

КОМБИНАТОРНАЯ КРИСТАЛЛОМОРФОЛОГИЯ – НОВЫЙ РАЗДЕЛ  
КРИСТАЛЛОГРАФИИ

**Войтеховский Ю.Л. (woyt@geoksc.apatity.ru)**  
Кольское отделение. Геологический институт КНЦ РАН

COMBINATORIAL CRYSTALLMORPHOLOGY – A NEW PART OF  
CRYSTALLOGRAPHY

**Voytekhovsky Y.L. (woyt@geoksc.apatity.ru)**  
Kola branch. Geological Institute KSC RAS

Со времени изобретения и бурного развития проникающих методов исследования кристаллов исследовательский акцент сместился с его поверхности внутрь кристаллической решетки. Негласно подразумевается, что именно там, в глубине, находятся ответы на все вопросы о механизмах и условиях минералообразования. Кристалломорфология, теоретический багаж которой в главном исчерпывается простыми формами, их разрешенными комбинациями и точечными группами симметрии, рассматривается как введение в истинную кристаллографию. Между тем, поверхность кристалла всегда будет ареной борьбы и компромиссом между внутренней интенцией, требованием решетки и внешними условиями, налагающими на теоретический идеал те или иные реальные ограничения, диссимметризации. Именно рассмотрение последних позволяет развить теорию кристалломорфологии.

Во введении к книге (Белов и др., 1985, с. 6) читаем: «Рассмотрим теперь основные разделы кристаллографии. 1. *Математическая кристаллография*. Ее основные направления следующие. Общая теория симметрии и теория групп. Точечные и пространственные группы симметрии. Обобщенная симметрия (антисимметрия, цветная симметрия),  $n$ -мерная симметрия. Статистическая симметрия, группоиды. Теория решетки,  $n$ -мерные решетки. Теория разбиения, **теория полиэдров...**» (здесь и далее выделено мной – Ю.В.) К сожалению, не уточнено содержание «теории полиэдров» как одного из основных направлений математической кристаллографии. Из контекста вроде бы следует, что под ней подразумевается теория параллелоэдров, а не кристаллических полиэдров.

О последних явно говорит И.И. Шафрановский: «Быть может, ни в одной из естественных (естественно-исторических) наук не проявляется так ярко двойственность характеристик реальных природных объектов, как в кристаллографии вообще и в минералогической кристаллографии в частности. Объясняется это тем, что наука о кристаллах особенно продвинулась по линии геометризации и идеализации кристаллографических форм. Переход исследователей от идеализированных модельных полиэдров к реальным, обычно искаженным формам природных кристаллов далеко не

прост. Прежде всего **приходится отказаться от условий обязательного равенства граней одной и той же простой формы**. Полная характеристика конкретного кристалла должна учитывать два момента. С одной стороны, следует рассматривать его идеализированный аспект, согласованный с истинной структурной симметрией и поданный в виде модели, изображающей внешнее ограничение, получаемое в идеальных условиях формирования, с другой – **необходимо дать по возможности полное понятие о реальном кристаллическом полиэдре, со всеми его несовершенствами и отклонениями от идеала** (необходимы как идеальная, так и реальная трактовка природных кристаллических минералов)» (там же, с. 262-263).

Термодинамическую трактовку неидеальности природных кристаллических полиэдров дал Э.Н. Елисеев: «Интересна идея Дж. У. Гиббса о том, что **морфологическая гетерогенность возникает в неравновесных физико-химических условиях**, тогда как в равновесных условиях роста кристаллы «остаются подобными» самим себе. <...> Именно этим – неравновесностью природных процессов кристаллизации – объясняется огромное разнообразие габитусных форм у природных минералов и более чем ограниченное разнообразие морфологических (габитусных) форм у тех же минералов (фаз), но экспериментально получаемых при условиях, близких к равновесным (кристаллизующейся фазы-минерала с жидкой фазой). Так, в природе известны сотни форм для кальцита, тогда как в экспериментах этот минерал принимает форму ромбоэдра и только» (там же, с. 219-220).

Таким образом, вопрос о способах фиксации кристаллической простой формы (или их комбинаций) с неравными гранями (одной и той же простой формы) поставлен И.И. Шафрановским более 25 лет назад. Во исполнение этой программы автором введено понятие реальной кристаллической простой формы (и их комбинаций) как полиэдра, ограниченного хотя бы некоторыми из граней идеальной формы, находящимися на произвольном расстоянии от начала координат. Поставлен вопрос о систематическом перечислении реальных кристаллических простых форм для заданной идеальной формы или их комбинаций. В компьютерном алгоритме генерирования реальные формы получают независимым движением граней идеальной формы вдоль нормалей, фиксируются на уровне классов с точностью до комбинаторного типа (изоморфизма реберных графов) и дополнительно характеризуются точечной группой комбинаторной (топологической) симметрии. Последняя интерпретируется в рамках принципа диссимметрии П. Кюри, вскрывая связь морфологической гетерогенности и физико-химической неравновесности, по Дж. У. Гиббсу. Результаты перечисления реальных кристаллических простых форм приведены в работах (Войтеховский, 2011; Войтеховский, Степенщиков, 2004а, 2004б, 2007; Войтеховский и др., 2006).

*Белов Н.В., Вайнштейн Б.К., Елисеев Э.Н. (Ред.) Методологические проблемы кристаллографии М.: Наука, 1985. 296 с.*

Войтеховский Ю.Л. 12 этюдов на темы кристалломорфологии, минералогии и петрографии. Апатиты: Изд-во К & М, 2011. 204 с.

*Войтеховский Ю.Л., Степеничиков Д.Г.* Реальные кристаллографические простые формы // Зап. ВМО. 2004а. № 2. С. 112-120.

*Войтеховский Ю.Л., Степеничиков Д.Г.* Комбинаторная кристалломорфология. Реальные кристаллографические простые формы. Апатиты: Изд-во К & М, 2004б. 275 с.

*Войтеховский Ю.Л., Степеничиков Д.Г.* Комбинаторная кристалломорфология. III. Комбинации куба и октаэдра. Апатиты: Изд-во К & М, 2007. 834 с.

*Войтеховский Ю.Л., Степеничиков Д.Г., Макаров М.С.* Теорема Минковского и описание формы кристалла // Зап. РМО. 2006. № 5. С. 101-102.