Доклады Академии Наук СССР
1937. Том XIV, № 6

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

И. И. ШАФРАНОВСКИЙ

К ВОПРОСУ О РАСПРЕДЕЛЕНИИ УГЛОВЫХ ВЕЛИЧИН НА КРИСТАЛЛАХ

(Представлено академиком А. Е. Ферсманом 14 I 1937)

В статье «Некоторые законности в распределении полярных расстояний для кристаллов средних сингоний»(1) мной дается подсчет чисел всех без исключения форм с косыми гранями, приходящимися на то или иное полярное расстояние в тригональных, тетрагональных и гексагональных веществах (Подсчет сделан на основе материалов, собранных в подготовляемом к печати «Определителе кристаллов» проф. А. К. Болдырева и В. В. Доливо-Добровольского. Горизонтальные и вертикальные грани в расчет не принимались. Опущены также некоторые сомнительные и мало достоверные формы). Результаты подсчета были сглажены методом «скользящего окошка»(2) с интервалом («окошком») в 51 строку по вертикали и представлены в виде трех кривых с одним максимумом для каждой сингонии отдельно (при «окошке» с меньшим интервалом получаются кривые с несколькими максимумами). В результате обнаружилось, что единственные максимумы для этих трех кривых совпадают с точностью до одного градуса.

Для тригональных кристаллов максимум отвечает—55°, для тетрагональных—54°, для гексагональных—54°.

Сходные результаты получаются и для средних арифметических значений полярных расстояний.

Для 1429 форм с косыми гранями, наблюдавшимися на 614 тригональных веществах, среднее арифметическое равно 54°. Для 1057 форм на 602 тетрагональных веществах оно отвечает 52°. Для 488 форм на 456 гексагональных веществах оно также равно 52°.

Следует иметь в виду, что полученные при сглаживании максимумы, а также средние арифметические не отвечают реальным полярным расстояниям. Они лишь указывают на то, что и по ту и по другую сторону от приведенных выше углов укладываются одинаковые количества полярных расстояний. Вместе с этим полученные результаты замечательны тем, что в них совершенно скрадывается то резкое различие, которое существует между гексагональными, с одной стороны, и тетрагональными и тригональными структурами,—с другой.

Близость приведенных выше углов к 54°44′, казалось бы, заставляет искать объяснения в наличии кристаллов, приближающихся к изометрическому типу.

В самом деле, полярное расстояние $\{111\}$ в обычной кубической установке для кубического кристалла отвечает 54°44′, полярное расстояние $\{100\}$ в тригональной установке для кубического же кристалла также отвечает 54°44′. Для гексагональных кристаллов полученные сходные результаты при этом остаются невыясненными. Однако приведенное объяснение нельзя считать удовлетворительным, так как в расчет принимались не только грани, отвечающие наиболее плотным сеткам, но все косые грани вообще.

Помимо этого объяснение должно быть общим для всех трех сингоний, тогда как в приведенном выше гексагональная сингония выпадает. В связи с этим возникло следующее предположение: огромное количество принятых в расчет косых граней с различными полярными расстояниями приближается к шару, покрытому более или менее равномерно множеством плоскостей. Поэтому среднее полярное расстояние для взятых граней должно приближаться к среднему полярному расстоянию для бесконечного количества мельчайших плоскостей, равномерно покрывающих шар. Такое полярное расстояние, очевидно, отвечает параллели, делящей поверхности полушария на два пояса, равных по площади.

Эта параллель соответствует полярному расстоянию в 60°.

Однако изучение распределения полярных расстояний показывает, что считать его равномерным нельзя. Последнее особенно ясно видно из следующей таблицы, где приводится распределение чисел простых форм по градусным декадам полярных расстояний.

Тригональные кристаллы		Тетрагональные кристаллы		Гексагональные кристаллы	
Полярное расстояние (ρ)	Число форм	Полярное расстояние (ρ)	Число форм	Полярное расстояние (ρ)	Число форм
0°—10°	12	0°—10°	11	0°—10°	0
10°1′—20°	32	10°1′—20°	24	10°1′—20°	10
20°1′—30°	108	20°1′—30°	83	20°1′—30°	45
30°1′—40°	200	30°1′—40°	150	30°1′—40°	85
40°1′—50°	242	40°1′—50°	186	40°1′—50°	88
50°1′—60°	235	50°1′—60°	252	50°1′—60°	104
60°1′—70°	260	60°1′—70°	210	60°1′—70°	85
70°1′—80°	237	70°1′—80°	121	70°1′—80°	55
80°1′—90°	105	80°1′—90°	20	80°1′—90°	16

По этой таблице совершенно ясно намечается закономерное возрастание числа форм, приходящихся на ту или иную градусную декаду полярных расстояний.

Максимальное их количество приходится и в тетрагональной и в гексагональной сингониях на декаду 50°1′—60°. Некоторое исключение представляют тригональные кристаллы, где два максимума отвечают декадам 40°1′—50° и 60°1′—70°, тогда как декаде 50°1′—60° отвечает меньшее число, лежащее между двумя максимумами. Сходное с последним обстоятельство уже отмечалось Е. С. Федоровым в его статье «О составлении таблиц для кристаллохимического анализа» ([3]). По Федорову, кривые, отвечающие распределениям главных чисел, имеют вдавленности против изотропных членов (отвечающих кубическим формам и потому исключенных), так что вместо ожидаемых максимумов получаются новые минимумы между двумя частными максимумами.

Во всяком случае приведенные таблицы с несомненностью указывают на то, что приравнивать совокупности принятых в расчет граней к поверхности шара, равномерно покрытой бесчисленным количеством мельчайших плоскостей, нельзя.

Итак, вопрос о сходстве наших результатов для всех трех сингоний остается открытым. В связи с этим не лишено интереса то обстоятельство, что угол в 54°44′ помимо кристаллографии имеет особое значение также и в гидродинамике. Значение его выясняется из нижеследующих данных, почерпнутых мной из статьи В. В. Шулейкина ([4]).

Пусть в жидкости с плотностью σ движутся два шара, имеющих радиусы r_1 и r_2 и находящихся в данный момент на расстоянии L один от другого. Скорость первого шара v_1, скорость второго v_2. По К. Бьеркнесу ([5]) оба шара при этом действуют друг на друга с силой f:

$$f = \pi \cdot \sigma \cdot v_1 \cdot v_2 \frac{r_1^3 r_2^3}{L^4}\left[\cos(v_1 v_2) + 3\cos(v_1 \cdot L)\cos(v_2 \cdot L)\right]. \tag{1}$$

В круглых скобках здесь проставлены углы, образованные скоростями v_1 и v_2 между собой и с прямой, соединяющей центры обоих шаров.

В частном случае, когда радиусы обоих шаров равны и когда они движутся с одной и той же скоростью v по одному и тому же направлению, формула упрощается:

$$f = \pi \cdot \sigma \cdot v^2 \cdot \frac{r^6}{L^4}[1 - 3\cos^2\alpha]. \tag{2}$$

Через α здесь обозначен угол между направлением скорости движения и прямой, соединяющей центры заднего и переднего шара.

Из формулы (2) следует, что сила f превращается в нуль при следующем значении угла α:

$$\alpha_0 = \arccos\sqrt{\frac{1}{3}}.$$

Отсюда вытекает, что при величине угла $\alpha = 54°44'$ * силы взаимодействия между движущимися шарами отсутствуют.

Если угол α больше 54°44′, правая часть уравнения (2) имеет положительный знак, причем оба движущихся шара взаимно притягиваются.

Силы взаимного притяжения достигают максимальной величины при $\alpha = 90°$ (при этом оба шара движутся по направлению, перпендикулярному к линии, соединяющей центры обоих шаров; расстояние L постоянно):

$$f_{\perp} = \pi \cdot \sigma \cdot v^2 \frac{r^6}{L^4}:$$

Если угол α меньше 54°44′, то правая часть уравнения (2) имеет отрицательный знак, причем оба шара взаимно отталкиваются. Силы взаимного отталкивания достигают максимальной величины при $\alpha = 0$ (при этом задний шар движется в точности вслед за передним):

$$f_{\parallel} = -2\pi \cdot \sigma \cdot v^2 \frac{r^6}{L^4}.$$

* В статье В. В. Шулейкина значение угла α_0 несколько округлено (54°40′).

Отсюда следует, что для устранения сил взаимного притяжения или отталкивания оба шара должны двигаться так, чтобы линия, соединяющая их центры, образовывала угол в 54°44′ с направлением их движения.

Из приведенных данных видим, что критический угол α_0 отвечает в точности полярному расстоянию октаэдра. Последнее видно и из соответственных формул. Полярное расстояние октаэдра находится по формуле:

$$\operatorname{tg} \rho_0 = \sqrt{2}.$$

Для угла α_0 приводилось выше следующее равенство:

$$\alpha_0 = \arccos \sqrt{\frac{1}{3}}.$$

Как известно,

$$\operatorname{arc\,tg} \sqrt{2} = \arccos \sqrt{\frac{1}{3}}.$$

Итак,

$$\rho_0 = \alpha_0 = 54°44'08''.$$

Здесь невольно напрашивается аналогия между равными шарами, движущимися по одному направлению в жидкости, и атомами или ионами в растворе, из которого образуется кристалл, стремящимися к кристаллическому зародышу.

Схематически представим себе кристаллический зародыш в виде прямой. По нормали к ней притягиваются две одинаковые элементарные частицы, находящиеся в одной с ней плоскости (ионы, атомы). По вышесказанному угол между нормалью к прямой (направлением движения) и прямой, соединяющей центры обеих частиц, образует 54°44′, когда силы взаимодействия между частицами прекращаются. При этом эти частицы представляют нечто вроде самостоятельного обрывка (зародыша) кристаллического ряда. Угол между нормалью к прямой, соединяющей обе частицы, и прямой, по направлению к которой они движутся, также равен 54°44′.

При присоединении частиц к прямой, к которой они движутся, угол между нормалью к линии, соединяющей центры частиц, и прямой отклонится в ту или иную сторону от 54°44′.

Все вышесказанное является лишь грубо схематическим построением на плоскости, которое можно рассматривать только как весьма приближенное и неточное предположение.

Однако думается, что самый факт совпадения угла в 54°44′ в гидродинамике и кристаллографии не лишен интереса и заслуживает внимания.

Цель настоящей заметки и состоит в том, чтобы отметить указанное совпадение.

Кабинет кристаллографии
Ленинградского государственного университета

Поступило
14 I 1937.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] И. И. Шафрановский, Записки Минералогического о-ва, LXV, 55 (1936); также J. J. Schafranowsky, ZS. f. Kristallographie, **94**, 33—39 (1936). [2] А. и О. Шубниковы, Труды Мин. музея Ак. Наук, I, 1—34. [3] Е. С. Федоров, Записки Горного института, II, 259 (1910). [4] В. В. Шулейкин. Известия Ак. Наук, VII серия, № 6—7, 985 (1935). [5] C. A. Bjerknes, Repertorium der reinen und angewandt. Math., 1, 264 (1887).