coordinates". A convex polyhedron is named partly everted, if it results from the initial one by moving some of its planes to the opposite side of the origin of coordinates at any distances from the latter. A convex polyhedron is named reduced, if some facets are eliminated (moved to infinity) in the above procedure illustrated with trigonal trapezohedra and dipyramids.

It is found that some everted polyhedra are of the antisymmetry point groups, which are not subgroups of the s.p.g.'s of the initial polyhedra. The everted polyhedra are shown to result from the combined (initial + everted) polyhedron: a trigonal trapezohedron generates a ditrigonal scalenohedron of the $\bar{3}'m'$ s.p.g., while a trigonal dipyramid generates a hexagonal dipyramid of the ***6'/mmm'*** s.p.g. Therefore, they are allowed to have the s.p.g.'s being the subgroups of the s.p.g.'s of the composed polyhedra: ***m'*** of $\bar{3}'m'$ and ***2'***, ***2'2'2***, ***mm'2'*** of ***6'/mmm'***.

The "partly everted convex polyhedra" are physically interpreted as crystals with the facets of growth and dissolution or as crystal twins with the facets of both enantiomorphous individuals.

Acknowledgements

The authors are grateful to the unknown referees for the highly skilled comments.

References

1. Heesch, H. (1930). Z. Krist. 73, 325-345.
2. Litvin, D. B. (2008). Acta Cryst. A64, 419-424.
3. Shubnikov, A. V. (1951). Symmetry and Antisymmetry of Finite Figures. Moscow: Acad. Press.
4. Voytekhovsky, Y. L. (2002). Acta Cryst. A58, 622-623.
5. Voytekhovsky, Y. L. & Stepenshchikov, D. G. (2004). Acta Cryst. A60, 582-584.
6. Voytekhovsky, Y. L. & Stepenshchikov, D. G. (2017). Acta Cryst. A73, 480-484.

РАЗВИТИЕ МЕТОДА ОЦЕНКИ ВИДИМОЙ СИММЕТРИИ ИСКАЖЁННОГО КРИСТАЛЛА

https://doi.org/10.31241/MIEN.2018.14.09

Степенщиков Д.Г.

Геологический институт КНЦ РАН, Апатиты, stepen@geoksc.apatity.ru

Анотация

В статье рассмотрен малоизвестный способ оценки видимой симметрии искажённых кристаллов с помощью отношения площадей граней, переходящих друг в друга при симметрических преобразованиях. Предлагается вниманию дальнейшее развитие метода.

Симметрию кристалла можно разделить на два вида – внутреннюю и внешнюю. Внутренняя симметрия характеризует строение кристаллической решётки и описывается 230 пространственными группами симметрии. Внешняя симметрия характеризует форму и взаимное расположение граней кристалла и описывается 32 точечными группами симметрии. В то время как внутренняя симметрия кристалла чётко определена (любая иная симметрия при том же химическом составе соответствует другому минералу), внешняя существенно зависит от степени идеализации формы кристалла – конфигурации, скульптуры, взаимного расположения граней и т.д. В результате оценка внешней симметрии может колебаться от максимальной, определяемой кристаллической решёткой, до минимальной в случае ксеноморфного кристалла.

Уровень детализации модели кристалла зависит от конкретного исследования. В частности, если рассматривать рост кристалла, огранённого гранями одной простой формы, в анизотропной питающей среде, то можно предположить, что все его грани – это плоскости, удалённые от центра роста

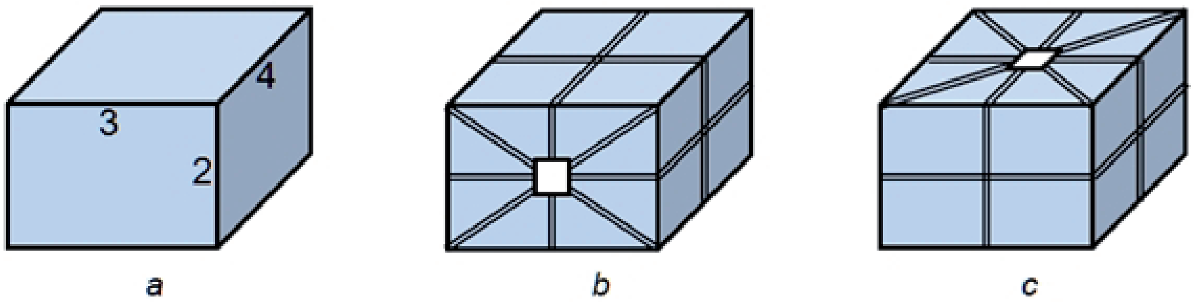

Рис. 1. Два способа реализации симметрии ***4/mmm*** *на искажённом кубическом кристалле.*

на различные расстояния, зависящие от концентрации питающего раствора в данном направлении. Получаемая при этом форма кристалла называется реальной [1] или искажённой (вынужденной, видимой, поверхностной) [3].

В [3] предложен метод оценки симметрии искажённого кристалла, заключающийся в сравнении площадей граней, переходящих друг в друга при симметрических преобразованиях. Если отношение меньшей площади к большей превышает некоторое наперёд установленное число $\boldsymbol{x}$ (от 0 до 1), то грани считаются равными. Очевидно, если $\boldsymbol{x} = 0$, то грани равны при любых различных площадях. Если $\boldsymbol{x} = 1$, то от них требуется строгое равенство площадей (в [3] $\boldsymbol{x}$ равно 0.5). Точечную группу симметрии идеальной формы кристалла, получаемой при равном развитии граней одной простой формы, можно разложить на элементы – плоскости симметрии, прямые и инверсионные оси симметрии, центр инверсии. Каждый элемент симметрии разбивает множество граней кристалла на подмножества, в каждом из которых все грани могут быть отображены с помощью данного элемента симметрии друг в друга. Если каждое подмножество граней удовлетворяет заданному отношению площадей $\boldsymbol{x}$, то текущий элемент симметрии считается присущим форме кристалла (допустимым), в противном случае он отбрасывается. После перебора всех элементов симметрии будет получен их набор, в общем случае не соответствующий определённой точечной группе симметрии. Так, в [2] показано, что на искажённом кубическом кристалле при данном методе оценки могут присутствовать только две из трёх осей 4-го порядка. Но групп симметрии ровно с двумя осями 4-го порядка нет. Как пишут сами авторы: «…описанные выше подходы к более или менее точному изучению искажённых кристаллических форм представляют лишь первые пробные и в достаточной мере примитивные шаги в данной области» [3].

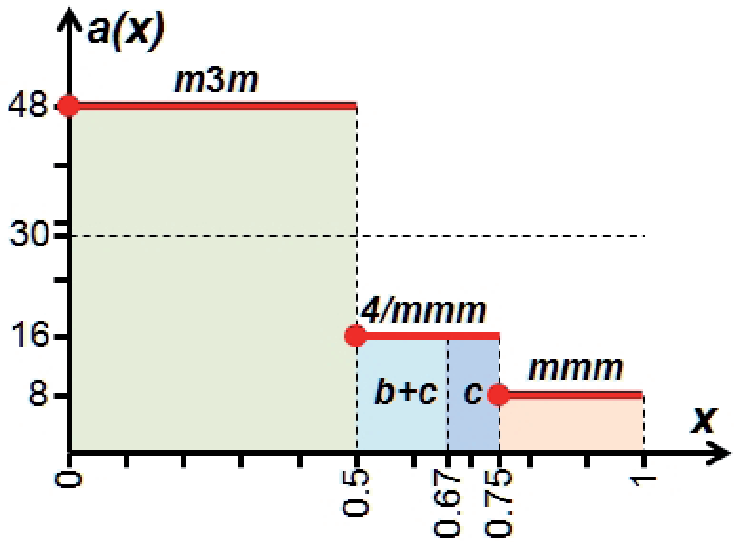

*Рис. 2. График функции **a(x)** для искажённого кристалла (рис. 1) с указанием соответствующих групп симметрии и значения средней оценки симметрии. Голубая и синяя зоны соответствуют группе **4/mmm**, реализованной дважды в голубой зоне (b и c, рис. 1) и один раз в синей зоне (c).*

Нами предлагается развитие указанного подхода. При данном наборе ***S*** допустимых элементов симметрии выбираются все те точечные группы (из 32), полный набор элементов которых полностью входит в ***S***. Из таких групп выбираются «самые симметричные», т.е. те, порядок группы автоморфизмов которых максимален. Таких групп может быть несколько, но все они в равной степени могут характеризовать видимую симметрию искажённого кристалла и поэтому должны быть равно приняты во внимание. Более того, возможны ситуации, когда одна группа симметрии может быть реализована на кристалле несколькими способами.

Рассмотрим подход на примере искажённого кубического кристалла со сторонами 2, 3 и 4 ед. при значении $\boldsymbol{x} = 0.6$ (рис.1 *a*). В результате сравнения граней на кристалле останутся, помимо прочего, только две оси симметрии 4-го порядка. Кристалл будет иметь видимую симметрию **4/*mmm***, реализованную двумя способами (рис. 1 *b*, *c*).

При оценке симметрии с помощью данного метода следует учитывать комбинаторный тип кристалла – способ контактирования граней между собой и их конфигурацию. Определяемая симметрия искажённого кристалла в общем случае будет ниже. Но замечено, что с некоторого, близкого к 1, значения ***x*** учёт комбинаторного типа не влияет на оценку симметрии кристалла.

Очевидно, итоговая симметрии может меняться в зависимости от значения ***x***, что придает ей неоднозначность. Логичным избавлением от этого можно считать переход к средней оценке. Суть состоит в том, что параметр ***x*** пробегает все значения, и для каждого определяется порядок группы автоморфизмов ***a(x)*** соответствующей «максимально симметричной» группы. Среднее значение полученной функции, т.е.

$$\bar{a} = \frac{1}{(1-0)}\int_0^1 a(x)dx$$

даст некоторое число ***a*** от 1 (асимметричный кристалл) до $\boldsymbol{a}_{\mathbf{max}}$ – порядка группы автоморфизмов группы симметрии идеальной формы кристалла (например, 48 для куба). Эта числовая оценка не содержит качественного характера симметрии, но за таковой можно выбрать среди всех допустимых групп симметрии, получаемых при любых значениях ***x***, ту, которая имеет порядок групп автоморфизмов, ближайший к ***a***. Так, для рассмотренного примера ***a*** = 30. Среди допустимых групп симметрии (***m*3*m***, **4/*mmm***, ***mmm***) ближайшей будет **4/*mmm*** с порядком групп автоморфизмов 16 (рис. 2). Достоинством средней оценки является то, что она позволяет различать кристаллы, мало отличимые «на глаз» по линейным параметрам, в то время как группы симметрии представляют собой дискретные характеристики.

Предложенные подходы не исчерпывают всех вариантов развития метода. Так, в нём не учитываются длины рёбер кристалла (разве что косвенно, при учёте комбинаторного типа). С другой стороны, незаслуженно забытая попытка оценки видимой симметрии кристалла показывает необходимость отхода от парадигмы простых форм и дискретной симметрии – далеко не всегда кристалл является правильным многогранником, а его видимая симметрия почти никогда не оценивается однозначно.

Список литературы

1. Войтеховский Ю.Л., Степенщиков Д.Г. Реальные кристаллографические простые формы // Зап. ВМО. 2004. № 2. С. 112-120.
2. Степенщиков Д.Г. О внешней симметрии кристалла // Матер. Всерос. Фёдоровской научн. сессии. СПб., 2010. С. 152-154.
3. Шафрановский И.И., Корень Р.В., Дубов П.Л. К методике изучения искажённых форм на кристаллах минералов // Зап. ВМО. 1971. № 1. С. 42-48.