симметрия текстур пластически деформированного кристалла

Наиболее высокосимметричному случаю напряженного состояния отвечает поле, которое описывается тензором, имеющим форму

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{11} \end{bmatrix}, \quad (1)$$

и симметрию $\infty/\infty m$, являющуюся надгруппой группы $m\bar{3}m$ кристалла NaCl. Анизотропными вариантами указанного поля являются поля с симметрией $m\infty : m$ и $m2 : m$, имеющие формы тензора:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}; \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Форме (2) тензора соответствуют опыты по центрально-кольцевому прогибу круглых пластинок, а форме (3) — по центрально-кольцевому прогибу эллиптических пластинок. Симметрия и форма пуансонов и матриц должны быть согласованы с симметрией напряжений и формой образца. Из формул (1)–(3) следует, что двумерное поле напряжений, параллельное какой-либо грани кристалла, описывается только двумя группами — ∞m и $2m$, так что опыты по прогибу круглых и эллиптических пластинок и простому круговому изгибу стержней охватывают все возможные напряженные состояния, различные по симметрии. Кручение приводит к понижению симметрии двумерного тензора до ∞ и 2. В трехмерном пространстве им соответствуют группы симметрии аксиальных тензоров $\infty : 2$ и $2 : 2$. При центрально-кольцевом прогибе тензор напряжений геометрически можно представить как комбинацию полярного вектора и полярного двумерного тензора. В условиях наших опытов появление того или иного тензора имеет временную зависимость, поэтому компоненту σ_{33} можно иногда рассматривать отдельно от компоненты σ_{11} . В начальной стадии деформация кристалла связана в основном с двумерным полярным тензором [в матрице тензора (2) он выделен штриховой линией]. По мере упрочнения кристалла компоненты σ_{33} начинают играть заметную роль. Присоединение σ_{33} к тензору напряжений повышает число измерений и симметрию самого тензора, что немедленно сказывается на формах фрагментации кристалла.

Кинематика изгиба. Сечение поверхности модулей Юнга плоскостью куба (рис. 93) произведено при температурах выше точки упругой изотропии. Превращение плоской пластинки в часть сферической оболочки является процессом многостадийным. По отпечаткам матрицы и пуансона на деформированном кристалле можно выделить три стадии пластических движений: 1) изгиб вокруг $[100]$ и $[010]$ (в плоскости образца); 2) изгиб вокруг $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$; 3) изгиб вокруг $[001]$. Как видно на рис. 94, предел упругости (текучести) при изгибе вокруг $[100]$ и $[010]$ ниже, чем вокруг любого направления $[h\bar{k}0]$. Обжатие пластинки на матрице заканчивается при $\gamma=0,3$ (отношение стрелы прогиба к диаметру образца). При $\gamma=0,2$ радиальная кривизна в центре пластинки больше кривизны пуансона. Здесь кристалл как бы складывается вокруг $[100]$ и $[010]$ подобно конверту. При полном обжатии пластинки на матрице деформированный кристалл представляет собой коноид с линиями перегиба по $(100)^*$ и $(010)^*$. Изгибающие моменты M вокруг соответствующих направлений удовлетворяют неравенству $M[110] > M[h\bar{k}0] > M[100]$. С увеличением стрелы прогиба ($\gamma > 0,3$) кристалл вытягивается, т. е. к изгибу вокруг $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$ прибавляется изгиб вокруг $[001]$. Коноид, образовавшийся на первой стадии, на второй стадии (вытяжке)

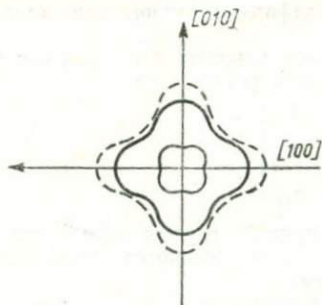


Рис. 93. Сечение поверхности модулей Юнга плоскости куба кристалла NaCl по С. П. Никанорову и А. В. Степанову [1964 г.].

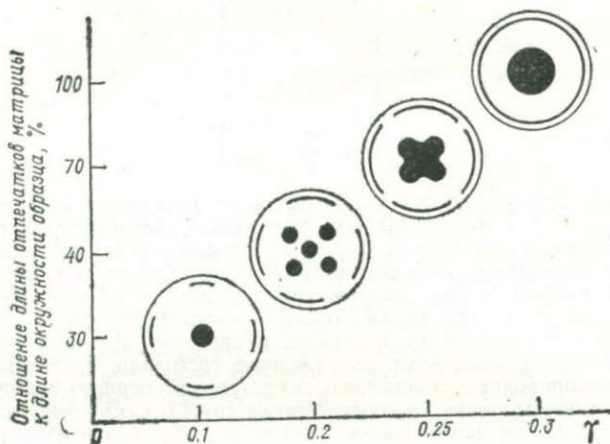


Рис. 94. Изменение отпечатков окрашенных матриц и пуансона (черное) в зависимости от стрелы прогиба γ .

разгибается (деформация меняет знак на противоположный) и кристалл уменьшает свою кривизну. Так как на первой стадии произошло упрочнение кристалла в областях, прилегающих к $[100]^*$ и $[010]^*$, то новый предел упругости оказывается более высоким, чем в областях $[110]^*$ и $[\bar{1}\bar{1}0]^*$. Поэтому одновременно с разгибанием вокруг $[100]$ идет изгибание кристалла вокруг $[110]^*$. На третьей стадии деформирования ($\gamma > 0,5$) кристалл изгибается вокруг $[001]^*$ с образованием фестонов. Граница между второй и третьей стадиями четко не устанавливается. Изменение радиусов кривизны приведены на рис. 95.

Текстуры деформированного кристалла. Кинематика пластических движений кристалла согласуется с его симметрией. Видимая симметрия деформированного кристалла отвечает группе $4mm$, что обусловлено его формой и фрагментацией. Как видно из рис. 96, в деформированном кристалле можно выделить области с симметрией $4mm$, $2mm$, m и 1 . Фрагменты по внешнему виду сходны с пластинами, которые в свое время наблюдали Р. Браунс [1889 г.], Н. А. Бриллиантов и И. В. Обренов [1937 г.], А. В. Степанов и А. В. Донской [1954 г.], В. Л. Инденбом и А. А. Урусовская [1959 г.]. Размеры фрагментов колебались от десятых долей миллиметра до 0,5 мм. Границы между фрагментами в основном совпадали с поверхностями $(110)^*$. При сильных отклонениях границ от $(110)^*$ наблюдались клиновидные блоки (рис. 97). Участки периферии образца, прилегающие к $(100)^*$, отвечают симметрии m и имеют двухъярусное строение (рис. 98), что согласуется с изображением штриховки на рис. 96.

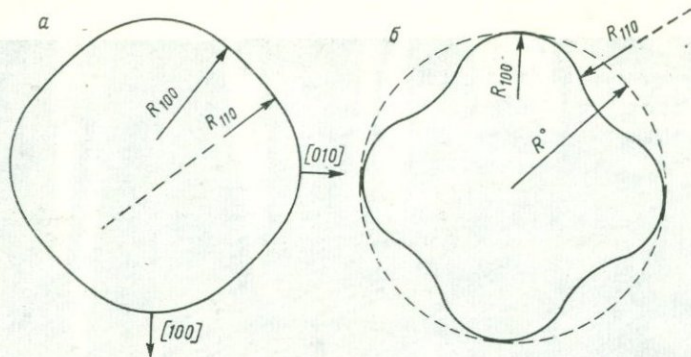


Рис. 95. Схема изменения радиуса кривизны R исходного образца вдоль $[100]$ и $[110]$ на первой стадии (а) и при переходе ко второй (б).

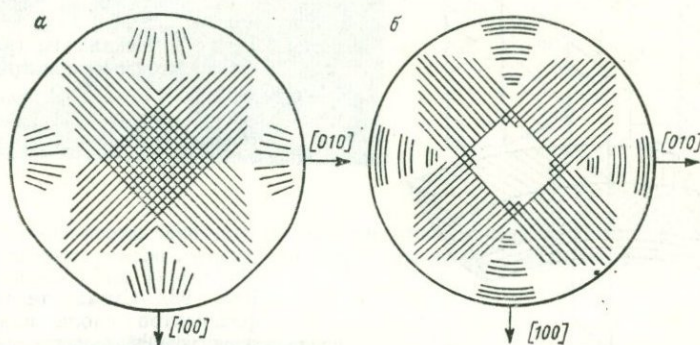


Рис. 96. Схема фрагментации пластически деформированных кристаллов со структурой типа галита.

а — поверхность $(001)^*$; б — поверхность $(00\bar{1})^*$.

Задача кристаллографического исследования текстуры деформированного кристалла сводится к изучению формы штриховок. Рост фрагментов начинается от верхней и нижней поверхностей образца как от мест, испытывающих максимальное смещение относительно друг друга. При несовпадении фрагментов, растущих сверху и снизу, на их стыке возникает переходная область (рис. 99). Текстура, изображенная на рис. 98, интерпретируется с помощью реберных форм (рис. 100), которые выводятся из бесконечных плоских групп. Текстура из области, прилегающей к $(110)^*$ (рис. 101), состоит из двух систем фрагментов [Афанасьев И. И., 1964 г.; Мокневский В. А., Афанасьев И. И., 1966 г.]. Сопряженные фрагменты первого порядка содержат фрагменты второго порядка. Направление $[111]$ является общим для двух смежных фрагментов первого порядка. Центральная область образца с пересекающимися фрагментами интерпретируется при помощи бесконечной симметрии C_{4v}^1 (рис. 102).

Морфологическая симметрия частично согласуется с симметрией оптических аномалий (рис. 103). При этом группа симметрии оптических аномалий C_4^1 является подгруппой группы C_{4v}^1 , что, очевидно, связано с нецентросимметричным строением границ между фрагментами. Центросимметричные кристаллы образуют



Рис. 97. Искажение границ фрагментов при полигонизации.

Фрагменты внизу слева не полигонизованы, $\times 35$.

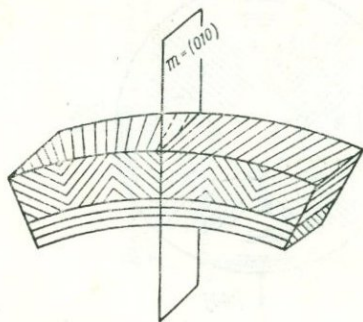


Рис. 98. Схема текстуры фрагментов вдоль направления $[100]^*$.

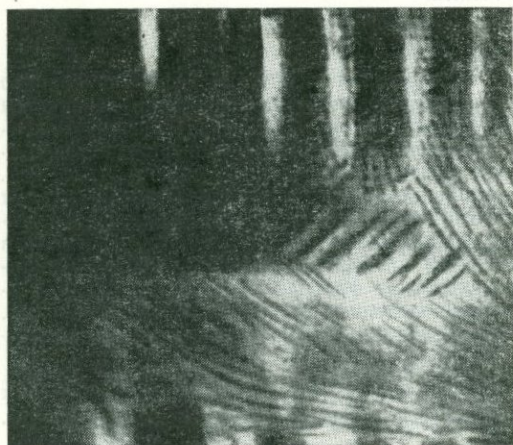


Рис. 99. Образование одноярусной текстуры за счет развития фрагментов системы $(110)^*$ на фрагментах системы $(101)^*$ от поверхностей (001) и $(00\bar{1})^*$.

Фрагменты системы $(110)^*$ укрупняются. $\times 36$.

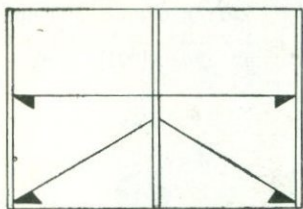


Рис. 100. Простые реберные формы в группе C_8^1 , соответствующие ребрам между фасками фрагментов текстуры рис. 98.

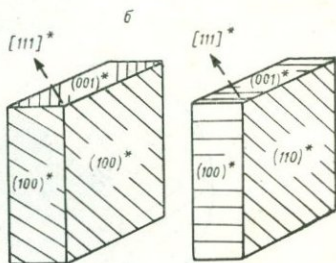
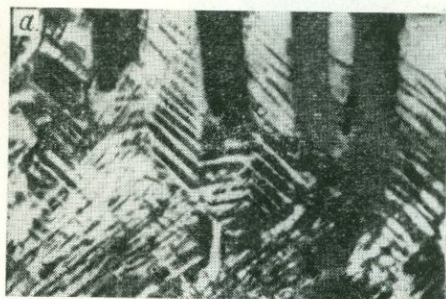


Рис. 101. Фрагменты текстуры из области, прилегающей к $(110)^*$ ($\times 56$) (a) и сочленение фрагментов второго порядка в смежных пластинах фрагментов первого порядка вдоль $[111]^*$ (б).

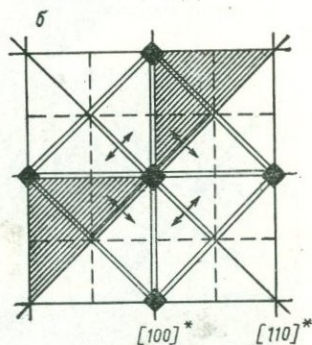
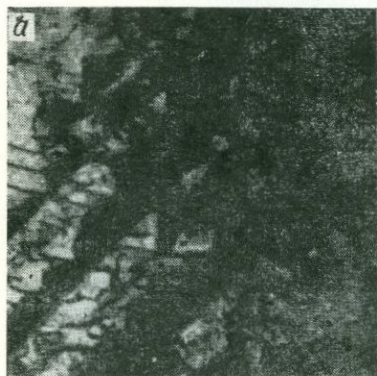


Рис. 102. Текстура бесконечного реберного узора в группе C_{4v}^1 на $(001)^*$ (a) и соответствующая ей плоская федоровская группа (б).

Оттенены треугольники, одновременно отражающие свет.

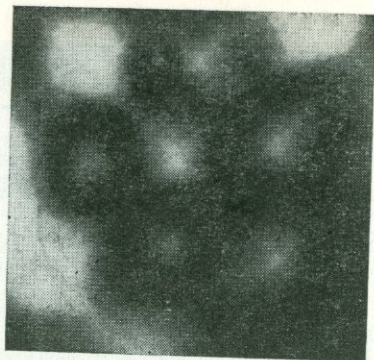


Рис. 103. Узор, образующийся при пересечении полос двойного лучепреломления при наблюдении вдоль $[001]$, $\times 96$.

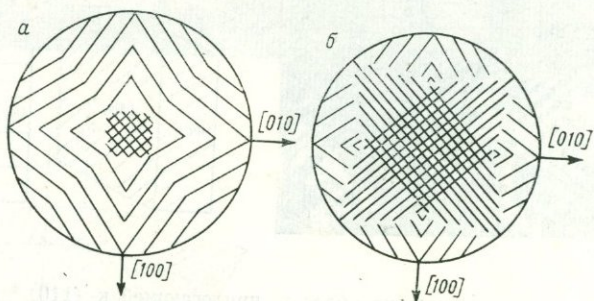


Рис. 104. Влияние высоких нормальных напряжений на форму фрагментов:

a — только в центре образца; *b* — на большей части поверхности образца.

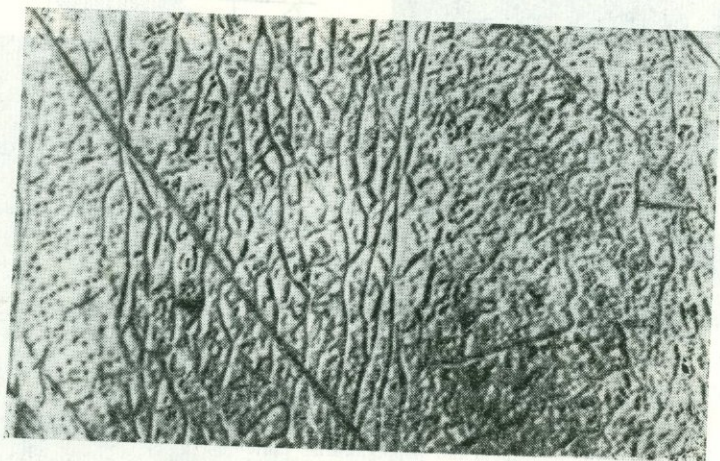


Рис. 105. Дислокационная структура смежных фрагментов первого порядка, $\times 250$.

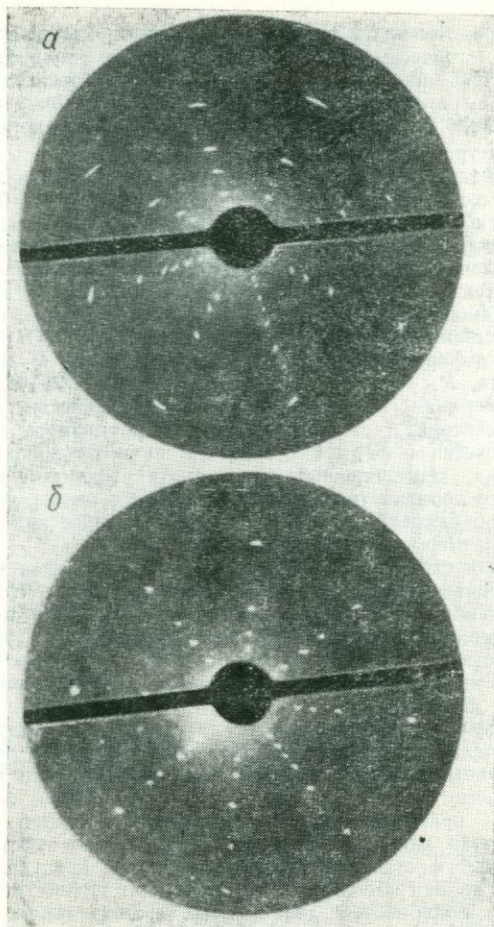


Рис. 106. Эпиграмма кристалла LiF при 525 °С.

a — изогнутого (симметрия формы пятен согласуется с группой морфологической симметрии m , присутствуют все отражения, так как пространственная группа симметрии кристалла не изменяется); *b* — после разгибания (получает симметрию $4m$).

Рис. 107. Вершинник растворения :001: на шаре, приготовленном из пластически деформированного кристалла, $\times 20$.



границы без центра, так как в противном случае переориентировка областей невозможна. Гониометрически установлено, что осью поворота двух смежных фрагментов является направление [111], общей плоскостью (границей) являются (hkl) зоны [111] и граница имеет симметрию m' . Угол поворота колеблется от 7 до 13°. Суммарную симметрию такого образования можно охарактеризовать двойниковой симметрией $\bar{3}m'$.

На первых стадиях деформирования ($\gamma=0,1\div 0,2$) напряжения в образце можно связывать с действием плоского тензора (2). При $\gamma=0,3\div 0,5$ происходит разгибание и прогибание некоторых участков образца и на первый план выдвигается действие нормальных напряжений, различных в разных точках кривой поверхности. Оболочка, следовательно, должна образовываться только за счет действия плоскостей скольжения, находящихся под углом 45° к направлению усилия. Неоднородность работы этих плоскостей приводит к образованию фрагментов типа «иррациональных двойников» Бриллиантова—Обреимова. Это положение проверено деформацией при условиях $R_p \ll R_m$ и $R_p \gg R_m$ (R_p — радиус кривизны пуансона, R_m — радиус кривизны матрицы). Результаты деформации (рис. 104) подтвердили положение о том, что воздействие является комбинацией полярного вектора с симметрией ∞m и двумерного полярного тензора (∞m), что согласуется с формой отпечатков пуансона (рис. 94). Чем больше площадь отпечатка, тем шире область, занятая крестообразной штриховкой. Фрагменты первого порядка (рис. 101, а) образуются позже, чем фрагменты второго порядка, и показывают, что процесс фрагментации кристалла идет в сторону увеличения размеров элементов текстуры.

Дислокационная структура деформированного кристалла изучалась методом избирательного травления (рис. 105). Два смежных фрагмента различаются степенью развития межкристаллических границ, что связано с неодинаковым диффузионным движением краевых и винтовых дислокаций. Следовательно, полигонизация способствует повороту решетки в смежных фрагментах и должна рассматриваться как необходимая составная часть механо-ориентационного процесса [Степанов А. В., 1953 г.].

Симметрия деформированного кристалла является симметрией его текстуры, которая наследуется от исходного монокристалла и представляет собой пирамидальные подгруппы исходной точечной группы симметрии кристалла. Рентгенограммы пластически изогнутых кристаллов (рис. 106) и формы растворения шаров (рис. 107), приготовленных из различных областей деформированного кристалла, отражают как симметрию текстуры, так и неизменность атомной структуры отдельных фрагментов деформирующегося кристалла. Следовательно, эффект Степанова вызван появлением ацентрических границ между фрагментами, что согласуется с полярностью двойниковых границ кристаллов этого класса симметрии. Двойниковые границы могут быть границами кручения и наклона. В первом случае граница образована только винтовыми дислокациями, во втором — только краевыми. Этот вопрос более подробно рассмотрен ниже.

Морфология пластически деформированного кристалла

Симметрия и форма текстур деформированного кристалла являются двумя сторонами его кристалломорфологии, отражающей физические закономерности пластической деформации. Расширенное учение о формах кристаллов [58] позволяет описать формы текстур, возникающих при пластической деформации, и обнаружить закономерности в «незакономерных» переориентировках типа сбросов или иррациональных двойников.

Так как на поверхности деформированного кристалла возникает штриховка, представляющая собой ребра между переориентированными фрагментами, то морфология описывается плоскими реберными формами и их физическими разновидностями. Объемное описание текстуры дается при помощи каркасных реберных форм [28].

Морфология. В кубическом кристалле класса $m\bar{3}m$ имеется семь простых форм, симметрия которых описывается пятью группами: $4mm$, $3m$, $2mm$, m и 1. Рассмотрим последовательно внешнюю морфологию деформированных пластин, вырезанных параллельно различным граням.

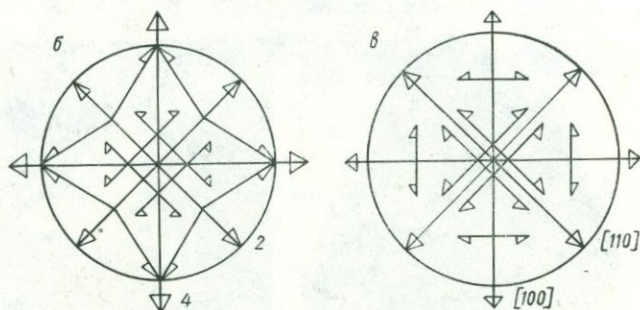
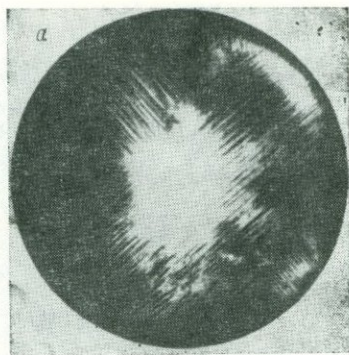


Рис. 108. Пластически деформированные кристаллы типа NaCl (а) и морфологическая схема поверхностей (б, в).

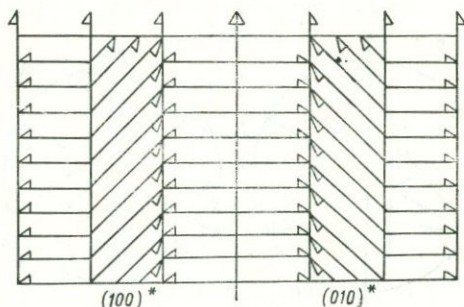


Рис. 109. Морфологическая схема фрагментов на спайном сколе, показанном на рис. 101.

Куб. Симметрия грани $4mm$. Реберный узор на поверхности $(001)^*$ состоит из двух простых форм (рис. 108). Одна из форм является тетрагональной реберной звездой, вторая — удвоенным тетрагональным реберным пучком. Особенностью таких узоров является их мультипликативность (упорядоченная мозаика). Для их описания применима симметрия подобия [72]. Подобие в текстурном реберном узоре согласуется с неоднородностью пластически деформированного кристалла. На поверхностях $(100)^*$ наблюдаются еще две формы (рис. 98). На поверхностях $(110)^*$ реберный узор, показанный на рис. 98, трансформируется в узор, показанный на рис. 109. Возникновение отмеченных реберных форм тесно связано с процессом пластического течения кристалла. Для установления этой связи на образец перед деформацией наносили концентрические

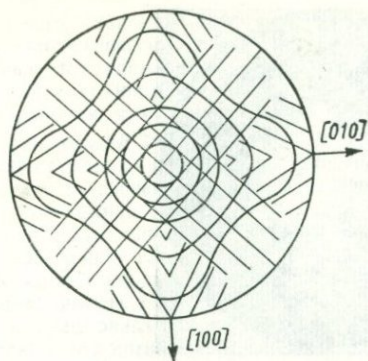


Рис. 110. Связь формы текстурного реберного узора с формой окружностей, искаженных деформацией грани куба ($\gamma=0,5$).

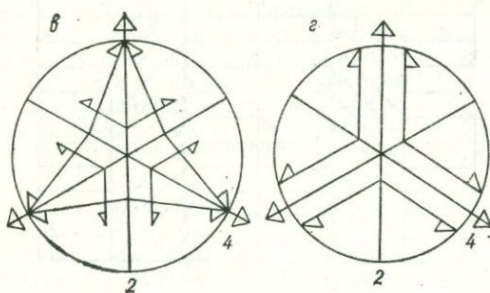
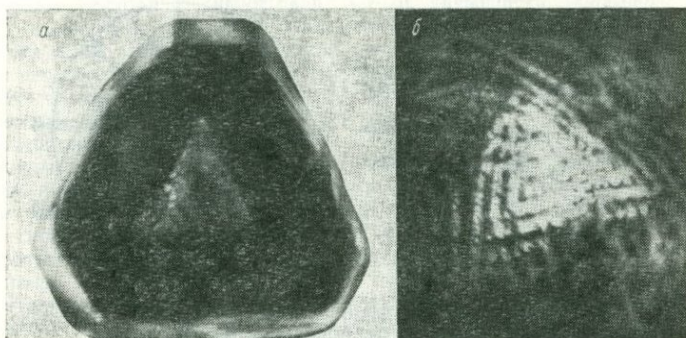


Рис. 111. Октаэдр с отпечатком матрицы и пуансона.

a — схема деформации; *б* — текстурный реберный узор с преимущественным развитием тригонального реберного пучка; *в* — схема $(111)^*$; *г* — схема $(11\bar{1})^*$. Реберный пучок нецентросимметричен.

окружности, которые после деформации сохранялись только в области пересечения реберных пучков. За пределами этой области они превращались в сложные кривые, формы которых подобны сечениям поверхности модулей Юнга гранью куба (рис. 93), но повернуты на 45° (рис. 110).

Деформация происходит в две стадии, различные по симметрии напряженного состояния. Эти стадии фиксируются реберными формами тетрагональной сингонии, так как тензор напряжений переводит исходный кристалл в тетрагональный с симметрией $4mm$. Две плоские реберные формы, представляющие собой границы между фрагментами, на основании изучения сколов по (100) легко переводятся в каркасные формы. Первая стадия характеризуется формами плоская звезда 23 и $T8O_{sa}$ (29), вторая — $T8D_h$ (11), $T8P_0$ (14).

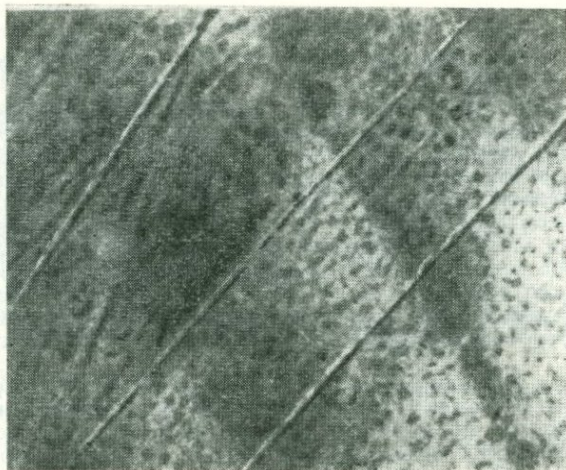


Рис. 112. Полосы двойного лучепреломления на грани (111) деформированного кристалла LiF.

Линии соответствуют направлениям [110]. Поляризованный свет. $\times 300$.

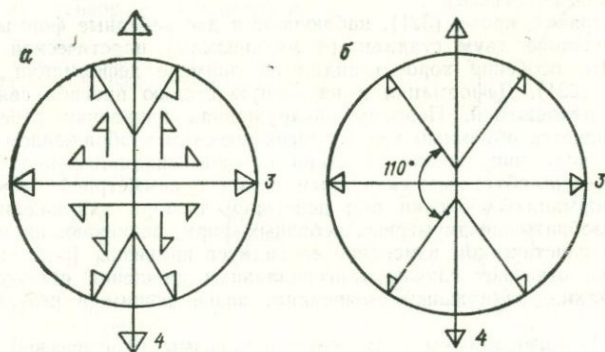


Рис. 113. Схема деформированных граней.

$a - (110)$; $b - (\bar{1}\bar{1}0)$; 3, 4 — направления к полюсам симметрии.

Октаэдр. Симметрия грани $3m$. Симметрия морфологического реберного узора после деформации сохраняется. Узор состоит из двух плоских реберных форм: удвоенного тригонального реберного пучка и тригональной реберной звезды (рис. 111). На вогнутой поверхности наблюдается реберный пучок, повернутый относительно реберного пучка на выпуклой поверхности на 60° . Реберная звезда на вогнутой поверхности никогда не наблюдается. Следовательно, «центр симметрии» как бы сохраняется в деформированном кристалле только для одной формы. Реберная звезда связана с полярно-векторным воздействием, а реберный пучок — с полярно-тензорным. По аналогии с кубом при деформации октаэдра узор последующей текстуры включает узор предыдущей. Наблюдения над кинематикой прогиба показали отсутствие резкой анизотропии пластических движений. Кручение торца незначительно. Отделить текстуру звезды от текстуры пучка, как это делалось для куба, не возможно ни при каких γ . Фестоны почти не заметны, так что октаэдр по пластическим свойствам почти изотропен.

Оптические аномалии распределялись в соответствии с плоской бесконечной группой C_{3v}^{11} , что хорошо видно только при больших радиусах кривизны кристаллов NaCl (рис. 112).

Ромбододекаэдр. Симметрия грани $2mm$. Реберный текстурный узор характеризуется двумя реберными формами (рис. 113). Вместо фестонов отмечены полукруглые участки, свободные от штриховок и расположенные вблизи стереографических центров граней октаэдра, если с центром проекции совмещена проекция направления [110].

Тетрагексаэдр, тригон-триоктаэдр, тетрагон-триоктаэдр. Симметрия граней m . Текстурные реберные узоры согласуются с симметрией разреза. На поверхности (210) реберные формы представляют собой элементы текстурного реберного узора куба и ромбододекаэдра. На ориентациях (221) реберный узор образует комбинацию элементов текстуры ромбододекаэдра и октаэдра, а на поверхности (211) — промежуточную между кубом и октаэдром.

Гексооктаэдр (321). Симметрия грани 1 . Деформация разреза асимметрична. Усилие приложено по направлению, не совпадающему ни с одним из элементов симметрии. Возникающий асимметричный реберный узор состоит из одних монореберников, принадлежащих текстурам реберных узоров трех основных ориентаций — куба, октаэдра и ромбододекаэдра.

Аналогичные узоры наблюдались для текстур деформации кристаллов CsI, Si, Ge, CaF₂. Реберные узоры на CsI нечеткие.

Обобщение реберных узоров

На всех гранях, кроме (321), наблюдаются две реберные формы текстурных узоров, отвечающие двум стадиям (и механизмам) пластической деформации кристалла. Это особенно хорошо видно на примере деформации разрезов по (210), (211), (221). Деформация в начальную стадию прогиба связана с плоским полем напряжений. Поэтому обнаруженная каркасная реберная форма $T8O_{sa}$ (29) является объемным кристаллографическим изображением деформаций при плоском поле напряжений. Заменяв плоское скалярное поле напряжений с симметрией ∞m объемным скалярным полем с симметрией $\infty/\infty m$, получим плоскую деформацию оболочки под действием тензора напряжений (1), т. е. трехмерное изображение двумерных реберных форм, возникающих на замкнутой оболочке при пластическом изменении ее радиуса кривизны (рис. 114, а). Звезды и диреберники отвечают случаю тангенциальных смещений оболочки, а пучки и парареберники — радиальным смещениям, возникающим в результате упрочнения.

На рис. 115 изображены возможные механизмы пластической деформации кристалла, пластическая анизотропия данного кристалла в любой кристаллографической ориентации, изменение механических свойств кристалла в зависимости от появления того или иного реберного узора и возможные пути упрочнения кристаллических пластинок при помощи деформаций. На рисунке выявляется пластическая индикатриса кристалла, отсутствующая до сих пор в разделе физической кристаллографии, устанавливаются взаимосвязь принципов Неймана и Кюри при пластической деформации и пути определения кристаллографических ориентаций по наблюдениям форм штриховок деформированного кристалла.

Морфология пластически деформированного кристалла должна включать следующие случаи рассмотрения текстурных реберных форм: 1) двумерные для плоского поля напряжений; 2) трехмерные для плоского поля напряжений; 3) двумерные для объемного поля напряжений; 4) трехмерные для объемного поля напряжений. В каждом из этих случаев можно найти однозначное соответствие реберных форм компонентам тангенциальных σ_{11} и нормальных σ_{33} напряжений и представить морфологию пластически деформированного галита в виде таблицы. Аналогичные «пластические индикатрисы» можно получить и для кристаллов других веществ при деформациях с контролируемой симметрией напряжения. На рис. 114, б, например, такие индикатрисы построены по фигурам удара на кристаллах иодистого цезия.

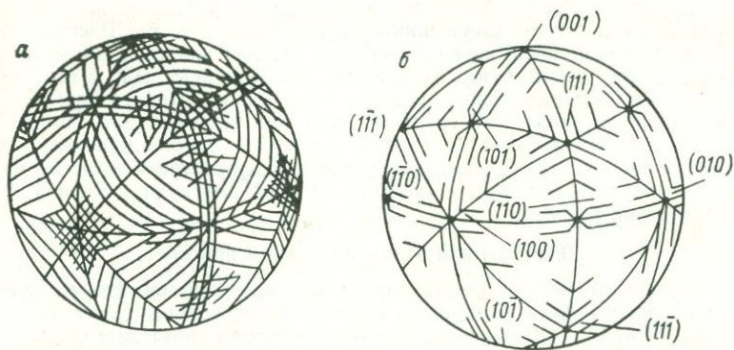


Рис. 114. Обобщенная морфологическая интерпретация пластически деформированных кристаллов.

a — со структурой типа NaCl; *b* — со структурой типа CsCl в поле напряжений, образующих тензор с симметрией $\infty/\infty m$.

Рис. 115. Геометрическая интерпретация напряженного состояния образца, находящегося под действием сил, образующих полярный тензор с симметрией $m\infty:m$.

E — эволюта опорной кривой; *L* — опорная кривая; *K* — кристалл из фрагментов различных порядков.

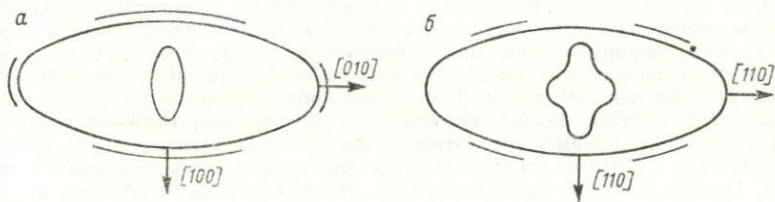
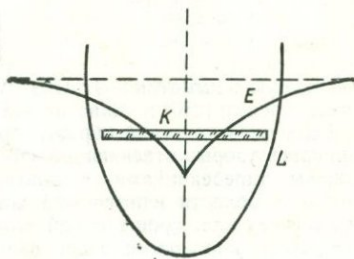


Рис. 116. Отпечатки пуансона и матрицы при ориентировке образца эллиптической формы по осям четвертого (*a*) и второго (*b*) порядков.

Геометрические соотношения между напряженными состояниями и текстурными узорами можно получить на основе представлений Дж. Ная [1953 г.]. Геометрическим образом полярного тензора с симметрией $m\infty:m$ является эллипсоид вращения, представляющий собой опорную поверхность при деформации. При центрально-кольцевом прогибе следует рассматривать сечение опорной поверхности (эллипсоида) деформирующим образом (рис. 116). Части образца, расположенные вдоль $[100]$, $[110]$, $[hk0]$, можно считать испытывающими круговой изгиб. Области образца, ограниченные контуром опорного эллипсоида, испытывают окружной изгиб. Области образца, ограниченные эволютой эллипсоида, испытывают высокие нормальные напряжения, при которых образуются реберные текстурные узоры типа пучков и парареберников. При центрально-кольцевом прогибе деформация в начальной стадии происходит с образованием переориентированных областей, а не путем перегиба линий скольжения. Штриховка $T8D_h(11) + T8I_0(14)$ является сбросом «иррационального двойника» или, согласно Ф. Франку и А. Стро [1952 г.], — сбросом сброса. Соотношения между

радиусом кругового сечения опорного эллипсоида и радиусом пластинки могут изменяться различными соотношениями между R_m , R_p и R_k . Рассмотрение деформации с дислокационной точки зрения и с позиций принципа симметрии Кюри согласуются между собой. Опорные кривые, рассмотренные Дж. Наем, являются геометрическими образами сечений поверхностей тензора второго ранга.

Таким образом, наивысшей группой симметрии текстуры пластически деформированного кристалла является группа симметрии самого кристалла. Однако в каждом конкретном случае, задавая различную симметрию внешних напряжений, можно получить текстуры с симметрией всех подгрупп исходной точечной группы симметрии разреза.

Текстуры при эллипсоидальном прогибе

Если группа симметрии воздействия есть подгруппа симметрии кристаллографической ориентации, то группа симметрии реберного узора описывается подгруппой $G' \cong G^0$. Обозначим группу симметрии воздействия G^t . Тогда: 1) $G' = G^0$, если $G^t \cong G^0$; 2) $G^0 \cong G'$, если $G^0 \cong G^t$. Следовательно, $G^t \cong G'$. Поэтому для грани куба симметрия текстурного реберного узора должна быть не выше $2mm$ и не ниже 2. В первом случае тензор напряжений приведен к главным осям, т. е. оси координат совпадают с кристаллографическими осями четвертого или второго порядка. Во втором случае тензор не приведен к главным осям и имеет форму

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

отвечающую симметрии 2. Поэтому кристаллическая пластинка эллиптической формы с осями $[210]$ должна не только изгибаться, но и закручиваться.

Если эллиптический образец ориентирован по осям куба, то при деформации возникают узоры, отвечающие симметрии $2mm$. Области наибольшей кривизны сложены диреберниками, а центральная часть образца — реберными пучками, которые в области наименьшей кривизны состоят из элементов пересекающихся пучков, представляющих собой диреберники. Текстура центральной части сходна с узором, возникающим в центральной части образца при прогибе круглой пластинки. Симметрия деформированного кристалла противоречива. В центральной части он стремится получить шаровой изгиб вместо эллиптического. Отпечатки пуансона свидетельствуют о том, что области, расположенные вдоль короткой оси эллипса, деформированы максимально (рис. 116). Это является причиной превращения диреберника (элемент тетрагональной звезды) в парареберник, соответствующий тензору $m2:m$. При ориентировке эллипса по $[110]$ пластинка стремится изогнуться вокруг диагональных направлений $[100]$, благодаря чему области, расположенные у концов длинной оси эллипса, приподнимаются (рис. 116, б). Реберные узоры являются элементами тетрагональных пучков и звезд. Пересекающиеся парареберники в центральной части образца не наблюдаются. Симметрия текстуры остается $2mm$, а число реберных форм увеличивается до четырех.

При деформации пластинки, вырезанной параллельно (110) , симметрия кристалла и воздействия равны. Если большая ось эллипса совмещена с $[001]$, то узоры весьма нечетки и их интерпретация затруднительна. На рис. 117 показана

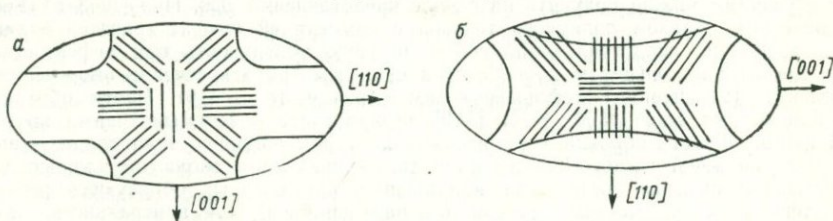


Рис. 117. Схема реберных узоров и контуров областей максимального светорассеяния, возникающих при эллипсоидальном прогибе грани (110) .

Показаны две различные ориентировки.

схема этих узоров на (110)*. Кривыми ограничены области максимального светорассеяния, в которых происходило тонкое скольжение. Оба варианта деформации пластины по (110) дали нечеткую картину реберных узоров. Создается впечатление, что кристалл слабо реагирует на различие в ориентировке эллипса при равенстве групп симметрии воздействия и разреза.

Текстуры при круговом изгибе

Круговой изгиб кристаллического стержня является частным случаем центрально-кольцевого прогиба пластинок. Симметрия воздействия отвечает группе $2mm$. При изгибе стержня с незашемленными краями нормальные напряжения σ_{33} малы. Деформацию можно полностью изучить при помощи симметрии двумерных полярных тензоров. Кристалл деформировался на опорах в виде двух параллельных валков вокруг цилиндрического пуансона. Видимая симметрия исходного кристалла отвечала mmm . Отмеченная выше симметрия воздействия допускает существование правых и левых форм деформированных кристаллов.

Ниже будут рассматриваться только изгибы (100) [001], (100) [011], (100) [021] и (111) [110]. Такая запись означает, что плоскость изгибается вокруг соответствующего направления.

Текстурные реберные узоры из линий скольжения описываются теми же способами, что и морфология переориентированных областей, возникающих при прогибе пластинки. Скольжение, происходящее при круговом изгибе стержня, создает разориентировку фрагментов около 1° [Шаскольская М. П., Сунь Жуйфан, 1959 г.]. Линейные размеры фрагментов 0,1—0,3 мм.

Изгиб по системе (100) [001]. Деформацию проводили при 500°C . В поляризованном свете наблюдалась картина макроскопических напряжений, связанная со скольжением. Криволинейность текстурных узоров маскирует проявление морфологической сущности картины. Поскольку кривизна кристалла остается даже тогда, когда исчезают дислокации (в процессе отжига), то сама кривизна кристалла не является морфологическим признаком, определяющим его деформированное состояние. Поэтому для описания изогнутых стержней применяли обычные прямолинейные реберные формы, которые наблюдаются при разгибании изогнутого кристалла из температур его изгиба. Грань (100)* деформированного кристалла состоит из двух реберных форм: тетрагональных реберных пучков и диреберников. Грань (001)* покрыта монореберниками. При круговом изгибе стержня морфология сильно обедняется. По симметрии круговой изгиб аналогичен эллипсоидальному прогибу пластинки ($2mm$). На рентгенограммах изогнутых кристаллов присутствует только вертикальная плоскость симметрии (рис. 106). Симметрия изогнутого кристалла $2mm$, а разогнутого — mmm .

Изгиб по системе (001) [110]. Кривизна кристалла в этом случае меньше, чем при изгибе вокруг [100], что согласуется с данными, полученными при центрально-кольцевом прогибе круглых пластинок. Если кристалл деформировать в условиях высоких нормальных напряжений, то на поверхности (001)* возникает характерный текстурный реберный узор. Фрагменты вытянуты вдоль направления $[hk0]$, причем проявляется то правая, то левая системы. Текстурный реберный узор при свободном изгибе кристалла аналогичен предыдущему, но возникающие фрагменты более крупные.

Изгиб по системе (001) [210]. Симметрия изогнутого кристалла 2. Кристалл закручивается, и возникают правые и левые формы. Кручение кристалла наблюдается при высоких температурах и при изгибе под водой. Угол закручивания не зависит от ϕ_{hk0} и колеблется от 30 до 40° .

Изгиб по системе (111) [110]. В этих условиях кристалл легко растрескивается. Форма спайных выколов близка к кривоугланному «ромбоэдру», у которого сохраняется только одна плоскость симметрии. Поверхности, перпендикулярные к этой плоскости, остаются плоскими, а наклонные к ней становятся вогнутыми и выпуклыми. По симметрии спайных выколов деформированных кристаллов можно определять условия деформации, что особенно полезно при работе с природными образцами.

Симметрии внутренних границ пластически деформированных кристаллов

Геометрические взаимоотношения между фрагментами деформированного кристалла, изученные гониометрическим методом на спайных выколах со слабо полигонизованными фрагментами, показывают, что общей осью поворота фрагментов на угол $10-13^\circ$ является направление, близкое к [111] или [100]. А. В. Степанов и А. В. Донской [1954 г.] обнаружили разориентировки фрагментов с осью поворота [110]. Очевидно, что взаимная ориентировка фрагментов закономерна. Закономерные срастания кристаллов одного вещества принято называть двойниками.

Для класса $\bar{m}\bar{3}m$ возможны двойниковые группы $6'/m'mm'$, $4'/mmm'$, $4/mm'm'$, $\bar{3}m'$, $mm'm'$, $2'/m'$. Две первые являются как бы жесткими, а остальные нежесткими. Жесткими являются двойники, которые при вращении одного индивида относительно другого изменяют группу симметрии двойника. При повороте индивидов шпинелевого двойника вокруг $\bar{3}$ симметрия его ($6'/m'mm'$) изменяется до $\bar{3}m'$. Двойник $\bar{3}m'$ не является жестким, так как при повороте вокруг $\bar{3}$ на произвольный угол группа симметрии не меняется.

Пластическая деформация кристалла класса $\bar{m}\bar{3}m$ происходит за счет образования нежестких двойников и соответствующих им внутрикристаллических границ:

Группа симметрии двойников	$2'/m'$ m'	$mm'm'$ $2'2'$	$\bar{3}m'$ $3'2'$	$4/mm'm'$ $4'2'2'$
Симметрия границ	$2'$	$2'mm'$ $2'$	m' $2'$	$2'mm'$ $2'$

Группы симметрии границ $2'mm'$, $2'$, m' являются границами наклона, а группы симметрии без плоскостей — границами кручения.

На основании изложенного легко устанавливается ошибочность классификации механических двойников по М. В. Классен-Неклюдовой [21]. Она выделяет двойники с изменением и без изменения формы. Двойники кварца, приводимые в указанной классификации в качестве примеров двойникового без изменения формы, на самом деле демонстрируют противоположное. Так, у дофинейского двойника грани ромбоэдра превращаются в грани «гексагональной пирамиды», а при двойниковании по бразильскому закону грани трапецеэдра превращаются в грани «тригонального скаленоедра».

С точки зрения морфологии более правильна классификация двойников, основанная на симметрии. Тогда изменение формы двойника подчиняется суммарной (двухцветной) симметрии, а форма индивидов, входящих в двойник, остается прежней.

Рассмотрение двойникового процесса скольжения не отражает сущности явления. Некоторое внешнее сходство между обоими явлениями возникает лишь тогда, когда деформация простым сдвигом происходит при помощи полисинтетического двойникового. Это породило неправильное моделирование всего процесса [Шмид Е., Боас В., 1938 г.]. Кроме вопросов, связанных с механизмом переориентировки, очень важен процесс срастания переориентированных фрагментов. Переориентировка и срастание, которые обуславливают пластичность, отнесены А. В. Степановым [1953 г.] к механо-ориентационным процессам. Однако любой механо-ориентационный процесс должен контролироваться симметрией, что неизбежно приводит к представлению о двойниковании.*

Кристаллы класса $\bar{m}\bar{3}m$ не могут двойниковаться по (100) и (110) при совпадении одноименных рядов, так как граница в этом случае будет центросимметричной. Однако из этого не следует, что (100) и (110) не могут быть общими плоскостями для двух разориентированных фрагментов. Поэтому при круговом изгибе вокруг [100] торец образца отвечает общей плоскости (100), но внутренней двойниковой границей является ($hk0$), приводящая к двойникам с симметрией $2'mm'$ при срастании и $4/m2'/m'2'/m'$ — при прорастании. Непре-

* Эта точка зрения автора не является общепринятой.— *Ред.*

равность ориентаций границ изогнутого кристалла осуществляется большим набором возможных ($hk0$), что фиксируется рентгенограммами, изображенными на рис. 106. Срастания по $\{hll\}$ и $\{hhl\}$, за исключением прорастания по $\{112\}$, имеют сходные формулы симметрии и реализуются во многих случаях самостоятельно [Степанов А. В., Донской А. В., 1954 г.; Колонцова Е. В., Телегина И. В., 1956 г.] с суммарной симметрией $2m2'/m'2'/m'$. Двойникование по $\{hkl\}$ и $\{hkl\}$ зоны $[111]$ наиболее интересно. Симметрия границы срастания в этом случае отвечает $32'$, $2'$ либо m' , симметрия прорастания — $2'/m'$ либо $32'/m'$. В последнем случае любой поворот решетки вокруг общей оси третьего порядка является двойниковым поворотом, а срастание может происходить по любой плоскости ($h+k=l$) зоны $[111]$, за исключением (110) и (112) . Даже небольшие отклонения от (110) приводят к двойникованию с небольшими углами разориентации, например $4-13^\circ$, что может служить кристаллографической характеристикой механо-ориентационных процессов.

Заключение

Число простых реберных форм отвечает числу механизмов переориентировки кристалла. Наиболее испорченные зоны (границы между фрагментами) кристаллографически закономерны. При фрагментации на границе фрагментов должны возникать новые группы симметрии. Если кристалл был centrosимметричным, то единственная его возможность образовывать фрагменты заключается в потере центра симметрии на границе. Таким образом, дислокации (краевые и винтовые) необходимо рассматривать как элементарные двойники, создающие макроскопическое двойникование. Пластически деформированный кристалл представляет собой двойниковую текстуру, которая описывается симметрией стержней, листов и пространственных групп.

Реберные узоры, отображающие законы двойникования, являются инвариантом кристаллографической ориентации и кинетики деформирования, что согласуется со скачкообразной природой пластической деформации.

Изложенное показывает, что при исследовании пластической деформации кристаллов необходимо учитывать взаимодействие кристаллографической ориентации с полевым тензором на основе принципа суперпозиции симметрии. Это дает возможность предвидеть и описывать симметрию пластически деформированного кристалла, его форму и закономерности внутреннего строения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антонов П. И., Степанов А. В. Свободная и вынужденная кристаллизация при вытягивании монокристаллов из расплава.— В кн.: Материалы Первого совещания по получению полупроводниковых монокристаллов способом Степанова и перспективам их применения в приборостроении. Л., 1968, с. 51—58.
2. Аншелес О. М. Начала кристаллографии. Л., Изд-во ЛГУ, 1952. 276 с.
3. Артемьев Д. Н. Метод кристаллизации шаров и его применение при изучении формы и строения кристаллического вещества.— Труды Петроград. о-ва естествоиспытателей. Отд. геологии и минералогии, 1914, т. 37, вып. 5, с. 59—310.
4. Асхабов А. М. Регенерация кристаллов. Л., Наука, 1979. 176 с.
5. Бакуменко И. Т. О формах скелетного роста на примере кварца из пегматитов.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1962, ч. 91, вып. 6, с. 662—671.
6. Белов Н. В., Неронова Н. Н., Смирнова Т. С. 1651 шубниковская группа.— Кристаллография, 1957, т. 2, вып. 3, с. 315—325.
7. Близнаков Г. Некоторые вопросы теории эпитаксии.— В кн.: Рост кристаллов. Т. 5. М., Наука, 1965, с. 64—73.
8. Бокий Г. Б. Число физически различных простых форм кристаллов.— Труды Лаборатории кристаллографии АН СССР, 1940, № 2, с. 7—37.
9. Варданянц Л. А. Триадная теория двойниковых образований минералов. Ереван, Изд-во АН АрмССР, 1950. 108 с.
10. Войцеховский В. Н. Простой способ осуществления планетарного метода выращивания кристаллов.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1963, ч. 92, вып. 5, с. 587.
11. Гинзбург А. М. Симметрия на шаре. Харьков, ОНТИ, Гос. науч.-тех. изд-во Украины, 1935. 32 с.
12. Глазов А. И. Основы морфометрии кристаллов. Л., Недра, 1981. 147 с.
13. Григорьев Д. П. Онтогенез минералов. Львов, Изд-во Львов. гос. ун-та, 1961. 284 с.
14. Григорьев Д. П., Жабин А. Г. Онтогенез минералов. М., Наука, 1975. 340 с.
15. Доливо-Добровольский В. В. Курс кристаллографии. Л.—М., ОНТИ, Глав. ред. гор.-топлив. и геол.-развед. лит., 1937. 347 с.
16. Заморзаев А. М. Теория простой и кратной антисимметрии. Кишинев, Штиница, 1976. 283 с.
17. Заморзаев А. М., Галярский Э. И., Палистрант А. Ф. Цветная симметрия, ее обобщения и приложения. Кишинев, Штиница, 1978. 275 с.
18. Инденбом В. Л. Фазовые переходы без изменения числа атомов в элементарной ячейке кристалла.— Кристаллография, 1960, т. 5, вып. 1, с. 115—125.
19. Каишев Р., Ненов Д. О теореме Вульфа для кристаллов с винтовыми дислокациями.— В кн.: Рост кристаллов. Т. 5. М., Наука, 1965, с. 59—63.
20. Китайгородский А. И. Органическая кристаллохимия. М., Изд-во АН СССР, 1955. 559 с.
21. Классен-Неклюдова М. В. Механическое двойникование кристаллов. М., Изд-во АН СССР, 1960. 261 с.
22. Копчик В. А. Шубниковские группы. М., Изд-во МГУ, 1966. 723 с.
23. Кюри П. Избранные труды. М.—Л., 1966. 400 с.
24. Леммлейн Г. Г. Морфология и генезис кристаллов. М., Наука, 1973. 328 с.
25. Любалин М. Д., Соколова Н. Г. О симметрии общей формы.— В кн.:

Симметрия в природе. Тезисы докладов к совещанию. Л., ВСЕГЕИ, 1971, с. 243—247.

26. *Любалин М. Д.* О взаимоотношении форм роста и растворения положительных и отрицательных кристаллов.— В кн.: Кристаллогенезис и процессы минералообразования. Л., ЛГИ, 1976, с. 58—65.

27. *Михеев В. И.* Рентгенометрический определитель минералов. М., Госгеолтехиздат, 1957. 868 с.

28. *Михеев В. И., Шафрановский И. И.* Реберные формы кристаллов. Сообщ. 1-е.— Минерал. сб. Львов. геол. о-ва, 1955, № 9, с. 15—24.

29. *Михеев В. И., Шафрановский И. И., Генделев С. Ш.* Реберные формы кристаллов. Сообщ. 3-е.— Зап. Ленингр. гор. ин-та, 1961, т. 38, вып. 2, с. 122—139.

30. *Нардов В. В.* Элементы совмещения.— В кн.: Кристаллография. Вып. 4. Труды Федоровской научной сессии 1953 г. Л., Изд-во ЛГУ, 1955, с. 155—158.

31. *Никитин В. Д.* Особенности процессов формирования минералов при метасоматических явлениях.— В кн.: Кристаллография. Вып. 4. Труды Федоровской научной сессии 1953 г. Л., Изд-во ЛГУ, 1955, с. 47—68.

32. *Палатник Л. С., Папиров И. И.* Ориентированная кристаллизация. М., Металлургия, 1964. 408 с.

33. *Попов Г. М., Шафрановский И. И.* Кристаллография. М., Высшая школа, 1964. 370 с.

34. *Рундквист Д. В.* О комплексных двойниках касситерита.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1959, ч. 88, вып. 3, с. 225—233.

35. *Соколова Н. Г.* Наглядный вывод двойников.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1968, ч. 98, вып. 5, с. 640—644.

36. *Соколова Н. Г.* Морфология двойников минералов.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1971, ч. 100, вып. 1, с. 31—41.

37. *Соколова Н. Г.* Крестообразные двойники кальцита.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1974, ч. 103, вып. 4, с. 487—490.

38. *Соколова Н. Г., Любалин М. Д.* О форме двойников со структурой алмаза.— В кн.: Рост кристаллов. Т. 10. М., Наука, 1974, с. 171—175.

39. *Соболев В. С.* Федоровский метод. М., Госгеолтехиздат, 1954. 264 с.

40. *Стулов Н. Н.* Ориентированная кристаллизация хлористого натрия.— Журн. эксперимент. и теорет. физики, 1939, т. 9, вып. 6, с. 630—633.

41. *Трейбус Е. Б.* О формах растворения кристаллов.— Кристаллография, 1963, т. 8, вып. 6, с. 933—935.

42. *Федоров Е. С.* Начала учения о фигурах.— Зап. СПб минерал. о-ва, 1885, ч. 21, с. I—VIII, 1—277.

43. *Федоров Е. С.* Курс кристаллографии. СПб., Изд-во К. Л. Риккер, 1901. 438 с.

44. *Федоров Е. С.* Соображения о законах двойникования.— Зап. гор. ин-та, 1910, т. 2, с. 395—396.

45. *Фекличев В. Г.* Микросталломорфологический анализ. М., Наука, 1966. 264 с.

46. *Ферсман А. Е.* Кристаллография алмаза. Л., Изд-во АН СССР, 1955. 566 с.

47. *Франк-Каменецкий В. А.* Единая система обозначения элементов кристалла.— В кн.: Минерал. сб. Львов. геол. о-ва, 1962, № 16, с. 384—387.

48. *Цинзерлинг Е. В.* Искусственное двойникование кварца. М., Изд-во АН СССР, 1961. 160 с.

49. *Шафрановский И. И.* Кристаллография округлых алмазов. Л., Изд-во ЛГУ, 1948. 131 с.

50. *Шафрановский И. И.* Формы кристаллов.— Труды Ин-та кристаллографии АН СССР, 1948, вып. 4, с. 13—166.

51. *Шафрановский И. И.* Формы природного растворения кварца.— В кн.: Минерал. сб. Львов. геол. о-ва, 1949, № 3, с. 53—61.

52. *Шафрановский И. И., Осадчий Б. Я.* О закономерном срастании кристаллов кварца из тектонической брекчии Воьльни.— В кн.: Минерал. сб. Львов. геол. о-ва, 1950, № 4, с. 269—274.

53. *Шафрановский И. И., Сальдау Э. П.* Чечевицеобразные кристаллы гипса из Крыма.— В кн.: Кристаллография. М., Углетехиздат, 1952, с. 177—188.

54. *Шафрановский И. И.* Внешняя симметрия реальных кристаллов и симметрия питающей среды.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1954, ч. 83, вып. 3, с. 198—211.
55. *Шафрановский И. И.* Внешняя симметрия пирамид роста кристаллических граней.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1955, ч. 84, вып. 3, с. 349—353.
56. *Шафрановский И. И.* Кристаллы минералов. Ч. 1. Плоскогранные формы. Л., Изд-во ЛГУ, 1957. 220 с.
57. *Шафрановский И. И.* Ложные формы кристаллов и их минералогенетическое значение.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1959, ч. 83, вып. 1, с. 13—20.
58. *Шафрановский И. И.* Лекции по кристалломорфологии минералов. Львов, Изд-во Львов. гос. ун-та, 1960. 164 с.
59. *Шафрановский И. И.* Кристаллы минералов. Ч. 2. М., Госгеолтехиздат, 1961. 332 с.
60. *Шафрановский И. И., Письменный В. А.* Обобщенные формы двойников образований.— Кристаллография, 1961, т. 6, вып. 1, с. 31—42.
61. *Шафрановский И. И.* Дополнительные замечания к кристалломорфологии двойников.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1963, ч. 92, вып. 6, с. 703—705.
62. *Шафрановский И. И., Алявдин В. Ф., Боктунов А. И.* Двойники алмаза тетраэдрического облика.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1966, ч. 95, вып. 1, с. 575—578.
63. *Шафрановский И. И.* Очерки минералогической кристаллографии. Л., Недра, 1974. 152 с.
64. *Шефталъ Н. Н.* Аксессуары роста.— Труды Ин-та кристаллографии АН СССР, 1947, № 3, с. 55—70.
65. *Шефталъ Н. Н.* К вопросу о реальном кристаллообразовании.— В кн.: Рост кристаллов. Т. 3. М., Изд-во АН СССР, 1961, с. 9—21.
66. *Шубников А. В.* Как растут кристаллы. М.—Л., Изд-во АН СССР, 1935. 75 с.
67. *Шубников А. В.* Симметрия. М.—Л., Изд-во АН СССР, 1940. 176 с.
68. *Шубников А. В.* Кварц и его применение. М.—Л., Изд-во АН СССР, 1940. 194 с.
69. *Шубников А. В.* Симметрия и антисимметрия конечных фигур. М.—Л., Изд-во АН СССР, 1951. 172 с.
70. *Шубников А. В., Желудев И. С., Константинова В. П.* Исследование пьезоэлектрических текстур. М.—Л., Изд-во АН СССР, 1955. 189 с.
71. *Шубников А. В.* Симметрия и антисимметрия стержней и семиконтинуумов с главной осью бесконечного порядка и конечными переносами вдоль нее.— Кристаллография, 1959, т. 4, вып. 3, с. 279—285.
72. *Шубников А. В.* Симметрия подобия.— Кристаллография, 1960, т. 5, вып. 4, с. 489—496.
73. *Шубников А. В.* Симметрия и физические свойства пирамид роста.— Кристаллография, 1961, т. 6, вып. 3, с. 319—322.
74. *Шустов А. В.* Особенности симметрии некоторых двойников роста исландского шпата.— Зап. Всесоюз. минерал. о-ва, 1965, ч. 94, вып. 3, с. 344—347.
75. *Aminoff G., Broome B.* Strukturtheoretische Studien über Zwillinge. I.— Z. Kristallogr., 1931, Bd. 80, № 5—6, S. 355—376.
76. *Bollmann W.* Crystal defects and crystalline interfaces. Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag, 1970. 254 p.
77. *Buerger M. J.* Translation-gliding in crystals.— Amer. Mineralogist, 1930, vol. 15, № 2, p. 45—64.
78. *Boldirev A. K.* Are there 47 or 48 simple forms possible on crystals? — Amer. Mineralogist, 1936, vol. 21, № 11, p. 731—734.
79. *Currien H., Le Corre Y.* Notations des macles à l'aide du symbolisme des groupes de couleurs de Choubnikov.— Bull. Soc. franc. Miner. Crist., 1958, vol. 81, p. 126—132.
80. *Curien H., Donnay J. D. H.* The symmetry of the complete twin.— Amer. Mineralogist, 1959, vol. 44, № 9—10, p. 1067—1070.
81. *Egli P. H., Johnson L. B.* Ionic salts.— In: The art and science of growing crystals. New York, London, 1963, p. 194—213.
82. *Ellis R. C.* Etching of single crystal germanium spheres.— Journ. Appl. Phys., 1954, vol. 25, № 12, p. 1497—1499.

83. *Frank F. C.* On the kinematic theory of crystal growth and dissolution processes.— In: Growth of crystals. Proc. internat. Conf. on Crystal Growths. New York, London, 1958, p. 41—419.

84. *Friedel M. G.* Sur la croissance et la décroissance des cristaux dans une solution.— Bull. de la Soc. Franc. de Miner., 1925, p. 12—69.

85. *Fron del C.* The systems of mineralogy. Vol. 3. Silica minerals. New York, London, John Wiley and Sons, inc., 1962. 334 p.

86. *Goldschmidt V., Wright Fr. E.* Über Lösungskörper und Lösungs-Geschwindigkeiten.— N. Jahrb. Miner., 1904, Beil., Bd. 18, p. 335—355.

87. *Hartmann P., Perdok W. G.* On the relations between structure and morphology of crystals. I.— Acta Cryst., 1955, vol. 8, pt. 1, p. 49—52.

88. *Hartman P.* On the morphology of growth twins.— Z. Kristallogr., 1956, vol. 107, № 3, S. 225—237.

89. *Herring C.* Some theorems on the free energies of crystal surfaces.— Physical Review, 1951, vol. 82, № 1, p. 87—95.

90. *Holser W. T.* Point groups and plane groups in a two-sided plane and their subgroups.— Z. Kristallogr., 1958, Bd. 10, № 4, S. 266—281.

91. *Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen.* Redaktion Sausschuss: W. H. Bragg, von Laue, C. Hermann. Bd. 1. Gruppen theoretische Tafeln. Berlin, Borntraeger, 1935. 452 S.

92. *Kleber W.* Strukturfragen des Kristallwachstums.— Wiss. Z. Humboldt- Univ. Berlin, Math.-naturwiss., Beil., 1964, 13, № 1, S. 17—24.

93. *Le Corre J.* Les groupes de symetrie Bicolores et leurs applications.— Bull. Soc. franc. Miner., Crist., 1958, vol. 81, p. 120—125.

94. *Mügge O.* Beiträge zur Kenntnis der Strukturflächen des Kalkspathes und über die Besichtigungen derselben untereinander und zur Zwillingsbildung am Kalkspath und einigen anderen Mineralien.— N. Jahrb. Miner., 1883, Bd. 1, № 1, S. 32—54.

95. *Parker R. L.* Über die morphologische Bedeutung des akzessorischen Stoffansatzes.— Z. Kristallogr., 1932, Bd. 82, № 3—4, S. 239—257.

96. *Pond R. C., Bollman W.* The symmetry and interfacial structure of bicrystals.— Phil. Trans. Roy. Soc., Math. and Phys. Sci., 1979, vol. 292, № 1395, p. 449—472.

97. *Schaake J.* Zwillingsbildung als gittergeometrischzahlen-theoretisches Problem mit Anwendung auf einige reale Fälle.— Z. Kristallogr., 1938, Bd. 98, № 2, S. 143—167.

98. *Williams A. F.* The genesis of the diamond. Vol. 1. London, E. Benn, 1932. 352 p.

99. *Wittke O., Carrido J.* Symetrie des polyedres polychromatiques.— Bull. Soc. franc. Miner., Crist., 1959, t. 82, № 7—9, p. 223—230.

100. *Wolf G. A., Gualtieri J. G.* PBC vector, critical bond energy ratio and crystal equilibrium form.— Amer. Mineralogist, 1962, vol. 47, № 5—6, p. 562—584.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Введение	7
Симметрия и морфология монокристаллов	10
Симметрия идеальных и реальных форм кристаллов	—
Простые формы кристаллов	17
Гранные формы	18
Реберные формы	35
Вершинные формы	41
Внешняя и внутренняя морфология плоскогранных кристаллов на стереографической проекции	42
К морфологии округлых кристаллов	50
Изображение округлых форм кристаллов на стереографической проекции	61
Особенности морфологии отрицательных кристаллов	62
К геометрии скелетных кристаллов	64
Проявление бесконечной симметрии на кристаллах	68
Цветная симметрия и формы реальных кристаллов	73
Экспериментальное изучение формы кристаллов	79
Методы исследования формы кристаллов	—
Формы роста и растворения кристаллов	84
Морфология вершинников и их связь с фигурами роста и травления	104
Проявление неоднородностей кристалла при растворении и обезвоживании	108
Исследование форм кристаллов при направленной кристаллизации	112
Заключение	127
Симметрия и морфология двойников	130
К геометрической теории двойников	—
Определение термина «двойник»	134
Классификация двойников, основанная на их симметрии	136
Вывод точечных кристаллографических групп симметрии двойников, возможных для каждого кристаллографического класса симметрии компонента	141
Симметрия двойниковых стержней (полисинтетических двойников)	146
Законы двойникового кристаллов	154
Разновидности законов двойникового кристаллов	158
Обобщение групп симметрии двойников	163
Симметрия комплексов	168
Симметрия двойниковых границ	172
Простые формы двойников	185
Симметрия простых форм компонентов и двойников	191
О входящих углах двойников	196
Морфологическая классификация двойников	198
К морфологии двойников срастания и полисинтетических двойников	205

Ложные формы двойников	208
Внутренняя морфология двойников	210
Изображение двойников на стереографической проекции	215
Минералогические примеры законов двойникования и их разновидностей	219
Взаимная ориентировка кристаллов, вызванная эпитаксией	227
Заключение	239
Некоторые задачи морфологии кристаллов	242
Приложения	247
1. Таблицы реберных форм	—
2. К выводу вершин и ребер при пересечении простых гранных форм	253
3. Таблица гранных двухцветных форм	256
4. Вывод и систематика точечных дефектов структуры кристаллов	—
5. Некоторые особенности скольжения в кристаллах и симметрия дислокаций	265
6. Вывод симметрии фигур травления в зависимости от симметрии дислокаций для кристаллов класса $m\bar{3}m$	268
7. Симметричные закономерности пластической деформации кристаллов	271
Список литературы	290

Владимир Андреевич Мокиевский

МОРФОЛОГИЯ КРИСТАЛЛОВ

Методическое руководство

Редактор издательства Л. А. Рейхерт
Переплет художника В. Т. Левченко
Технический редактор Н. П. Старостина
Корректор Н. Д. Баримова

ИБ № 4852

Сдано в набор 20.01.83. Подписано в печать 13.05.83. М-27914. Формат 60×90^{1/16}. Бумага тип. № 1. Гарнитура литературная. Печать высокая. Усл. печ. л. 18,5. Усл. кр.-отт. 18,5. Уч.-изд. л. 20,11. Тираж 3000 экз. Заказ 105/619. Цена 1 р. 50 к.

Ордена «Знак Почета» издательство «Недра», Ленинградское отделение. 193171. Ленинград, С-171, ул. Фарфоровская, 12.

Ленинградская типография № 8 ордена Трудового Красного Знамени Ленинградского объединения «Техническая книга» им. Евгении Соколовой Союзполиграфпрома при Государственном комитете СССР по делам издательств, полиграфии и книжной торговли. 190000, Ленинград, Прачечный переулок, 6.

4278