Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України
“Київський політехнічний інститут”

# КРИСТАЛОГРАФІЯ, КРИСТАЛОХІМІЯ ТА МІНЕРАЛОГІЯ

методичні вказівки
до виконання лабораторних робіт з дисципліни
для студентів усіх форм навчання
напряму підготовки 6.050403 «Інженерне матеріалознавство»

*Затверджено Методичною комісією ІФФ НТУУ”КПІ”*

Київ 2015

Методичні вказівки до виконання лабораторних робіт з дисципліни “Кристалографія, кристалохімія та мінералогія” для студентів усіх форм навчання напряму підготовки 6.050403 «Інженерне матеріалознавство» / Уклад. : Л. О. Бірюкович.– К. : НТУУ «КПІ», 2015. – 52 с.

*Гриф надано Вченою радою ІФФ НТУУ”КПІ”*
*(Протокол № 3/15 від “30”березня 2015 р.)*

Навчальне видання

# КРИСТАЛОГРАФІЯ, КРИСТАЛОХІМІЯ ТА МІНЕРАЛОГІЯ

Методичні вказівки
до виконання лабораторних робіт з дисципліни
для студентів усіх форм навчання
напряму підготовки 6.050403 «Інженерне матеріалознавство»

Укладач: *Бірюкович Ліна Олегівна*, канд. техн. наук, доцент
Відповідальний
редактор *Степанчук А. М.,* канд. техн. наук, професор
Рецензент *Бобіна М. М.*, канд. техн. наук, доцент

## Зміст

## Передмова

Удосконалення існуючих та створення нових матеріалів вимагає від спеціаліста знань не лише властивостей та технологій їх одержання, а й, перш за все, знань кристалічної будови речовини, вивченням якої займається кристалографія. Знань залежностей властивостей від особливостей кристалічної будови, які вивчає кристалохімія.

Знання основних законів симетрії кристалів та їх структури, зв'язку структури з фізико-хімічними властивостями матеріалів необхідні студентам для поглибленого вивчення циклу професійно-орієнтованих дисциплін.

Дані методичні вказівки складаються з шести лабораторних робіт. Перші п'ять присвячені методам опису кристалічних многогранників, побудови кристалографічних проекцій, визначення індексів граней та простих форм кристалічних многогранників.

Остання робота присвячена визначенню та опису елементарних комірок кристалічних структур.

Кожна лабораторна робота супроводжується основними теоретичними відомостями та докладними методичними вказівками, що допоможуть студентам у виконанні лабораторних робіт та зрозумінні і засвоєнні теоретичного матеріалу дисципліни "Кристалографія, кристалохімія та мінералогія".

## **Лабораторна робота № 1**

## ВИЗНАЧЕННЯ ЕЛЕМЕНТІВ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ

Мета роботи − навчитись визначати елементи симетрії кристалічних многогранників на конкретних моделях.

### **Основні теоретичні відомості**

*Симетрія* – основна властивість кристалів. Симетрія «царює» у світі кристалів. Це найзагальніша закономірність, що властива будові та властивостям кристалічної речовини. Саме симетрія визначає закони розташування структурних елементів у просторовій ґратці, взаємне розташування граней макроскопічного кристала, диктує, у яких напрямках і які фізичні властивості можуть бути в кристалі.

Визначення симетрія − початкова і найважливіша задача під час роботи з будь-якими кристалами.

У перекладі з грецької симетрія означає співмірність. *Симетричний кристал (многогранник)* складається з рівних частин, які можуть суміщатись одна з одною в результаті певних дій, що називаються *симетричними перетвореннями* або *симетричними операціями*. До таких операцій відносять – *відображення у площині, обертання навколо осі* та *перенос через точку*.

Симетричні перетворення можна поділити на два типи: 1) *кінцеві*, або *точкові*, під час дії яких хоча б одна точка фігури лишається на місці, і 2) *нескінченні*, або *просторові*, під час дії яких жодна точка фігури не залишається на місці. Кінцеві симетричні перетворення відповідають симетрії кристалічних многогранників, нескінченні – симетрії структур.

Площина, пряма та точка є геометричними зразками, які характеризують відповідно відображення у площині, обертання навколо осі та перенос через точку і називаються *елементами симетрії*.

В кристалічних многогранниках присутні такі елементи симетрії як *центр симетрії, осі симетрії* та *площини симетрії*.

Всі елементи симетрії, характерні для кристалічних многогранників, підрозділяються на *прості і складні*. *Прості  елементи симетрії* є результатом дії одного симетричного перетворення. Наприклад, площина симетрії є результатом симетричного перетворення "відображення у площині". *Складні елементи симетрії* є результатом послідовної дії двох симетричних перетворень. Наприклад, інверсійна вісь є результатом послідовної дії "обертання навколо осі" та "перенос через точку".

Для позначення симетричних перетворень та відповідних їм елементів симетрії в кристалографії використовують умовні символи. Найрозповсюдженішими системами позначення є 1) запис міжнародного символу, та 2) запис за допомогою формули (табл. 1).

*Центром симетрії* називається така уявна точка всередині многогранника, яка характеризується тим, що будь-яка проведена через цю точку пряма по обидва боки від неї на рівних відстанях зустрічає однакові (відповідні) точки фігури.

Центр симетрії це елемент симетрії, що дозволяє здійснити симетричне перетворення − відображення всього многогранника в цілому і будь-якої його частини в центральній точці фігури, що приводить фігуру до самосуміщення (рис.1). Многогранники, які мають центр симетрії, характеризуються тим, що мають попарно паралельні грані розгорнуті одна відносно одної на кут 180 ° та рівні за формою і розміром. Якщо хоча б одна грань не має відповідної паралельної рівної за формою та розміром грані, то такий многогранник не має центра симетрії.

Таблиця 1 – Позначення елементів симетрії кристалічних многогранників

| Назва елемента симетрії | | Міжнародний символ | Формула симетрії |
|---|---|---|---|
| Площина | | $m$ | $P$ |
| Центр | | $\bar{1}$ | $C$ |
| Поворотна вісь симетрії | будь-яка | $n$ | $L_n$ |
| | подвійна | 2 | $L_2$ |
| | потрійна | 3 | $L_3$ |
| | четверна | 4 | $L_4$ |
| | шестерна | 6 | $L_6$ |
| Інверсійна вісь симетрії | будь-яка | $\bar{n}$ | $L_{\bar{n}}$ |
| | потрійна | $\bar{3}$ | $L_{\bar{3}}$ |
| | четверна | $\bar{4}$ | $L_{\bar{4}}$ |
| | шестерна | $\bar{6}$ | $L_{\bar{6}}$ |

*Площиною симетрії* або *площиною дзеркального відбиття* називається уявна площина, яка поділяє многогранник на дві дзеркально рівні частини, що розташовані одна відносно одної як предмет і його дзеркальне відбиття. Це елемент симетрії, що дозволяє здійснити симетричне перетворення – відображення у площині (рис. 2).

*Вісь симетрії* це така уявна пряма, під час повороту навколо якої на деякий кут фігура самосуміщується. Порядок осі симетрії $n$ визначається кількістю самосуміщень многогранника за повороту на кут 360°. Кут повороту, за якого відбувається самосуміщення, називається елементарним кутом повороту $\alpha$ ($\alpha = 360 /n$).

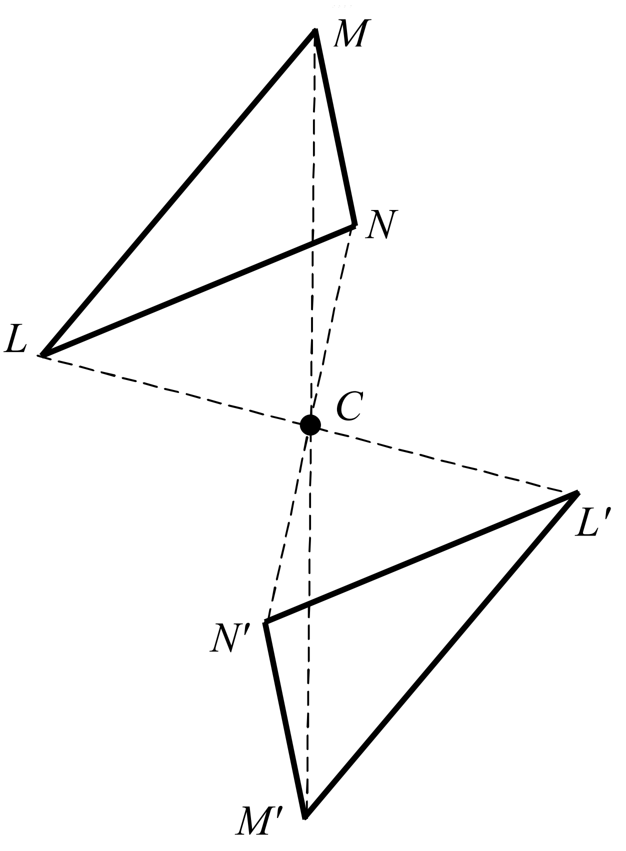
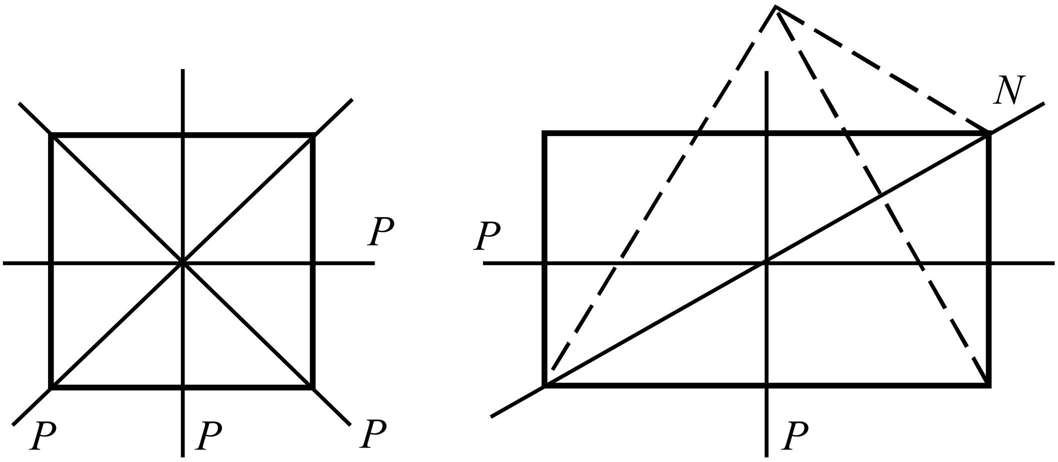


Рисунок 1 – Дія симетричного перетворення “перенос через точку”

У кристалічних многогранниках можуть бути лише осі першого, другого, третього, четвертого та шостого порядків і не може бути осей симетрії п’ятого, сьомого і вищих порядків: n ≠ 5, 7, 8, … . Це обумовлено закономірною внутрішньою будовою кристалів: неможливо заповнити без проміжків атомну площину кристала фрагментами з одних правильних п’яти- і семикутників, у той час як це можливо зробити за допомогою правильних трикутників і шестикутників, а також квадратів і прямокутників.



*а* – квадрата; *б* - прямокутника

Рисунок 2 – Площини симетрії *P*

Інверсійна вісь симетрії − елемент симетрії, що дозволяє здійснити складне симетричне перетворення − поворот фігури на певний кут і одночасне відображення її в центрі інверсії, як у центрі симетрії. На рисунку 3 представлено інверсійну вісь симетрії 4-го порядку.

Самостійне значення мають лише три інверсійні осі симетрії третього $(\bar{3})$, четвертого $(\bar{4})$ і шостого $(\bar{6})$ порядків. Інверсійна вісь симетрії першого порядку еквівалентна центру симетрії, інверсійна вісь другого порядку − площині симетрії.

Максимально можливе число елементів симетрії, що зустрічаються в кристалічному многограннику: площин симетрії − 9; осей симетрії: другого порядку − 6; третього порядку − 4; четвертого порядку − 3; шостого порядку − 1; інверсійних осей симетрії: третього порядку − 4; четвертого порядку − 3; шостого порядку − 1.

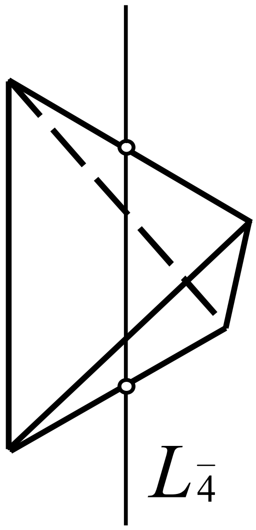


Рисунок 3 – Інверсійна вісь симетрії четвертого порядку

В одному многограннику одночасно не можуть бути присутніми всі згадані елементи симетрії.

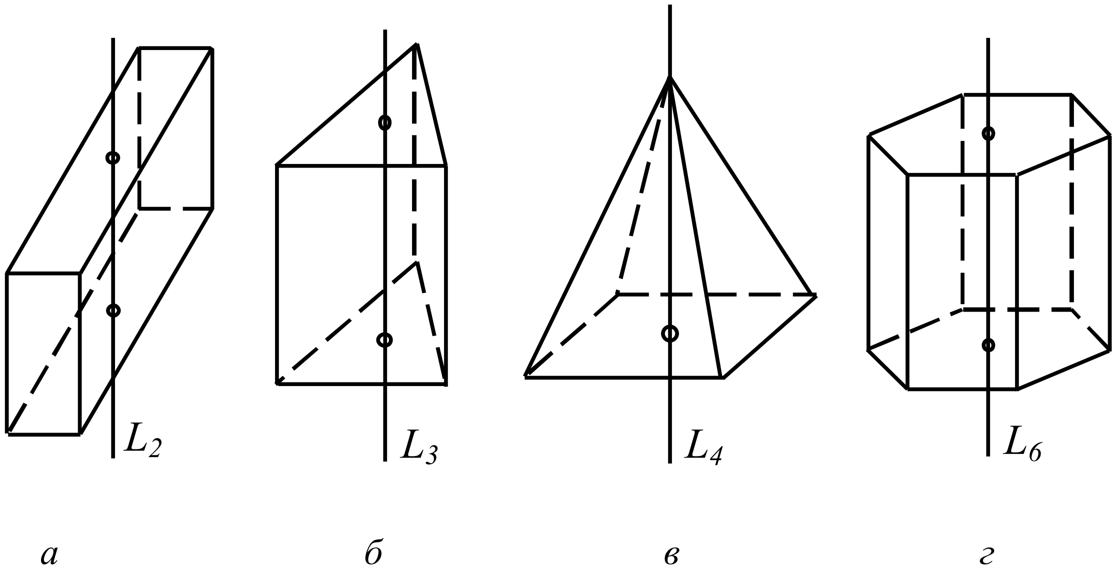
## Порядок виконання роботи

1) Спочатку треба знайти осі симетрії вищого порядку (вище другого), а потім вже переходити до знаходження осей другого порядку та інших елементів симетрії (площин і центру симетрії). Осі симетрії вищого порядку проходять через вершини, де сходяться рівні ребра, або через центри граней із числом ребер, кратним порядку осі симетрії.

2) При визначенні осей симетрії потрібно намагатися не перевертати многогранник, тому що це може призвести до помилки під час підрахунку числа однакових елементів симетрії.

3) Вісь симетрії другого порядку проходить або через середину ребра, перпендикулярно йому, або через центр грані, перпендикулярно грані, що має форму прямокутника або ромба, або через вершину, утворе-

ну парним числом граней із попарно рівними протилежними і двогранними кутами (рис. 4 *а*).



*а* –$L_2$; *б* – $L_3$; *в* –$L_4$; *г* – $L_6$

Рисунок 4 – Многогранники з поворотними осями симетрії різного порядку

4) Вісь симетрії третього порядку (а також інверсійні осі третього і шостого порядків) проходить або через правильну (утворену трьома рівними плоскими кутами) тригранну вершину, або через центр грані у вигляді правильного трикутника, або шестикутника перпендикулярно цій грані (рис. 4 *б*).

5) Вісь симетрії четвертого порядку може проходити або через правильну чотирьохгранну (восьмигранну, дванадцятигранну) вершину, або через центр грані з числом ребер, кратним чотирьом, перпендикулярно грані квадрата (рис.4 *в*).

6) Вісь симетрії шостого порядку може проходити або через правильну шестигранну (дванадцятигранну) вершину, або через центр гексагона – правильного шестикутника − перпендикулярно грані (рис.4 *г*).

7) Площина симетрії проходить або уздовж ребра кристала, створюючи при цьому рівні кути з обома гранями, що граничать по даному ребру, або через бісектрису кута між ребрами кристала, які пересікаються, розділяючи її на дві дзеркально рівні частини. Площина симетрії присутня у кристалах, що мають інверсійну вісь симетрії шостого порядку, перпендикулярно останній.

8) Центр симетрії виявляється по обернено рівнобіжним граням: кристал, у якому є центр симетрії утворений рівнобіжними гранями, однаковими за розміром та формою і повернутими одна відносно одної на 180˚.

## Контрольні питання

1) Перелічіть відомі типи симетричних перетворень.

2) Який елементарний кут відповідає осі симетрії другого порядку?

3) Чим відрізняються інверсійні осі симетрії від поворотних осей симетрії?

4) Яким осям симетрії можуть відповідати кути повороту 60˚, 90˚, 120˚, 180˚?

## Лабораторна робота № 2

## ВИБІР КООРДИНАТНИХ СИСТЕМ ДЛЯ ОПИСУ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ І МЕТОД ІНДЕКСУВАННЯ ГРАНЕЙ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ

Мета роботи − навчитись на моделях кристалічних многогранників вибирати кристалографічні координатні системи та описувати в них грані многогранників за допомогою метода індексування.

## Основні теоретичні відомості

Для опису будь-якого кристалічного многогранника можна використовувати дві координатні системи: полярну та спеціальну.

*Полярна система координат* застосовується для визначення координат точок будь-якого кристала за допомогою двох координат – довготи (φ), яка визначається кутом між площиною нульового меридіана і площиною меридіана, який проходить через задану точку та полярною відстанню (ρ). Ця координата є кутом між північним полюсом сфери та заданою точкою.

*Спеціальна система координат – кристалографічні* − застосовується для певної групи (сингонії) кристалів. Кожна зі спеціальних координатних систем забезпечує максимальну простоту опису кристалів відповідної симетрії. Так як  для координатних напрямків спеціальних координатних систем вибирають або певні елементи симетрії самих многогранників (осі симетрії, нормалі до площин симетрії), або напрямки ребер, то ці системи називають природними.

Початок координат в таких системах завжди знаходиться у середині кристалічного многогранника і співпадає або з центром симетрії, або, за відсутності першого, з центром мас. Ці системи координат є правими. Вісь *OX* завжди направлена на дослідника, вісь *OY* – у право, вісь *OZ* – догори. Осі мають як додатні, та і від’ємні напрямки.

Спеціальні системи координат для кожної сингонії характеризуються метрикою, до якої входять одиничні відрізки по координатних осях *a, b, c* та кути між осями α, β, γ (рис. 5).

*Триклинна* (тричі косокутна, клинео (грец.) − нахил) кристалографічна система координат дуже зручна для опису найбільш низькосиметричних кристалів. Ця координатна система характеризується неоднаковими (і не-прямими) кутами α, β, γ між осями координат *OX, OY, OZ* (α ≠ β ≠ γ ≠ 90°), а також нерівними осьовими (масштабними) одиницями (*a* ≠ *b* ≠ *c*).

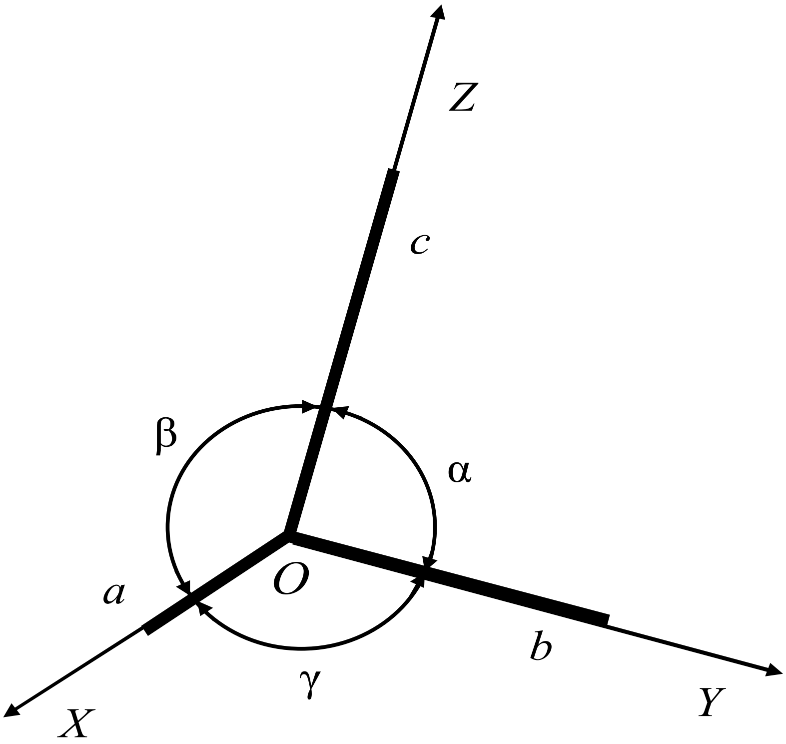


Рисунок 5 – Загальний вигляд кристалографічної системи координат

У *моноклинній* координатній системі (моно (грец.) − один) один кут (β) не прямий, а два інші кути між осями координат (α та γ) − прямі (α = γ = 90°≠ β; *a* ≠ *b* ≠ *c*).

У *ромбічній* координатній системі всі кути між осями координат − прямі (α = β = γ = 90°), а осьові одиниці нерівні (*a* ≠ *b* ≠ *c*). Часто цю систему називають орторомбічною (ортогональною ромбічною).

*Тетрагональна* координатна система є також ортогональною (α = β = γ = 90°), дві осьові одиниці збігаються (*a* = *b* ≠ *c*).

*Тригональна* координатна система характеризується наявністю чотирьох координатних осей. Між трьома осями *OX, OY, OU*, що лежать в одній площині, кут складає 120°, а вісь *OZ* перпендикулярна до цих трьох осей (α = β = δ =120°, γ = 90°). Для осьових відрізків діє співвідношення *a* = *b* = *w* ≠ *c*. Ідентична система координат приймається для *гексагональної* сингонії (рис. 6).

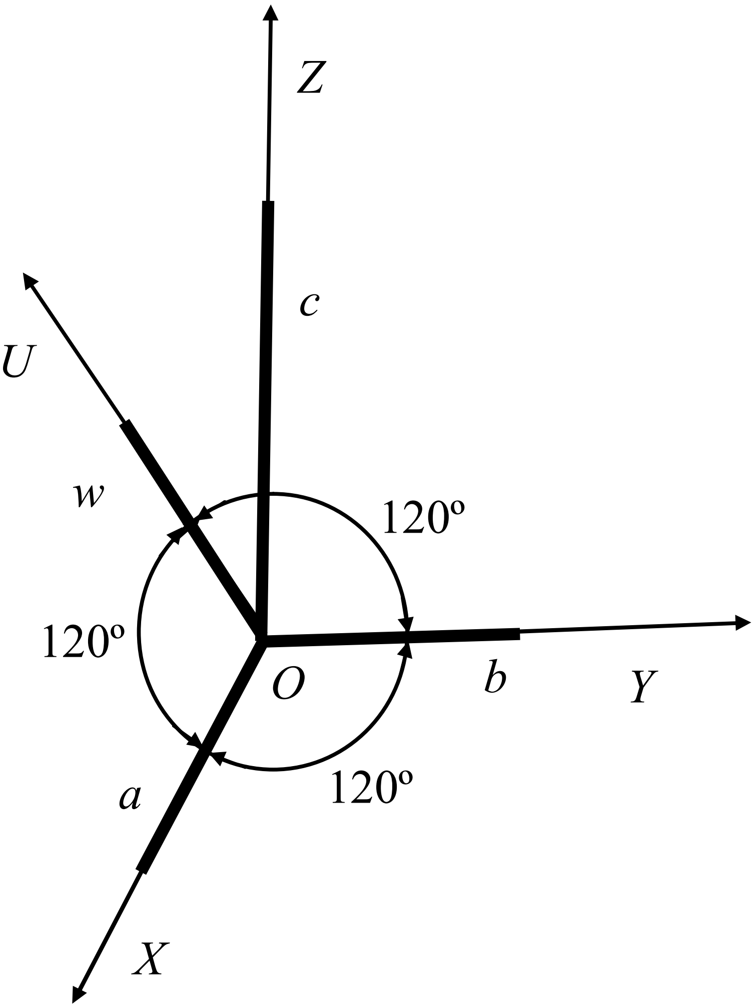


Рисунок 6 – Система координат для тригональної та гексагональної сингоній

*Кубічна* координатна система (найбільш широко відома під назвою декартової) є ортогональною (α = β = γ = 90°), рівноосьовою (*a* = *b* = *c*) і застосовується для опису найбільш високосиметричних кристалів.

Для опису граней кристалічних многогранників застосовується метод кристалографічного індексування, зручний для всіх кристалографічних систем координат незалежно від того, прямокутні вони чи косокутні, однакові в них масштабні відрізки по осях чи різні.

При індексуванні кожна грань кристалу характеризується певним набором індексів − символом грані.

Якщо грань $A_0B_0C_0$ вибрати за одиничну, то її параметри $OA_0$, $OB_0$, $OC_0$ (одиничні відрізки) вважаються одиницями вимірювання по відповідних осях – осьові одиниці (рис. 7). У загальному випадку вони можуть бути не однаковими ($OA_0 \neq OB_0 \neq OC_0$). Осьові одиниці позначають: по осі $X$ – $a$, по осі $Y$ – $b$, по осі $Z$ – $c$. Отже, положення грані $A_0B_0C_0$ визначається *параметрами* $a$, $b$, $c$; положення грані $A_1B_1C_1$ - $2a$, $2b$, $3c$; $A_2B_2C_2$ - $3a$, $3b$, $2c$.

*Індекси грані АВС (індекси Міллера)* − три цілі числа $h$, $k$, $l$, що визначаються як обернені величини до параметрів грані:

$$h : k : l = \frac{1}{a} : \frac{1}{b} : \frac{1}{c}.$$

Параметри грані $a$, $b$, $c$ можуть приймати значення від - ∞ до +∞, у той час як індекси $h$, $k$, $l$ можуть приймати будь-які від’ємні або додатні значення, як правило, виражені малим, однозначним числом, в тому числі − нулем. Рівність нулю того або іншого індексу показує, що дана грань паралельна  відповідній осі координат.

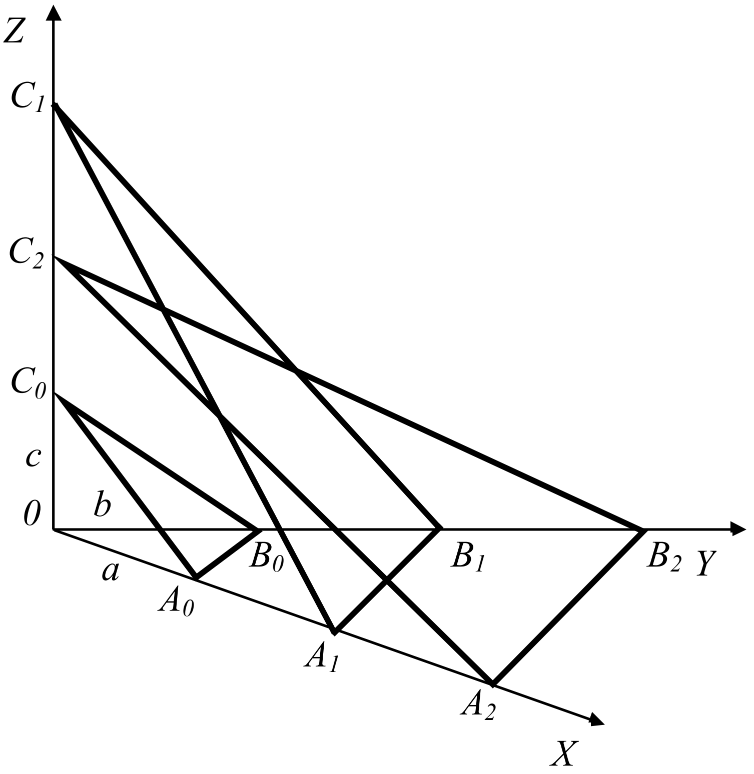


Рисунок 7 – Розташування граней $A_0B_0C_0$, $A_1B_1C_1$, $A_2B_2C_2$ в системі координат *OX, OY, OZ*

Індекси Міллера показують, що площина *ABC* поділяє одиничний відрізок по осі *OX* на *h* частин, по осі *OY* на *k* частин, по осі *OZ* на *l* частин.

Три індекси, взяті у круглі дужки (*hkl*), називаються символом грані *ABC*. Грані кристала, які пов'язані тими або іншими елементами симетрії (і тому мають однакові розміри і форму), мають однотипні символи, тобто такі, що відрізняються лише знаками індексів та порядком їхнього запису в символі грані.

Абсолютні значення осьових одиниць визначають за даними рентгеноструктурного аналізу.

## Порядок виконання роботи

1) Визначити елементи симетрії кристалічного многогранника.

2) Визначити сингонію та категорію кристалічного многогранника.

3) Вибрати спеціальну координатну систему для відповідної сингонії.

Рекомендації щодо вибору напрямків координатних осей у кристалічних многогранниках різних сингоній:

*кубічна* – за осі координат приймають три взаємно перпендикулярних осі $3L_4$ або $3L_{\bar{4}}$, а у випадку їх відсутності – $3L_2$;

*гексагональна і тригональна* – за вісь $OZ$ приймають $L_6$ або $L_{\bar{6}}$ (гексагональна сингонія), $L_3$ або $L_{\bar{3}}$ (тригональна), за осі $OX$, $OY$, $OU$ - горизонтальні осі $L_2$, а за їх відсутності – нормалі до вертикальних площин симетрії, за відсутності останніх – три горизонтальних ребра, розташованих під кутом 120°;

*тетрагональна* – за вісь $OZ$, приймають $L_4$ або $L_{\bar{4}}$, за осі $OX$ і $OY$ – взаємно перпендикулярні горизонтальні осі $L_2$, а за їх відсутності – нормалі до вертикальних взаємно перпендикулярних площин симетрії, за відсутності останніх – два горизонтальних взаємно перпендикулярних ребра;

*ромбічна* – три взаємно перпендикулярні осі $3L_2$, за їх відсутності єдина вісь $L_2$ приймається за $OZ$, а нормалі до двох взаємно перпендикулярних площин симетрії – за осі $OX$ і $OY$;

*моноклинна* – за вісь $OY$ приймають $L_2$ або нормаль до площини симетрії, за осі $OX$ і $OZ$ – два ребра, розташовані перпендикулярно до $OY$;

*триклинна* – напрямки трьох не компланарних ребер.

4) Розбити всі наявні грані кристалічного многогранника на групи, у які входять грані однакової форми й однакового розміру.

5) Визначити символи граней кристалічного многогранника, записуючи їх в окремі групи відповідно до п. 4. Для спрощення запису відрізки, що відтинаються на координатних осях, приймаються рівними одиниці.

*Приклад.* На рисунку 8 зображено кристалічний многогранник у вигляді тетрагональної призми.

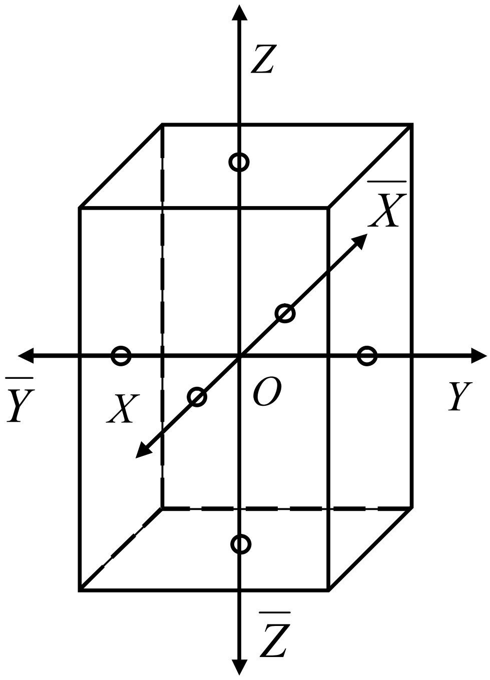


Рисунок 8 – Установка кристалів тетрагональної сингонії

Елементи симетрії цього кристалічного многогранника $L_4 4L_2 5PC$.

Вибираємо спеціальну координатну систему для тетрагональної сингонії. Вісь $OZ$ – вісь $L_4$; осі $OX$ і $OY$ – дві взаємно перпендикулярні координатні осі $L_2$. Грані кристалічного многогранника складають дві групи. У першу входять чотири вертикальні грані, а в другу – дві горизонтальні.

Записуємо символи граней кристала по групах:

| I група | II група |
|---|---|
| (100) | (001) |
| $(\bar{1}00)$ | $(00\bar{1})$ |
| (010) | |
| $(0\bar{1}0)$ | |

Під час запису символу грані на першому місці ставлять індекс по осі *OX*, на другому − по осі *OY*, на третьому − по осі *OZ*. Для гексагональної і тригональної сингонії символ грані складається з чотирьох індексів (на третьому місці стоїть індекс по осі *OU*, а на четвертому − по осі *OZ*).

## Контрольні питання

1) Скільки типів координатних систем застосовується в кристалографії?
2) Особливості моноклинної координатної системи.
3) Що таке параметри площини *a, b, c*?
4) Що таке індекси площини *h, k, l*?

## Лабораторна робота № 3

## МЕТОДИ ПОБУДОВИ ПЛАСКИХ ПРОЕКЦІЙ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ

Мета роботи – навчитися будувати стереографічні і гномостереографічні проекції кристалічних многогранників.

## Основні теоретичні відомості

Зовнішня форма природних кристалів, як правило, є доволі складною. Для її зображення, а також для зображення елементів симетрії кристалів  та для проведення вимірів двогранних кутів між їх відповідними гранями в кристалографії застосовують різні види проекцій. Відповідно до закону сталості кутів, величини двогранних кутів між відповідними гранями кристала є сталими та однозначно характеризують грані кристала.

Центральні сферичні проекції вдало передають ці кутові співвідношення кристалічних многогранників. Для цього кристалічний многогранник заміняють *полярним комплексом*, що представляє собою сукупністю нормалей до граней многогранника, які перетинаються в одній точці в центрі многогранника. Якщо полярний комплекс помістити у центр  сфери довільного радіусу (сфера проекцій) та знайти сліди перетину елементів комплексу зі сферою, то отримаємо *сферичну проекцію полярного комплексу*.

Зручнішими для зображення та кристалографічних вимірів є пласкі проекції – *стереографічні та гномостереографічні*. Для перетворення об'ємної сферичної проекції у пласку потрібно сферу проекцій перетнути площиною *Q*. За площину стереографічної проекції приймається екваторіальна площина, на яку сфера проектується у вигляді кола проекції.

Принцип побудови стереографічної проекції показаний на рисунку 9.

В одному із полюсів (південному) сфери проекцій розташовують точку зору *S*.

Щоб спроектувати напівпряму, наприклад *OA*, проводимо пряму *AS* від полюсної точки *A* цього напрямку на сфері проекції до точки зору *S*. Тоді  перетин  лінії  *AS*  із колом  проекції точка *a* є стереографічною проекцією напрямку *OA*.

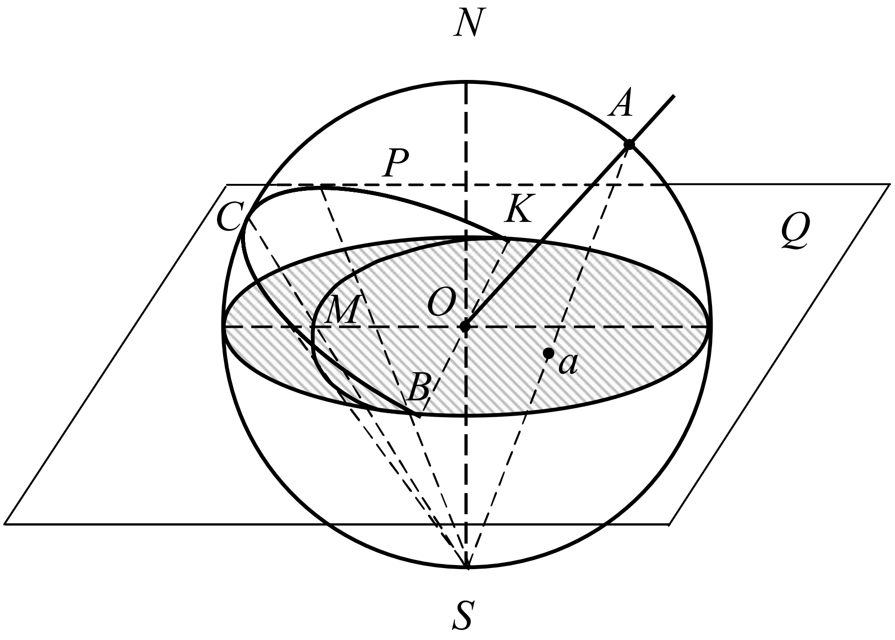


Рисунок 9 – Принцип побудови стереографічної проекцій напрямку *OA* і площини *P*

*Стереографічна проекція вертикального напрямку* зображується точкою в центрі кола проекції.

*Стереографічна проекція горизонтального напрямку* зображується точкою на межі кола стереографічної проекції.

*Стереографічна проекція похилого напрямку* зображується точкою у середині кола проекції, яка не співпадає з його центром.

Щоб отримати стереографічну проекцію площини *P,* необхідно усі точки дуги *BCK*, яка утворюється на перетині площини *P* зі сферою проекцій, сполучити з точкою зору *S*, прямими. В результаті отримуємо конус проекцій, який на перетині з площиною проекцій *Q* утворить дугу *BMK*. Ця дуга, що спирається на кінці діаметру кола проекцій, є стереографічною проекцією площини *P*.

В кристалографії стереографічні проекції застосовують для зображення елементів симетрії кристалічних многогранників.

*Стереографічна проекція горизонтальної осі симетрії* зображується двома діаметрально протилежними точками на колі проекції.

*Стереографічна проекція вертикальної осі симетрії* – точками, що накладаються одна на одну в центрі кола проекції.

*Стереографічна проекція похилої осі симетрії* – точками у середині кола проекцій.

*Стереографічна проекція вертикальної дзеркальної площини симетрії* зображується діаметральними подвійними лініями.

*Стереографічна проекція горизонтальної дзеркальної площини симетрії*, яка співпадає з площиною кола проекцій, позначається подвійною лінією вздовж лінії кола проекцій (два концентричні кола).

*Стереографічні проекції похилої дзеркальної площини симетрії* є дугами, що спираються на діаметр кола проекцій і позначаються подвійними лініями.

Умовне позначення осей симетрії та площин дзеркального відбиття на стереографічній проекції наведено в таблиці 2.

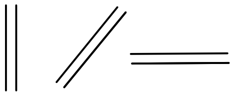
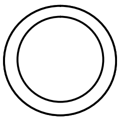
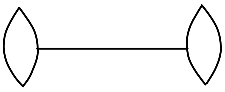
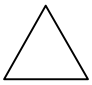
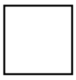
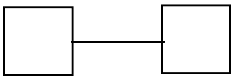
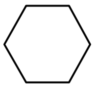
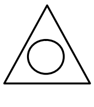
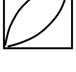
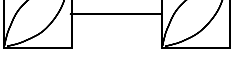
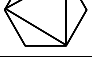
Для зображення граней многогранника використовують *гномостереографічні проекції* (від грецького слова “гномон” − нормаль). При цьому зображують не многогранник, а його полярний комплекс, тобто не грані кристала, а нормалі до граней.

Площиною гномостереографічної проекції, як і для стереографічної проекції, служить екваторіальна площина сфери проекцій *Q*.

Щоб одержати гномостереографічну проекцію площини, проводять нормаль від цієї площини до перетину зі сферою проекції, а потім отриману полюсну точку з’єднує з точкою зору *S* прямою.

Щоб побудувати, гномостереографічні проекції нормалей, що перетинають сферу в нижній півсфері, переносять точку зору з південного полюсу сфери *S* у північний полюс *N*. Проекції граней, розташованих вище

Таблиця 2 − Умовні позначення елементів симетрії кристалічних многогранників на стереографічній проекції

| Назва елемента симетрії | | Умовне позначення | Зображення елементів симетрії відносно площини проекції | |
|---|---|---|---|---|
| | | | перпендикулярно та похило | паралельно |
| Площина дзеркального відбиття | | *P* |  |  |
| Центр симетрії | | *C* | C | |
| Поворотні осі порядків | другого | $L_2$ |  |  |
| | третього | $L_3$ |  | немає |
| | четвертого | $L_4$ |  |  |
| | шостого | $L_6$ |  | немає |
| Інверсійні осі порядків | третього | $L_{\bar{3}}$ |  | немає |
| | четвертого | $L_{\bar{4}}$ |  |  |
| | шостого | $L_{\bar{6}}$ |  | немає |

площини проекції, позначають кружками, а нижніх – хрестиками. Іноді верхню грань зображують порожнім кружком, нижню – зачорненим.

Горизонтальної грані проектуються в центрі кола проекції (верхня – кружком, нижня – хрестиком), вертикальної грані – на самому колі проекції, а похилі грані – усередині його. Чим більше кут нахилу до осі *OZ* похилої грані, тим далі від центру розташовується точка, що є її проекцією.

## Порядок виконання роботи

1) Визначити елементи симетрії кристалічного многогранника та записати сингонію та категорію, до яких належить многогранник.

2) Вибрати спеціальну координатну систему для кристалічного многогранника і встановити його в ній.

3) Зобразити стереографічну і гномостереографічну проекції кристалічного многогранника.

*Приклад.* На рисунку 10 зображені загальний вигляд тетрагональної діпіраміди (*а*) та її стереографічна (*б*) і гномостереографічна (*в*) проекції.

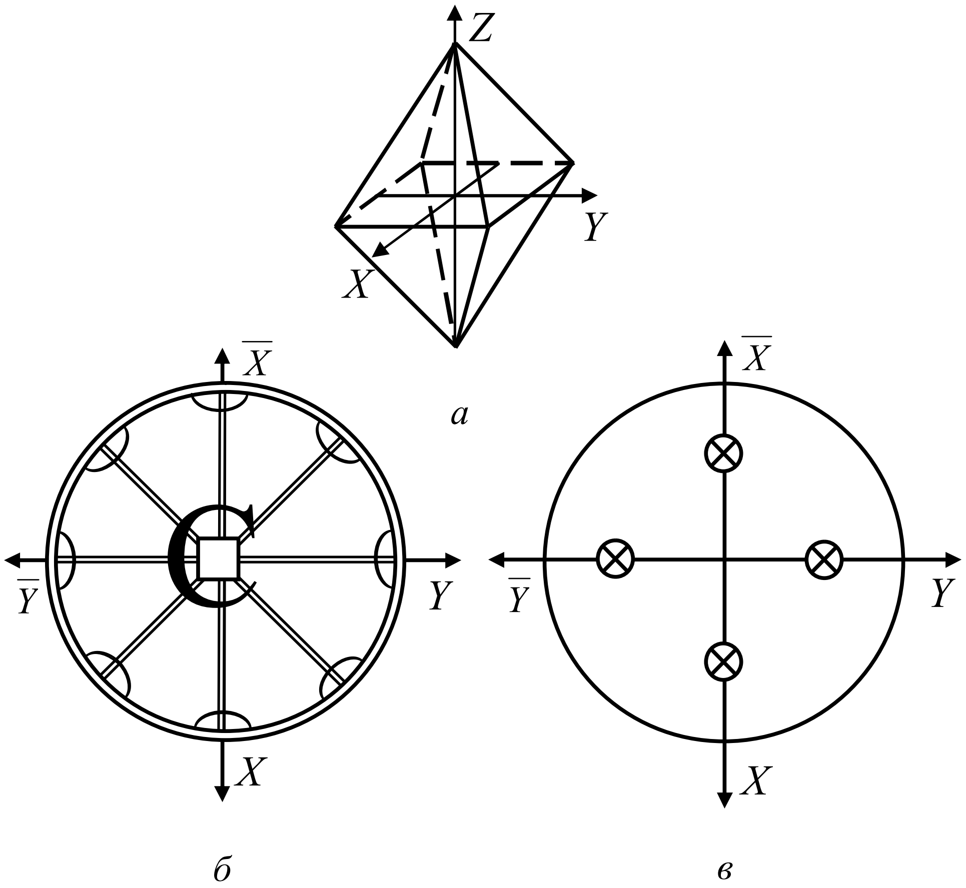
Елементи симетрії кристала – $L_4 4L_2 5PC$. Сингонія – тетрагональна. Категорія – середня. Вибираємо за вісь *OZ* − вісь $L_4$, за осі *OX* і *OY* − координатні осі $L_2$.

## Контрольні питання

1) Яке основне призначення стереографічних проекцій?

2) Чим відрізняються стереографічна і гномостереографічна проекції кристала?

3) Принцип побудови стереографічної проекції.



*а* – загальній вигляд тетрагональної діпіраміди; *б* – стереографічна проекція; *в* – гномостереографічна проекція

Рисунок 10 – Загальний вид та проекції тетрагональної діпіраміди

4) Де на гномостереографічній проекції розташовуються вертикальні грані кристала?

5) Як відрізнити на гномостереографічній проекції верхню і нижню грані кристала?

## Лабораторна робота № 4

## ВИЗНАЧЕННЯ КЛАСІВ СИМЕТРІЇ КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКІВ

Мета роботи − вивчити принципи визначення класів симетрії та навчитись записувати міжнародний символ для класів симетрії.

### Основні теоретичні відомості

Площини симетрії, осі симетрії прості та інверсійні, центр симетрії знаходяться в кристалах у різних сполученнях. Число можливих сполучень елементів симетрії в кристалічних многогранниках обмежено через відсутність у кристалах осей симетрії п'ятого, сьомого і більш високих порядків і певного числа способів взаємного розташування елементів симетрії. Якщо у многограннику є єдиний напрямок, що не повторюється, то такий напрямок називається *особливим* або *одиничним*.

Відповідно до числа одиничних напрямків та симетрії всі кристали поділяються на три *категорії*: вищу, середню та нижчу.

До вищої категорії відносять кристали, що не мають одиничних напрямків, а осей порядків вище другого мають декілька.

Середню категорію складають кристали, що мають один одиничний напрямок та декілька осей другого порядку.

До нижчої категорії відносять кристали, що мають декілька одиничних напрямків і не мають осей вище другого порядку.

Три категорії, в свою чергу, поділяються на сім *сингоній.* У сингонію об’єднують кристали, що мають однакову симетрію елементарних комірок та однакову систему координат.

До вищої категорії належить лише одна сингонія – *кубічна*; до середньої три сингонії – *тригональна, тетрагональна та гексагональна*; до нижчої також три – *ромбічна, моноклинна та триклинна*.

Сім сингоній, у свою чергу, поділяються на 32 класи. *Класом симетрії* називається повна сукупність (комбінація) елементів симетрії кристалічного многогранника.

Російський кристалограф А. В. Гадолін теоретичним шляхом вивів всі 32 класи симетрії кристалічних многогранників.

Для виведення класу симетрії зазвичай беруть два або три елементи симетрії (елементи симетрії, що породжують), і знаходять потім (наприклад, розмножуючи пробну грань і проекції) інші (породжені) елементи симетрії.

Повну сукупність елементів симетрії (клас) можна записувати не тільки за допомогою формули елементів симетрії. Широко застосовується *міжнародний символ класу симетрії.* На відміну від формули симетрії міжнародний символ налічує лише три позиції на яких записують лише деякі характерні елементи симетрії, що входять у формулу симетрії, так звані *породжуючи елементи симетрії*. Повна формула симетрії легко може бути виведена з міжнародного символу з урахуванням теорем сполучення елементів симетрії і правил запису міжнародних символів класів симетрії (табл. 3).

Цифри в міжнародному символі класу симетрії позначають порядок осі (осей) симетрії (*1,2,3,4,6*), розташованої (або розташованих) у певному напрямку.

Символ *m* позначає одну (або декілька) площину симетрії.

Символ *n/m* означає вісь *n*-го порядку і площину симетрії *m* (горизонтальну) перпендикулярну до цієї осі.

Таблиця 3 – Правила запису міжнародного символу класу симетрії

| Сингонія | Позиція в символі | | |
|---|---|---|---|
| | 1-а | 2-а | 3-я |
| Триклинна | Лише один символ, що відповідає будь-якому напрямку в кристалі | | |
| Моноклинна | Єдина вісь $2$ або площина $m$ вздовж осі $OY$ | | |
| Ромбічна | Вісь $2$ або площина $m$ вздовж осі $OX$ | Вісь $2$ або площина $m$ вздовж осі $OY$ | Вісь $2$ або площина $m$ вздовж осі $OZ$ |
| Тригональна | Головна вісь симетрії | Осі $2$ або площина $m$ вздовж осей $OX$, $OY$, $OU$ | Діагональні осі $2$ або площина $m$ |
| Гексагональна | | | |
| Тетрагональна | Те саме | Осі $2$ або площина $m$ вздовж осей $OX$, $OY$ | |
| Кубічна | Координатні елементи симетрії | Осі $3$ | Діагональні елементи симетрії |

Особливе значення мають цифри 1 і $\bar{1}$, що позначають відповідні класи симетрії триклинної сингонії. Клас 1 формально позначає наявність осі симетрії першого порядку $L_1$, як єдиного елемента симетрії, тобто відсутність площин симетрії, осей симетрії другого, третього, четвертого та шостого порядків, а також центру симетрії.

Клас $\bar{1}$ містить єдиний елемент симетрії − центр симетрії, що формально подається як інверсійна вісь першого порядку.

У класах симетрії нижчої категорії у міжнародний символ переважно записують площини симетрії (за їх відсутності − осі симетрії). Елементів симетрії тут небагато, виняток складає клас $mmm$, у міжнародному символі якого зазначені три взаємно перпендикулярні площини симетрії (наведене позначення даного класу є скороченим, бо утворюється від повного $2/mmm$, де послідовно зазначені вісь $L_2$, горизонтальна площина симетрії, дві вертикальні площини симетрії).

У класах симетрії середньої категорії на першій позиції в міжнародному символі записується вертикальна вісь симетрії вищого порядку (*3;4;6;*$\bar{3}$*;*$\bar{4}$*;*$\bar{6}$), потім (на другій позиції) − або горизонтальні координатні осі симетрії (наприклад, клас *622*), або координатні вертикальні площини симетрії (клас *6mm*). Якщо є горизонтальна площина симетрії, то її записують таким чином − *6/m.* На третій позиції вказуються діагональні елементи симетрії − або горизонтальні осі симетрії другого порядку (клас $\bar{6}$*m2*) або вертикальні площини симетрії (клас *4/mmm*).

Наприклад, схема формування міжнародного символу класу симетрії *4/mmm* така:

$$L_4 4L_2 5PC = L^{\text{В}}_4\, 4L^{\text{Г}}_2\, 1P^{\text{Г}}\, 2P^{\text{В, коорд.}}\, 2P^{\text{В, діагон}}.\ C,$$

де $L^{\text{В}}_4$ – вертикальна вісь четвертого порядку – *4*;

$1P^{\text{Г}}$ – горизонтальна площина симетрії, розташована перпендикулярно до $L^{\text{В}}_4$ – */m*;

$2P^{\text{В, коорд.}}$ – дві площини симетрії у координатних напрямках – *m;*

$2P^{\text{В, діафон}}$ – дві площини симетрії у діагональних напрямках – *m.*

У класах симетрії вищої категорії в міжнародному символі спочатку записується символ трьох однакових елементів симетрії, що розташовуються в трьох взаємно перпендикулярних (координатних) напрямках – чи осі симетрії ($3L_2$, $3L_{\bar{4}}$, $3L_4$), чи площини симетрії; потім пишеться цифра *3*, яка вказує, що кожний з цих класів симетрії, містить $4L_3$, розташовані як просторові діагоналі в кубі; і, нарешті, указуються елементи симетрії в діагональному напрямку (якщо вони є, у класі *432* − це шість осей $L_2$).

## Порядок виконання роботи

1) Визначити елементи симетрії кристалічного многогранника, вказати сингонію і категорію до яких він належить.

2) Побудувати стереографічну проекцію елементів симетрії кристалічного многогранника, виділяючи елементи симетрії в координатних напрямках. Проаналізувати кратність того або іншого елемента симетрії, взаємозв'язок між окремими елементами симетрії. Наприклад, при наявності центру симетрії число парних осей симетрії дорівнює числу площин симетрії (площини перпендикулярні осям симетрії парного порядку).

3) У записі міжнародного символу перевагу віддають площинам симетрії. Наприклад, за наявності в координатному напрямку осі симетрії і нормалі до площини симетрії в міжнародному символі указується лише площина симетрії.

4) У класах симетрії кубічної сингонії необхідно фіксувати увагу на різниці між координатними і діагональними елементами симетрії і їх кратності (три для координатних і шість для діагональних).

У кубічних кристалах завжди присутні чотири осі симетрії $L_3$, що розташовуються як об'ємні діагоналі в кубі. У кубічних кристалах координатні елементи симетрії повторюються тричі ($3L_4$, $3\,L_{\bar{4}}$, $3L_2$, $3P$).

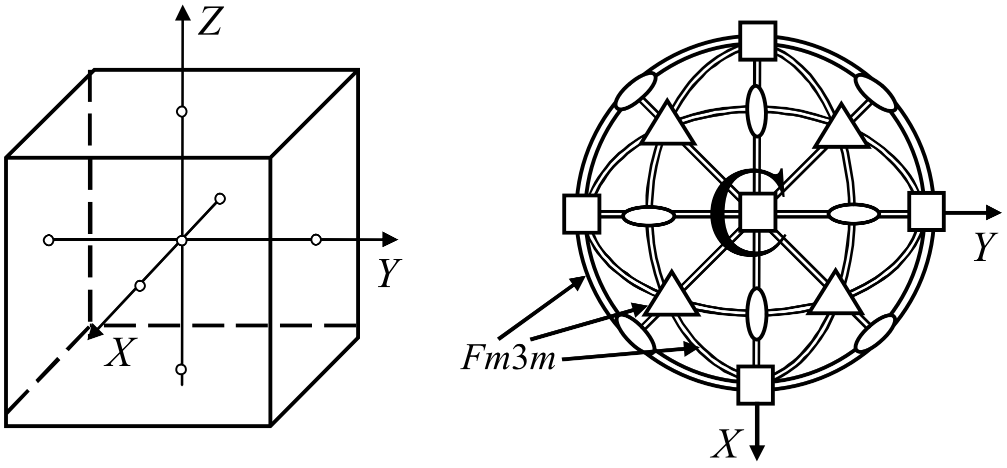
У кубічній сингонії діагональні елементи симетрії повторені шість разів ($6L_2$, $6P$).

У кубічних кристалах число площин симетрії кратне трьом: а - коли кристал містить тільки координатні площини симетрії (нормалі їх збігаються з координатними напрямками), то їх буде три (наприклад, $m3$); б - діагональних площин симетрії в кристалі шість (наприклад, $\bar{4}3m$); в - якщо кристал містить як координатні, так і діагональні елементи симетрії, загальне число площин симетрії буде дорівнює дев'яти (наприклад, *m3m*).

5) На підставі теорем про сполучення елементів симетрії кристалічних многогранників записати міжнародний символ класу кристала.

6) Стрілками вказати місцезнаходження елементів симетрії, які входять до міжнародного символу, на стереографічній проекції (рис. 11 *б*).

*Приклад:* На рисунку 11 *а* представлено кубічний кристал. Формула елементів симетрії для даного кристала має вид: $3L_44L_36L_29PC$.



*а* *б*

*а* – кристал кубічної сингонії; *б* – стереографічна проекція

Рисунок 11 – Зовнішній вигляд кристала кубічної сингонії та його стереографічна проекція

Після зображення стереографічної проекції кристала (рис. 11 *б*), виділимо координатні і діагональні елементи симетрії: три площини симетрії координатні, позначимо символом *m*; чотири осі $L_3$ − символом *3*; шість площин симетрії діагональних − символом *m*. У результаті одержуємо міжнародний символ класу кристала кубічної сингонії *m3m*.

### Контрольні питання

1) Що називають класом симетрії?
2) Що називають сингонією?
3) Які елементи симетрії входить у клас симетрії *3m*?
4) Чим відрізняються класи симетрії *32* і *23*; *3m* і *3m*; $\bar{4}2m$ і *43m*; *mm2*, *4mm*?

## Лабораторна робота № 5

## ВИЗНАЧЕННЯ ПРОСТИХ ФОРМ І ЇХ КОМБІНАЦІЙ У КРИСТАЛІЧНИХ МНОГОГРАННИКАХ

Мета роботи − навчитися визначати прості форми та їх комбінації у кристалічних многогранниках.

### Основні теоретичні відомості

Зведення всіх граней, що утворять кристалічний многогранник, до порівняно невеликого числа типів цих граней значно спрощує опис кристалічних многогранників. Незважаючи на величезну кількість відомих кристалів (~$10^4$), число типів граней, що утворюють ці кристали, складає усього 47.

*Проста форма* це сукупність граней кристала однакового розміру і форми, які пов’язані між собою елементами симетрії. Грані однієї простої форми позначаються однотипними індексами. Повна сукупність граней однієї простої форми може бути отримана розмноженням будь-якої із цих граней за допомогою елементів симетрії кристала. Кількість граней, що входять до однієї простої форми, відрізняється і змінюється в залежності від виду простої форми і може налічувати від однієї (моноедр) до 48 (гексаоктаедр) граней.

Більшість назв простих форм походить від грецьких слів: моноедр (моно − один і едра − грань), діедр (ді – два), тетраедр (тетра − чотири), гексаедр (гекса − шість), октаедр (окта − вісім), додекаедр (додека − дванадцять).

Кількість граней в простій формі залежить від розташування вихідної грані відносно елементів симетрії. Якщо через грань не проходить жодного елемента симетрії, то утворюється *загальна проста форма*. Якщо через вихідну грань проходять елементи симетрії, то утворюється *частинна проста форма*. І чим більше елементів проходить через вихідну грань, тим меншу кількість граней має проста форма.

У кожний клас симетрії входять декілька частинних простих форм і одна загальна проста форма.

Прості форми також бувають *відкриті* і *закриті*. Грані однієї *закритої простої форми* замикають простір з усіх боків на відміну від *відкритих простих форм*, грані яких самі по собі не можуть утворювати (без участі інших простих форм) обмежений об’єм.

Кристалічний многогранник не може бути утворений однією відкритою простою формою. Сполучення декількох простих форм в одному кристалічному многограннику називається *комбінацією простих форм*. Комбінація може складатися із двох або більшої кількості простих форм.

У більшості випадків огранка природного кристала складається з декількох простих форм, тобто утворюється комбінацією декількох простих форм. Якщо складну огранку такого кристала розділити на складові прості форми, то задачу індексування множини граней кристала зводять до визначення єдиного типового символу для кожної із простих форм.

Щоб визначити вид конкретної простої форми, необхідно встановити який вигляд мають її грані і подумки продовжити їх до перетину одна з одною. За виглядом многогранника, що утворився, визначають назву даної простої форми.

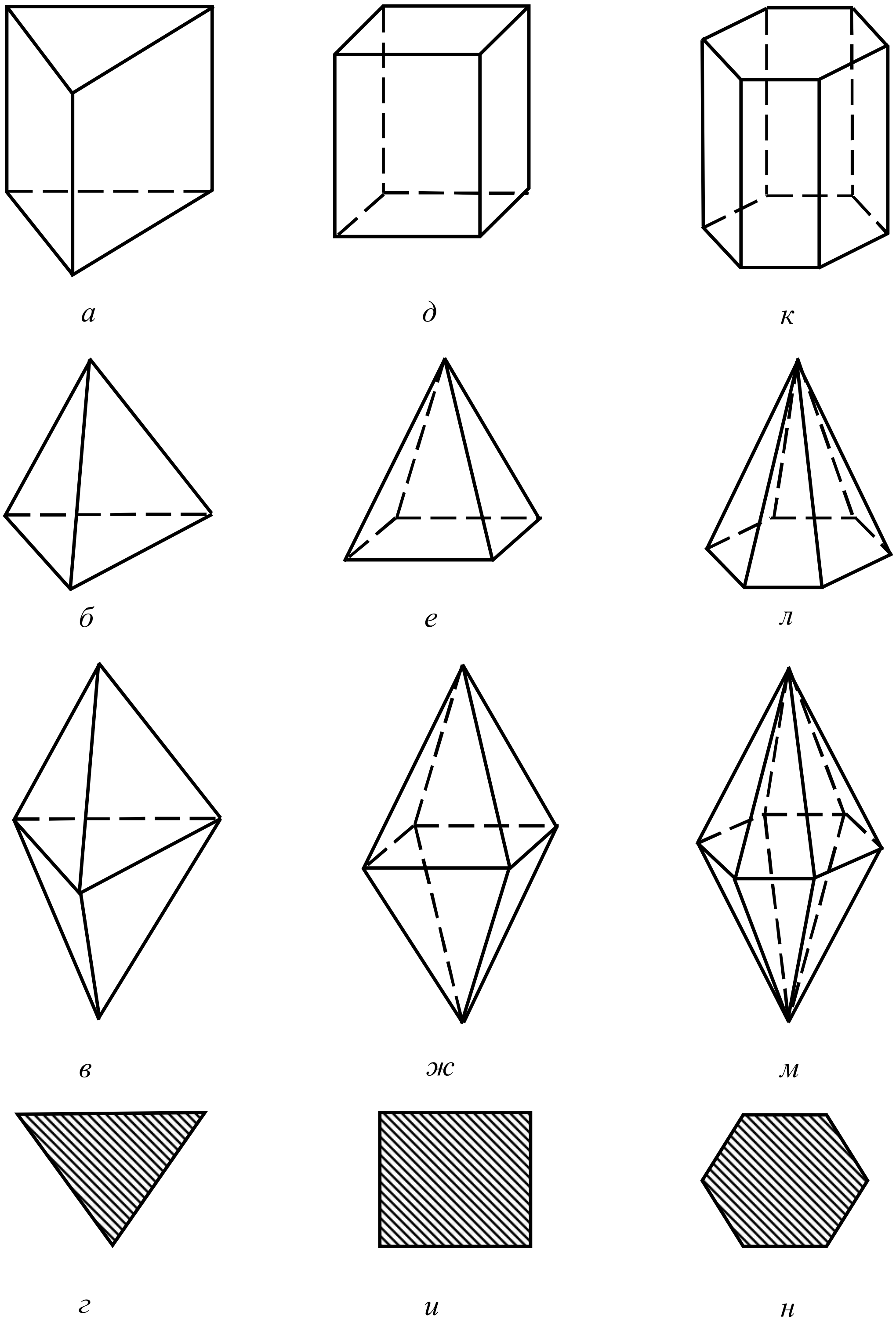
Назви більшої частини простих форм нижчої і середньої категорій утворюються за простою схемою − вказуються дві ознаки: форма основи відповідної фігури і її загальна назва, як то *призма, піраміда і діпіраміда*. Зовнішній вигляд цих простих форм наведено на рисунках 12 та 13.

Основою призми, піраміди і діпіраміди може служити один із правильних пласких многокутників: ромб, рівносторонній трикутник − тригон (рис. 12, *г*), дітригон − подвоєний трикутник, одержаний із рівностороннього трикутника за рахунок подвоєння його сторін (рис.13, *г*), тетрагон – квадрат (рис.12, *и*), дітетрагон − подвоєний квадрат (рис. 13, *и*), гексагон − правильний шестикутник (рис. 12, *н*), дігексагон − подвоєний гексагон (рис. 13, *н*).

Сполучення обох ознак визначає повну назву простої форми. Наприклад, тригональна призма, ромбічна піраміда, дігексагональна діпіраміда, дітетрагональна піраміда.

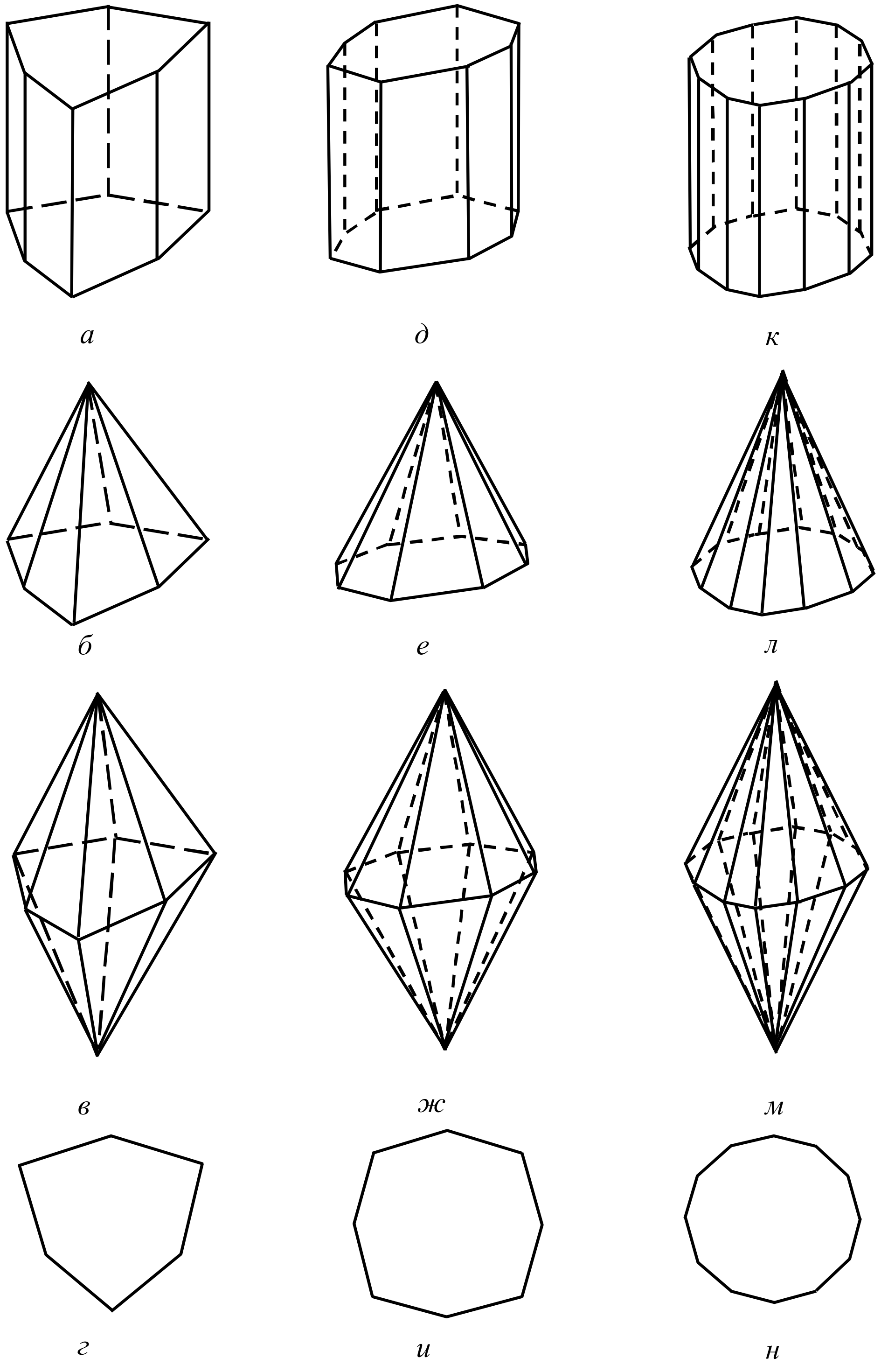
Особливе положення займає сімейство *трапецоедрів* (від грецького слова “трапеціа” − чотирикутник). На рисунку 14 показані трапецоедри трьох сингоній. Кожний з них утворений чотирикутними гранями у формі не рівнобедреної трапеції.

Серед простих форм нижчої і середньої категорій варто відмітити *ромбічний* (рис. 15, *а*) і *тетрагональний* (рис. 15, *б*) *тетраедри*. Ромбічний



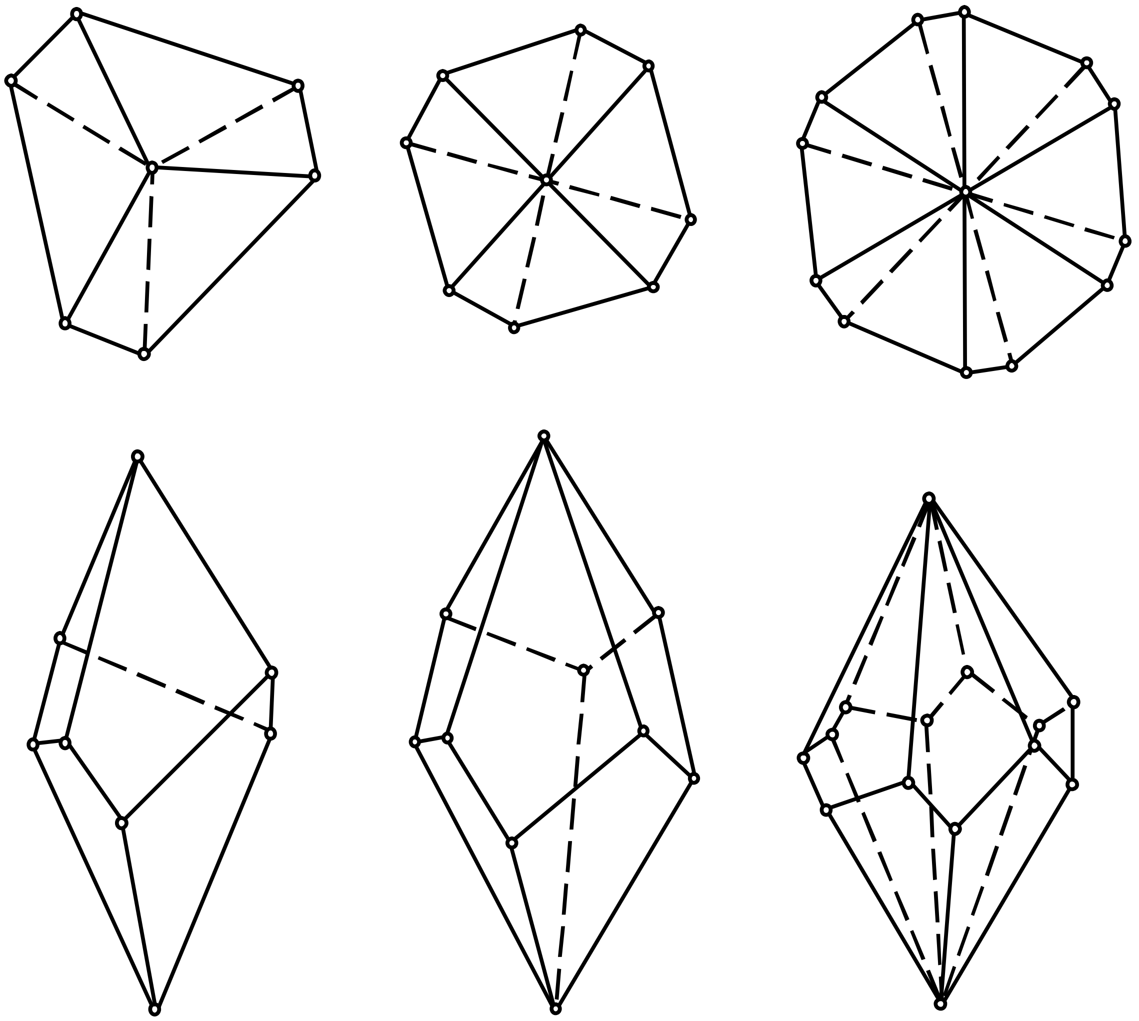
*а* –призма тригональна*;* *б* – піраміда тригональна; *в* – діпіраміда тригональна; *г* – тригон; *д* – призма тетрагональна; *е* – піраміда тетрагональна; *ж* – діпіраміда тетрагональна; *и* – тетрагон; *к* – призма гексагональна; *л* – піраміда гексагональна; *м* – діпіраміда гексагональна; *н* – гексагон

Рисунок 12 – Призми, піраміди, діпіраміди та їх перерізи



*а* –призма дітригональна; *б* – піраміда дітригональна; *в* – діпіраміда дітригональна; *г* – дітригон; *д* – призма дітетрагональна; *е* – піраміда дітетрагональна; *ж* – діпіраміда ді-тейрагональна; *и* – дітетрагон; *к* – призма дігексагональна; *л* – піраміда дігексагональна; *м* – діпіраміда дігексагональна; *н* – дігексагон

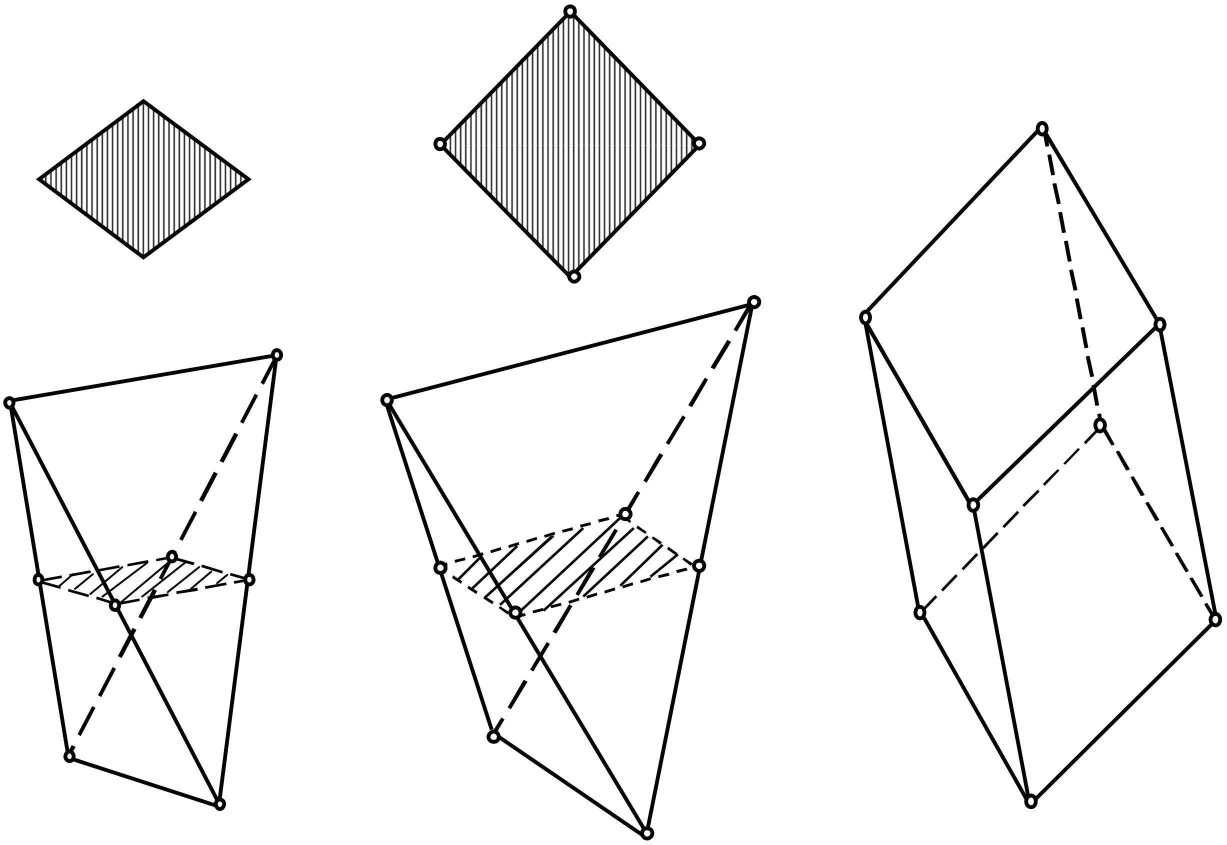
Рисунок 13 – Подвоєні призми, піраміди, діпіраміди та їх перерізи тетраедр утворений чотирма гранями у формі косокутних трикутників. Тетрагональний – чотирма гранями у формі рівнобедрених трикутників.



*а* – тригональний; *б* – тетрагональний; *в* – гексагональний

Рисунок 14 - Трапецоедри

Ще одна проста форма нижчої та середньої сингоній – *ромбоедр* (рис 15, *в*). Ромбоедр можна зобразити як стиснутий (або розтягнутий) по одній з об'ємних діагоналей куб. Він складається з шести граней у вигляді правильних ромбів, які можуть утворювати трьохгранну вершину, сполучаючись або гострими кутами, і тоді утворюється витягнутий ромбоедр, або тупими кутами, тоді ромбоедр буде стиснутий. Через цю трьохгранну вершину проходить інверсійна вісь симетрії третього порядку.

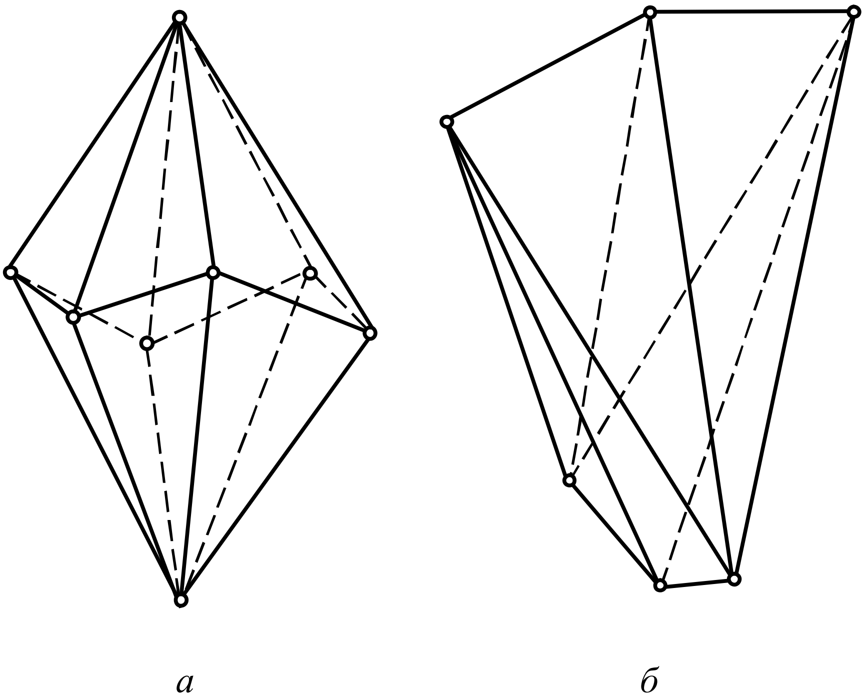


*а* *б* *в*

*а* – ромбічний тетраедр; *б* – тетрагональний тетраедр; *в* − ромбоедр

Рисунок 15 – Тетраедри і ромбоедр

Оригінальною зовнішньою огранкою виділяються *скаленоедри* (рис. 16). Скаленоедри бувають тригональні (рис. 16 *а*) та тетрагональні (рис. 16 *б*). Тригональний скаленоедр зображують як ромбоедр із подвоєною кількість граней (число граней тригонального скаленоедра вдвічі більше числа граней ромбоедра). Тетрагональний скаленоедр зображують як тетрагональний тетраедр із подвоєними гранями.



*а* – тригональний; *б* – тетрагональний

Рисунок 16 - Скаленоедри

*Діедр* − проста форма, що утворена парою однакових граней, які перетинаються під деяким кутом. Якщо між цими гранями можна провести площину симетрії, то такий діедр називається *д`ома*, якщо вісь симетрії 2-го порядку – *сфеноїд*.

*Пінакоїд* утворений також двома гранями, але гранями паралельними.

*Моноедр* це одна грань, наприклад, грань основи піраміди є моноедром.

Прості форми вищої категорії умовно можна розбити на три групи по п’ять простих форм у кожній: *група тетраедра*, *група гексаедра (куба)*, *група октаедра*.

Назви цих п’ятнадцяти простих форм вищої категорії на перший погляд здаються складними. Хоча по суті більшість цих назв формуються з трьох частин: а) в першій частині вказана форма грані (тригон, тетрагон, пентагон); б) в другій – число цих граней, утворених в результаті поділу однієї грані вихідної простої форми (тетраедра, октаедра або куба) − три, чотири (тетра) або шість (гекса); в) в останній – назва вихідної простої форми (тетраедр, октаедр або гексаедр).

До групи тетраедра (рис. 17) входять такі похідні форми як тригонтритетраедр, тетрагонтритетраедр, пентагонтритетраедр та гексатетраедр.

До групи октаедра (рис. 18) – тригонтриоктаедр, тетрагонтриоктаедр, пентагонтриоктаедр та гексаоктаедр.

До групи гексаедра (куба) (рис. 19) – ромбододекаедр, який має 12 граней у формі ромбів, пентагондодекаедр (12 граней у формі п’ятикутників), дідодекаедр (подвоєний додекаэдр) та тетрагексаедр.

## **Порядок виконання роботи**

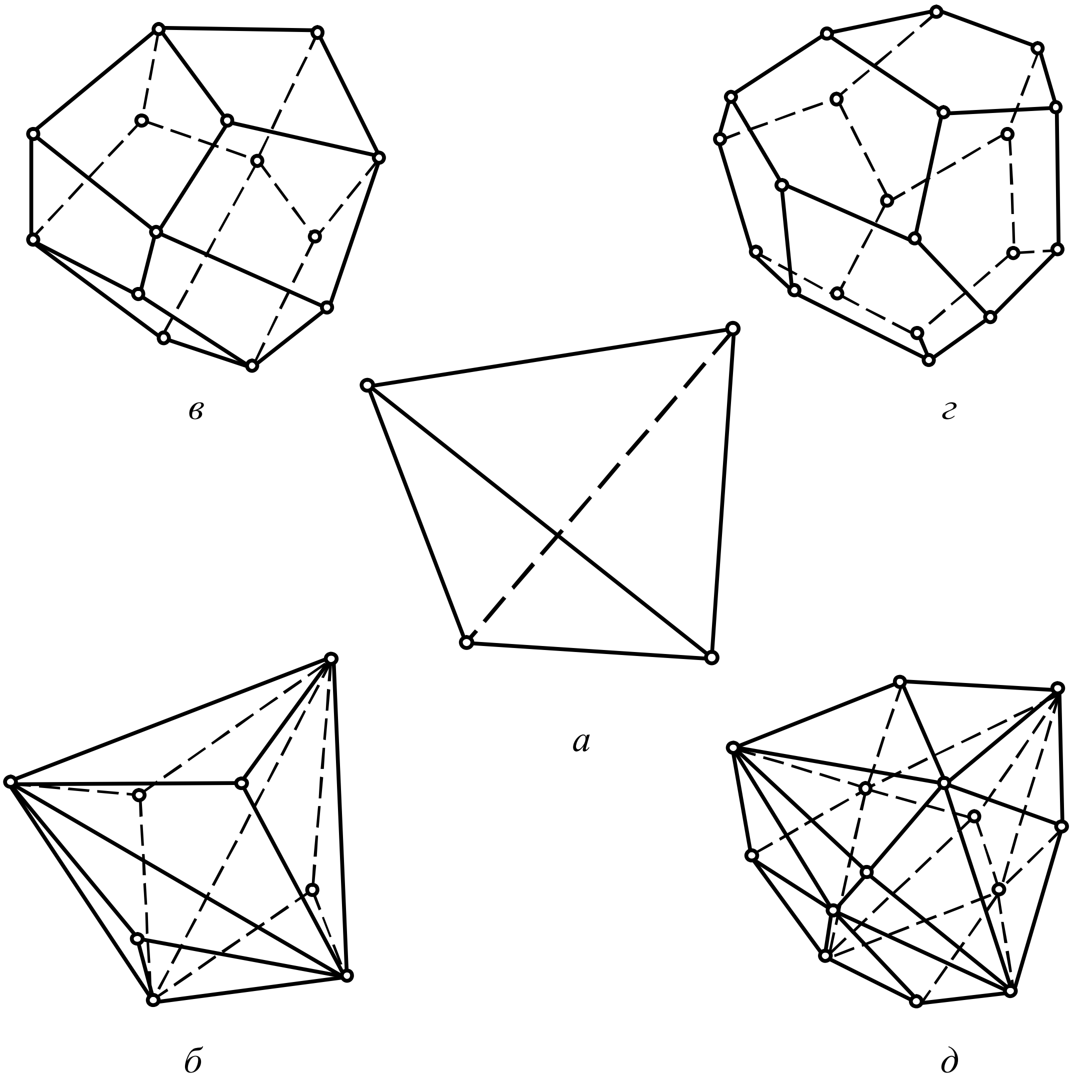
1) Визначити елементи симетрії кристалічного многогранника.

2) Визначити сингонію, категорію многогранника.

3) Вибрати для даного многогранника систему координат та встановити його в ній.

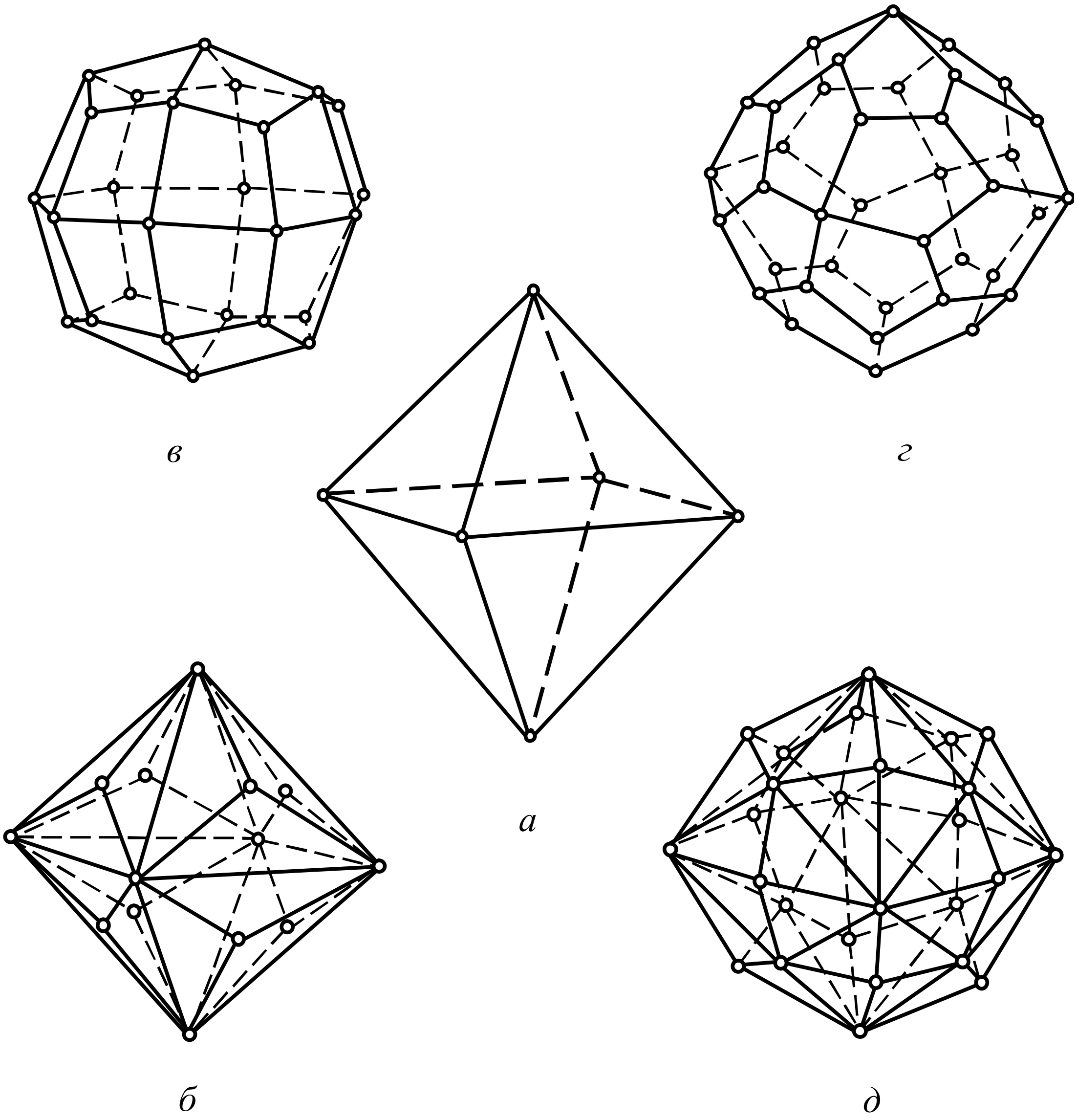
4) Визначити грані одного розміру і форми та записати символ простої форми. Вказати назву простої форми та зазначити кількості граней, що їй належать.

5) Зробити висновок, щодо комбінації простих форм кристалічного многогранника.



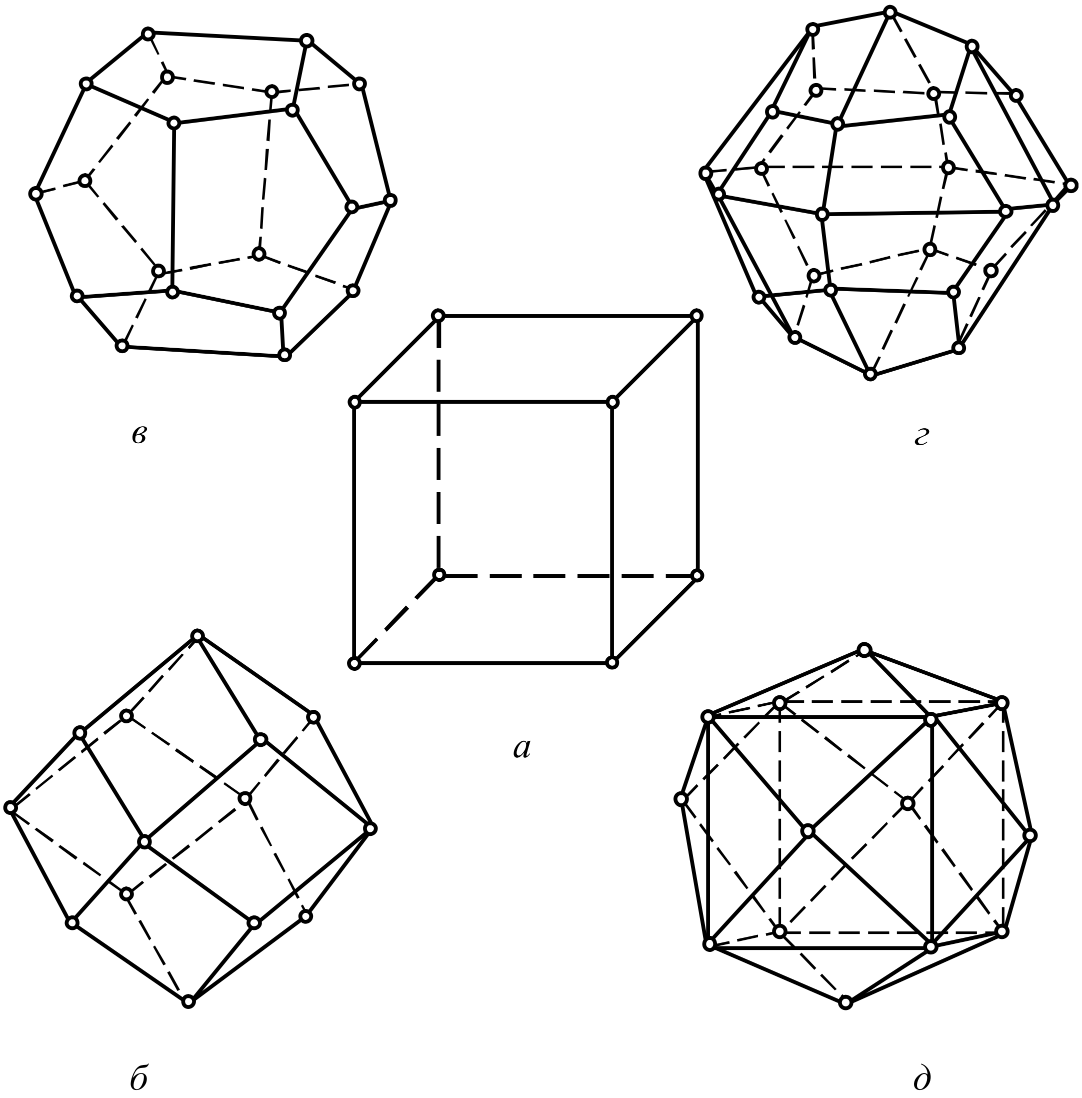
*а* – тетраедр кубічний; *б* – тригонтритетраедр; *в* – тетрагонтритетраедр; *г* – пентагонтритетраедр; *д* – гексатетраедр

Рисунок 17 – Група тетраедра



*а* – октаедр; *б* – тригонтриоктаедр; *в* – тетрагонтриоктаедр;
*г* – пентагонтриоктаедр; *д* – гексаоктаедр

Рисунок 18 – Група октаедра



*а* – гексаедр (куб); *б* – ромбододекаедр; *в* – пентагондодекаедр;
*г* – дідодекаедр; *д* – тетрагексаедр

Рисунок 19 – Група гексаедра (куба)

*Приклад.* На рисунку 20 зображено кристалічний многогранник. Елементи симетрії цього многогранника $L_6 6L_2 7PC$. Сингонія − гексагональна; категорія − середня. Обрана система координат приведена на рисунку 20. Многогранник має дві групи граней, кожна з який утворює просту форму.

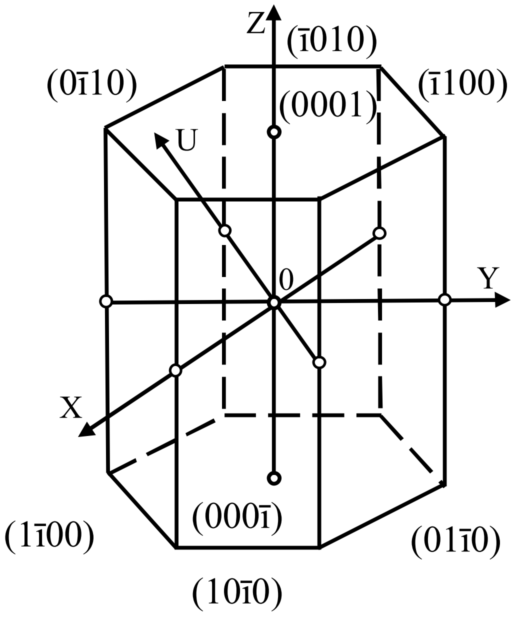


Рисунок 20 – Кристалічний многогранник, утворений гексагональною призмою і пінакоїдом

В таблиці 4 наведено символи усіх граней многогранника, символи простих форм та назви простих форм, яку утворюють грані.

Перша група складається із шести граней, що утворюють бічну поверхню многогранника. Символ цієї простої форми $\{10\bar{1}0\}$, кількість граней −6, назва − гексагональна призма.

Друга група складається з двох граней, розташованих горизонтально. Символ простої форми {0001}, кількість граней − 2, назва − пінакоїд. Гексагональна призма і пінакоїд − відкриті прості форми, які існують лише в комбінації.

Таблиця 4 – Символи граней та прості форми многогранника

| Символи граней | Символ простої форми | Назва простої форми |
|---|---|---|
| $(1\bar{1}00)$ | $\{10\bar{1}0\}$ | гексагональна призма |
| $(10\bar{1}0)$ | | |
| $(01\bar{1}0)$ | | |
| $(\bar{1}100)$ | | |
| $(\bar{1}010)$ | | |
| $(0\bar{1}10)$ | | |
| $(0001)$ | $\{0001\}$ | пінакоїд |
| $(000\bar{1})$ | | |

## Контрольні питання

1) Чим відрізняються відкриті і закриті прості форми?
2) Що називається комбінацією простих форм?
3) Чи можуть бути у кристалічного многогранника декілька різних однойменних простих форм?
4) Яким символом позначається повна сукупність граней, які входять в одну просту форму?
5) Чи може призма мати дванадцять однакових граней?

## Лабораторна робота № 6

## ОПИС ЕЛЕМЕНТАРНОЇ КОМІРКИ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ

Мета роботи − навчитися виділяти елементарну комірку в кристалічній структурі, визначати її тип, координаційні числа і координаційні многогранники, числа структурних та формульних одиниць.

### Основні теоретичні відомості

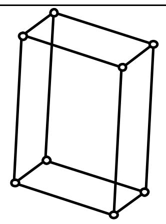
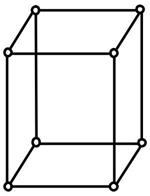
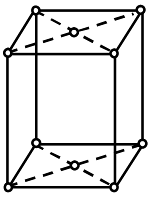
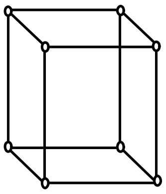
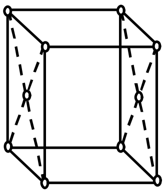
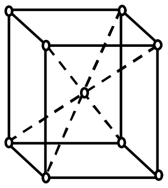
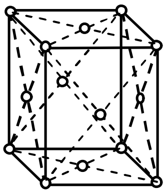
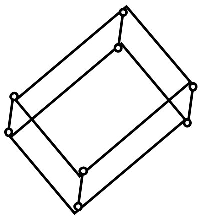
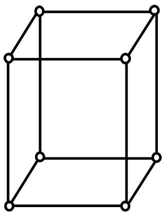
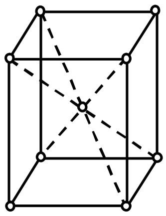
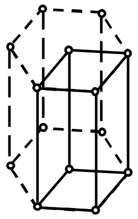
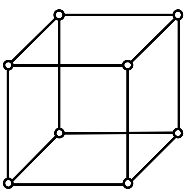
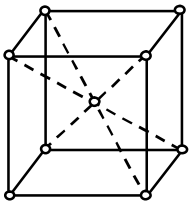
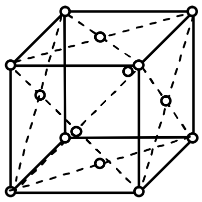
Все різноманіття кристалічних структур описується 14-ма комірками (ґратками) Браве, які відрізняються за формою і симетрією. Перелік цих ґраток і їх розподіл по сингоніях наведені в таблиці 5.

Важливою характеристикою елементарної комірки речовини є *число структурних одиниць*, тобто кількість атомів, що припадає на одну комірку. Відношення чисел структурних одиниць атомів різного виду визначає стехіометричну формулу хімічної сполуки.

Під поняттям “*число формульних одиниць*” мають на увазі кількість формул (молекул) даної сполуки, що припадають на одну елементарну комірку. Формула − це сукупність атомів в емпіричній або брутто-формулі, яка показує загальне число атомів в молекулі даної речовини.

*Координаційне число* визначає кількість найближчих до атома чи іона, що розглядається, сусідніх однотипних атомів чи іонів кристалічної структури. Якщо центри цих найближчих атомів чи іонів з'єднати прямими лініями та утворюється *координаційний многогранник*. Атом, для якого будується координаційний многогранник, знаходиться у його центрі.

Таблиця 5 – Розподіл ґраток Браве по сингоніях

| Сингонія, осьові одиниці | Типи ґраток Браве | | | |
|---|---|---|---|---|
| | Примітивна *P* | Базоцентрована *A*, *B*, *C* | Об'ємноцентрована *I* | Гранецентрована *F* |
| Триклинна<br>$a \neq b \neq c$<br>$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$ |  | | | |
| Моноклинна<br>$a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$ |  |  | | |
| Ромбічна<br>$a \neq b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90°$ |  |  |  |  |
| Тригональна<br>(ромбоедрична)<br>$a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90°$<br>$\gamma = 120^0$ |  | | | |
| Тетрагональна<br>$a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90°$ |  | |  | |
| Гексагональна<br>$a = b \neq c$<br>$\alpha = \beta = 90°$;<br>$\gamma = 120°$ |  | | | |
| Кубічна<br>$a = b = c$<br>$\alpha = \beta = \gamma = 90°$ |  | |  |  |

Щоб виділити елементарну комірку Браве, необхідно знайти 3-и найкоротші некомпланарні трансляції *a*, *b*, *c*, кожна з яких повинна починатись і закінчуватись на однакових вузлах. Потім перевірити, чи можна на них побудувати комірку Браве, виконуючи 3-и основні умови:

а) симетрія комірки повинна відповідати симетрії кристала;

б) елементарна комірка повинна мати максимальну кількість прямих кутів;

в) елементарна комірка повинна мати мінімальний об'єм.

Щоб визначити тип ґратки Браве необхідно виявити додаткові трансляцій.

Наявність примітивних комірок, таких що не містять додаткових трансляцій, характерно для усіх сингоній. Усі чотири базові типи ґраток Браве зустрічаються лише в ромбічних структурах. Відсутність деяких типів в інших сингоніях обумовлена особливістю симетрії, яка дозволяє вибрати інший тип комірки Браве, що краще задовольняє трьом основним умовам.

Для кристалічних структур гексагональної сингонії замість прийнятої раніше базоцентрованої елементарної комірки типу *C* у вигляді гексагональної призми використовують елементарну комірку типу *P* у вигляді паралелепіпеда з основою у формі ромба з кутами при вершинах 60 та 120°. Ця комірка втричі менша колишньої базоцентрованої *C*-комірки.

З переходом від *P* до *C*-комірки трьохкратно зменшується об’єм елементарної комірки і відповідно змінюється кількість атомів в ній, а також числа структурних та формульних одиниць.

Визначаючи числа структурних одиниць необхідно враховувати, що елементарна комірка геометрично представляє собою паралелепіпед, а атоми чи іони − сфери. Тому положення атома в елементарній комірці визначає, яка частина сфери належить вибраній комірки. Якщо розглядати атом, розташований у вершині елементарної комірки (окрім тригональної і гексагональної сингонії), де сходяться одночасно 8 комірок, то одній комірці буде належати лише 1/8 частина даного атома. Якщо атом знаходиться на ребрі, то він одночасно належить чотирьом коміркам і частка його внеску становить 1/4. Атом розташований на грані елементарної комірки належить двом коміркам і тому на кожну з них припадає по 1/2 атома. Лише атоми, які знаходяться в середині комірки, повністю належать їй.

Таким чином, визначаючи числа структурних одиниць необхідно частину внеску кожного атома помножити на їх кількість і результати скласти. Число структурних одиниць, як правило, виражається цілим числом.

Визначення хімічної чи стехіометричної формули сполуки базується на підрахунку числа атомів кожного елемента, що приходиться на одну елементарну комірку.

*Визначення координаційних чисел і координаційних многогранників.* Розглядаючи моделі кристалічних структур речовини, можна впевнитись, що будь-який атом або іон в найщільнішій кубічній чи гексагональній упаковці оточений 12-ма сусідами, тобто його координаційне число дорівнює 12, а координаційний многогранник − кубооктаедр.

Координаційним числам в більшості кристалічних структур відповідають конкретні координаційні многогранники: 2 − гантель; 3 − трикутник; 4 − тетраедр або тригональна піраміда; 6 − октаедр, тетрагональна біпіраміда або тригональна призма; 8 − куб; 12 − кубооктаедр.

При визначенні координаційних чисел шаруватих структур потрібно враховувати 2 координаційних числа. Так, у структурі графіту атом в шарі оточений трьома атомами, але його оточення атомами із сусідніх шарів різне. В одному випадку на найближчій відстані знаходяться 2 атоми, тоді координаційні числа відповідно дорівнюють 3 і 2; в другому − 12, тоді координаційні числа 3 і 12.

Розгляд структур, що складаються з двох або більше типів атомів, потребує визначення координаційних чисел та координаційних многогранників, як для однойменних атомів, так і для атомів різного типу.

## Порядок виконання роботи

1) Виділити елементарну комірку і зобразити її.

2) Спроектувати елементарну комірку на площину (001).

3) Визначити сингонію і тип комірки Браве.

4) Визначити число структурних одиниць, а для хімічних сполук – числа структурних одиниць для кожного елемента сполуки та число формульних одиниць.

5) Визначити координаційні числа і координаційні многогранники.

## Контрольні запитання

1) Яким вимогам повинна відповідати елементарна комірка?

2) Перерахуйте сингонії, в яких зустрічається просторова комірка Браве типу $I$.

3) Визначте число структурних одиниць для міді.

4) Визначте число формульних одиниць для $NaCl$.

5) Назвіть координаційні числа і координаційні многогранники для алмазу і $\gamma$ -$Fe$.

## Перелік рекомендованої літератури

1. Розин К. М. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических многогранников / К. М. Розин, Э. Б. Гусев. – М. : Металлургия, 1982. − 164 с.
2. Розин К. М. Практическое руководство по кристаллографии и кристаллохимии. Методы описания кристаллических структур / К. М. Розин, Э. Б. Гусев. – М. : Металлургия, 1985. – 167 с.
3. Шаскольская М. П. Кристаллография / Шаскольская М. П. – М. : Высшая школа, 1982. – 375 с.
4. Попов Г. М. Шафрановский И. И. Кристаллография / Г. М. Попов, И. И. Шафрановский. – М. : Высшая школа, 1970. – 368 с.
5. Шафрановский И. И., Алявдин В. Р. Краткий курс кристаллографии / И. И. Шафрановский, В. Р. Алявдин. – М. : Высшая школа, 1984. – 120 с.
6. Бокий Г.Б. Кристаллохимия / Г. Б. Бокий. – М. : Наука, 1971. – 400 с.
7. Современная кристаллография : в 4 т. /Под ред. Б. К. Вайнштейна. – М. : Наука, 1979-1981.
8. Куровець М. І. Кристалографія і мінералогія / М. І. Куровець. – Львів : Світ, 1996. − 236 с.