

УДК (548.0+549):536.7

ПОЛЯРНОСТЬ РЕТИКУЛЯРНЫХ ГРАНЕЙ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ГРАННОЙ СИСТЕМЫ КРИСТАЛЛА

© 2024 г. Л. А. Адмакин^{1,*}, А. Л. Адмакин¹¹ООО “Международная ассоциация последипломного образования”, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: admakin.leonid@yandex.ru

Поступила в редакцию 24.08.2023 г.

После доработки 12.10.2023 г.

Принята к публикации 27.04.2024 г.

В кристаллографию вводится новое понятие — полярность ретикулярных граней кристалла. Ретикулярные грани разделяются на базисные и дополнительные. Базисные грани, систематические в гранной системе, увеличиваются лишь при росте кристалла. Форма кристалла инвариантная, устойчивая в границах его стабильности и не влияет на состояние его равновесия. Дополнительные грани, напротив, сокращаются и исчезают, поэтому являются переменными экстенсивными параметрами гранной системы. Они не образуют собственной системы и ассоциируют с базисными, определяя вариантность гранной системы. Полярная система неравновесная, самопроизвольно и необратимо преобразуется в конечную базисную гранную систему и находится в квазистатическом равновесии. Габитус базисного кристалла инвариантной формы изменяется в процессе его роста по механизму трансляционной симметрии.

DOI: 10.31857/S0023476124050113, EDN: ZCNPYT

ВВЕДЕНИЕ

О. Браве [1] разделил совокупность граней кристалла на два типа: грани первого рода, или идентичные по Р.Ж. Гаюи [2], и грани ретикулярные, образующие замкнутый геометрический многогранник. Грани первого рода — индикаторы элементов симметрии, которыми приводятся к соответствующим ретикулярным граням. Бинарную систематику Браве считают в геометрической кристаллографии вполне достаточной и используют до сих пор. В ней ретикулярные грани представляются динамически однородными, т.е. они ведут себя при росте кристалла идентично. Критериев их разделения нет. Этого же представления об однородности придерживался Дж.В. Гиббс [3] при выводе условия равновесия кристалла. В его функции минимума все ретикулярные грани идентичны:

$$\sum \sigma_i F_i = \min \text{ при } V = \text{const}, \quad (1)$$

где σ_i — парциальная свободная энергия грани, F_i — площадь ретикулярной грани, V — объем кристалла. Можно произвольно исключить любую ретикулярную грань, но смысл функции не изменится. Гранную систему кристалла нередко считают случайной [4].

Гранная система кристалла — естественное материальное образование. Она характеризуется собственной термодинамической устойчивостью, самопроизвольно преобразуется и приходит в состояние равновесия. Однако условие равновесия Гиббса, основанное на представлении об однородности ретикулярных граней, не выполняется. В последнее время констатировалось [5, 6], что ретикулярные грани любого кристалла полярные. Соответственно, стиль развития гранной системы преобразился коренным образом.

ТИПЫ РЕТИКУЛЯРНЫХ ГРАНЕЙ

Ретикулярные грани — основные термодинамические элементы гранной системы, идентичные грани Гаюи — грани симметрии кристалла. До последнего времени ретикулярные грани рассматривали как однородные совокупности гранной системы. Этого же представления, как отмечено выше, придерживался Дж.В. Гиббс [3] при выводе условия равновесия кристалла. Однако это представление о ретикулярных гранях оказалось ошибочным [6]. Актуальным стало их разделение на два самостоятельных типа: базисные и дополнительные, с подразделением дополнительных ретикулярных граней на реберные и вершинные.

Базисные ретикулярные грани, или b -грани, характеризуются миллеровскими индексами $\{100\}$ и $\{110\}$, идентичными индексам элементарной ячейки. Они систематические, регулярные, могут образовывать собственную замкнутую b -гранную систему типа простого кристаллического базисного полиэдра. Это специфический тип ретикулярных граней в том отношении, что b -грани характеризуются наибольшими ретикулярными плотностями, соответственно, наименьшими значениями свободной поверхностной энергии, скоростями роста. Базисный кристалл однороден, лишь в этом случае выполняется условие равновесия Гиббса.

Дополнительные ретикулярные грани, или s -грани. Их плоскости ориентированы косо относительно системы базисных граней, имеют индексы $\{hk0\}$, $\{hkl\}$, не образуют собственной гранной системы, ассоциируют с b -гранями, подчиняясь симметрии кристаллической решетки. Они характеризуются наименьшими ретикулярными плотностями и скоростями роста, соответственно, наибольшей парциальной свободной энергией. Наибольшие значения свободной поверхностной энергии делают эти грани неустойчивыми. При росте кристалла они самопроизвольно и необратимо сокращаются и исчезают, т.е. являются переменными экстенсивными параметрами гранной системы.

ОДНОРОДНОСТЬ И ПОЛЯРНОСТЬ РЕТИКУЛЯРНЫХ ГРАНЕЙ

Однородность и полярность — два фундаментальных свойства гранной системы кристалла. Ретикулярные грани считают однородными начиная с кристаллографических работ О. Браве [1]. Представление об однородности интуитивно вытекает из геометрических понятий и принципов Браве, основанных на точечном методе, в котором ретикулярные грани исследуют в статическом режиме с помощью элементов симметрии. Лишь спустя почти 130 лет Н.Н. Шефтал [7] осторожно отметил, что “уравнение (условие равновесия Гиббса (1) — авторы Л.А. и А.А.) относится к равновесию, а кристалл в равновесной форме все же вырастает”. Так как динамическое состояние гранной системы прежде не принимали во внимание, все ретикулярные грани считали однородными, с собственными ретикулярными плотностями, но не различимыми по поведению при росте кристалла. Затем представление об однородности было воспринято Дж.В. Гиббсом [3] при выводе условия равновесия (1), в котором индекс i учитывает все без исключения ретикулярные грани системы как однородные. И это естественно, так как исследовали статическую гранную систему, и в этом случае нет критерия дифференциации ретикулярных граней. Лишь в динамическом режиме можно выявить неоднородность ретикулярных граней по стилям поведения. Таких групп ретикулярных граней всего

две — они ведут себя диаметрально противоположно и являются полярными. В полярной системе каждую группу ретикулярных граней в динамическом режиме необходимо учитывать отдельно, так как базисные ретикулярные грани только растут, а дополнительные, наоборот, лишь сокращаются и исчезают. Каждая группа граней однородная, но система, состоящая из их совокупности, является неоднородной, полярной [6], и функция $\sum \sigma_i F_i$ изменяется сложным образом; возможен даже вариант, когда $\sum \sigma_i F_i = 0$. Наконец, функция $\sum \sigma_i F_i$ непрерывная, гладкая, и точечные определения дают множество частных ее значений, поэтому рассмотрение каждого такого значения в качестве показателя равновесия гранной системы лишено смысла. Следовательно, минимум функции (1) не существует, условие равновесия Гиббса не может выполняться.

ГРАННЫЕ СИСТЕМЫ КРИСТАЛЛА

Термодинамика кристалла исследует совокупности ретикулярных граней гранной системы. В зависимости от того, находятся ли в системе в совокупности с базисными гранями дополнительные ретикулярные грани или нет, различаются две группы гранных систем: полярная и базисная [6]. Это разделение новое в теории роста кристалла. Оно привело к открытию полярности ретикулярных граней, которое прежде оставалось недостающим звеном. Полярная гранная система бинарная, комбинированная — bs -гранная система. Базисная, простая — b -гранная система.

Полярная гранная система, или bs -гранная система. Эта система образована совокупностью базисных и дополнительных ретикулярных граней и характеризуется особыми динамическими свойствами при росте кристалла. Ее базисные грани систематические, инвариантные в системе любого кристалла, могут лишь расти, оставаясь в квазистатическом равновесии. Дополнительные ретикулярные грани — переменные кристаллографические элементы, не образуют собственной замкнутой системы, ассоциируют с базисными ретикулярными гранями, сопрягаясь по общим ребрам. Преобразование полярной гранной системы совершается по схеме

bs -гранная система $\rightarrow b$ -гранная система.

Этот процесс однонаправленный, как превращение содержащейся в bs -гранной системе свободной энергии в теплоту. В качестве иллюстрации приведем преобразование полярной призматически-ромбоэдрической формы кристалла β -кварца в базисную гранную систему, представленную последовательностью призматически-бипирамидальной и бипирамидальной форм (рис. 1). Призматически-ромбоэдрическая форма (рис. 1а) низкотемпературная [8]. На экспозиции этой формы показаны базисные грани $\{1011\}$, $\{1101\}$, $\{0111\}$ и

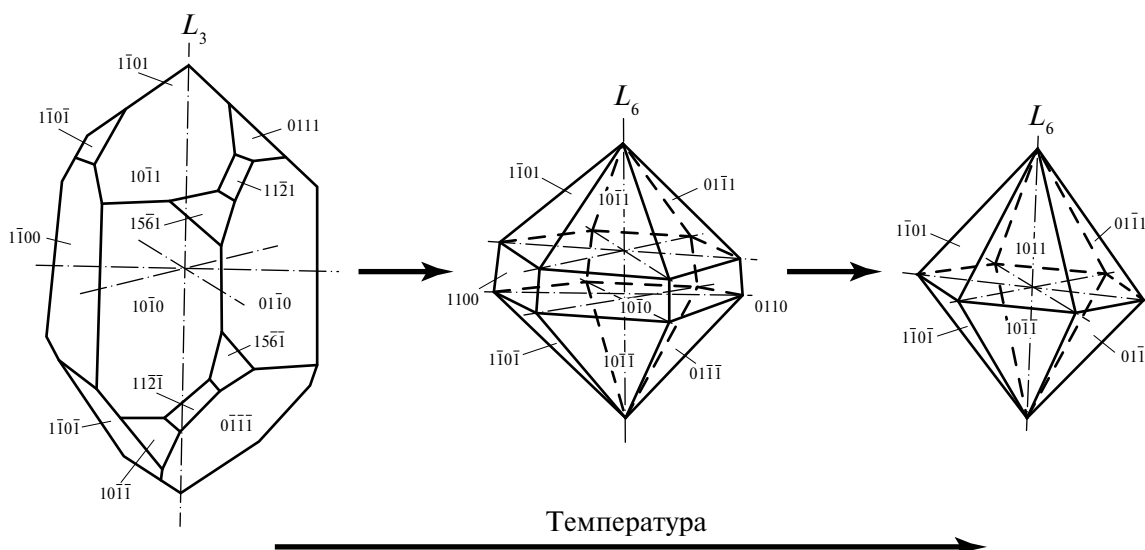


Рис. 1. Ряд преобразований кристалла β -кварца: а – полярный, призматически-ромбоэдрический, низкотемпературный; б – базисный, призматически-бипирамидальный, относительно высокотемпературный; в – базисный, конечный бипирамидальный, высокотемпературный.

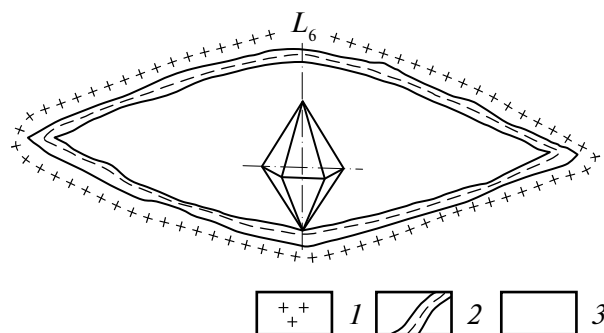


Рис. 2. Бипирамидальный кристалл β -кварца в жеоде порфировидного гранита (зарисовка): 1 – порфировидный гранит, включающий в себя жеоду; 2 – кристобалитовая подложка; 3 – кремнисто-флюидная камера в процессе роста кристалла бипирамидального β -кварца. Масштаб 1 : 1.

дополнительные $\{5161\}$, $\{1121\}$. Призматически-бипирамидальная форма (рис. 1б) относительно высокотемпературная; бипирамидальная форма (рис. 1в) высокотемпературная, это конечная форма кристалла. Бипирамидальная форма была приведена А.Н. Заварицким [9] в качестве примера фенокристалла кварца в порфировых породах. Обнаружена бипирамидальная форма β -кварца в жеоде лейкократовых порфировидных гранитов в северном обрамлении Итакинской впадины (Забайкалье) [10]. Жеода пустая, стенки выстланы кристобалитом. Бипирамидальный кристалл длиной 17 мм по вертикальной оси L_6 рос на кристобалитовой подложке (рис. 2). Нахождение кристалла в пустой жеоде свидетельствует о его росте в кремнистом водном флюиде. Однако извлечь жеоду, к сожалению, не удалось.

Преобразование призматически-бипирамидальной формы в бипирамидальную весьма любопытно. С кристаллографической точки зрения это

преобразование можно интерпретировать следующим образом. Исчезновение призматической формы структурно возможно, при этом замкнутость бипирамидального многогранника сохраняется. Такая простая призма ведет себя подобно s -грани, т.е. может сокращаться и исчезать. Таким образом, призматически-бипирамидальная форма – это промежуточное состояние базисной гранной системы. Бипирамидальный кристалл является конечной формой, характеризуется наибольшей ретикулярной плотностью, соответственно, наименьшей свободной поверхностной энергией.

Вариантность bs -гранной системы определяется функцией [6]:

$$v = \psi + 1 - \chi, \quad (2)$$

где ψ – максимальное число ретикулярных граней в кристалле, χ – число действительных ретикулярных граней в гранной системе, 1 – число внешних интенсивных параметров (температура).

При $T = \text{const}$

$$v^* = \psi - \chi. \quad (2a)$$

В функции (2) визуально не проявлено свойство полярности ретикулярных граней. Входящие в нее грани равнозначные, поэтому точечные оценки варианты дают случайные величины $\sum \sigma_i F_i$.

Далее разложим функцию (2) по группам ретикулярных граней

$$v = (\psi_b + \psi_s) + 1 - (\chi_b + \chi_s), \quad (3)$$

при условии $T = \text{const}$

$$v^* = (\psi_b + \psi_s) - (\chi_b + \chi_s), \quad (4)$$

где интенсивные параметры с индексом b относятся к базисным ретикулярным граням, с индексом s – к дополнительным.

Теперь вариантность гранной системы является функцией внутренних интенсивных параметров полярных ретикулярных граней и одного внешне-го интенсивного параметра — температуры. Этот прием служит надежным инструментом получения априорных оценок равновесия гранных систем разных кристаллов. Представление о полярности ретикулярных граней открывает новые свойства системы. Прежде всего bs -гранная система неравновесная, так как всегда $\sum \sigma_b F_b < \sum \sigma_s F_s$, поэтому может подвергаться самопроизвольному, необратимому преобразованию, т.е. является незавершенной. При росте кристалла она теряет дополнительные ретикулярные грани и преобразуется в b -гранную систему. Но b -грани, как подчеркнута выше, систематические, инвариантные ($\psi_b = \chi_b$), вариантность полярной bs -гранной системы принимает вид

$$v = \psi_s + 1 - \chi_s, \quad (5)$$

при $T = const$

$$v^* = \psi_s - \chi_s. \quad (6)$$

Функции (5) и (6) демонстрируют тот факт, что вариантность bs -гранной системы не зависит от базисных граней. Дополнительные ретикулярные грани переменные в гранной системе, базисные — индифферентные. Дополнительные ретикулярные грани характеризуются собственными значениями парциальной свободной поверхностной энергии, дающими тепловые эффекты, которые обратно пропорциональны ретикулярным плотностям. В результате последовательность сокращения и исчезновения s -граней подчиняется правилу Берто [11], согласно которому “в данной системе, где может происходить несколько химических превращений, реально происходит то превращение, которое освобождает наибольшее количество тепла”. Следовательно, дополнительные ретикулярные грани сокращаются и исчезают не все сразу, а в порядке понижения величин тепловых эффектов. Первой сокращается и исчезает ретикулярная грань (приведенная), освобождающая наибольшее количество тепла, характеризующаяся наименьшей ретикулярной плотностью, соответственно, наибольшей парциальной свободной поверхностной энергией. Затем следующая и так далее. На рис. 1а присутствуют две приведенные дополнительные грани {5161} и {1121}. Так как базисные грани инвариантные, призматически-ромбоэдрический кристалл β -кварца имеет при $T = const$ всего две степени свободы. Так как базисные ретикулярные грани инвариантные, преобразование bs -гранной системы можно идентифицировать двумя путями: сначала моновариантным, затем дивариантным. В моновариантном случае сокращается и исчезает ретикулярная грань {5161}, в дивариантном — грань {1121}.

Однако в bs -гранной системе возможно установление стационарного состояния, в котором интенсивные параметры принимают постоянные значения. Кратко обсудим этот вопрос, используя принцип возрастания энтропии в необратимом процессе [12]. Предположим, что энергия гранной системы в состояниях bs и b одинакова, что допустимо, так как это состояния в одной и той же системе. Если энтропия состояния b больше энтропии состояния bs , то состояние b (базисная гранная система) может расти в bs -полярной гранной системе самопроизвольно и необратимо. Процесс преобразования завершится полным исчезновением s -ретикулярных граней; останется инвариантная b -гранная система. Она характеризуется квазистатическим, обратимым равновесием. В стационарном bs -состоянии общее изменение энтропии гранной системы не зависит от времени [13], следовательно,

$$dS/dt = dS_e/dt + dS_i/dt = 0, \quad (7)$$

где dS_i — приращение энтропии, обусловленное ростом b -граней и сокращением s -граней, dS_e — поток энтропии, обусловленный взаимодействием bs -гранной системы с окружающей средой. Так как

$$dS_i/dt > 0, \quad (8)$$

тогда

$$dS_e/dt < 0. \quad (9)$$

Условие (9) свидетельствует о самопроизвольном потоке тепла из системы, что является критерием стационарного состояния bs -гранной системы. Можно сказать, что полярная гранная система всегда потенциально способна создавать поток тепла, она неравновесная. Напротив, базисная гранная система химически индифферентная, квазиравновесная, обратимая, является конечной формой кристалла. Кристаллографическая специфика базисного кристалла состоит в том, что его габитус при росте остается подобным себе, т.е. инвариантным. Процесс роста b -кристалла осуществляется по трансляционному/переносному механизму.

Итак, bs -гранная система неравновесная. Чем больше в ней s -ретикулярных граней, тем меньше ее энтропия, соответственно, тем выше склонность к самопроизвольному сокращению и исчезновению s -ретикулярных граней. При последовательном исчезновении последних из этих граней остается конечная квазистатическая b -гранная система, обратимая. В этом состоянии ресурс переменных дополнительных ретикулярных граней исчерпан, энтропия достигла максимума.

Базисная гранная система, или b -гранная система. Миллеровские индексы ретикулярных граней

{100} и {110} идентичны индексам элементарной ячейки. Эта форма возникает при исчезновении в полярной системе всех дополнительных ретикулярных граней. Соответственно, из соотношений (3) и (4) получаем

$$v = \psi_b + 1 - \chi_b, \quad (10)$$

при условии $T = \text{const}$

$$v^* = \psi_b - \chi_b. \quad (11)$$

Согласно функции (10) максимальное число ретикулярных граней не может превышать

$$v_{b\max} = \psi_b + 1. \quad (12)$$

Вариация температуры увеличивает на единицу степень свободы гранной системы. Возможно возникновение дополнительной ретикулярной грани, обусловленное вариацией температуры. Такую грань можно назвать термической.

Далее, учитывая инвариантность базисных ретикулярных граней ($\psi_b = \chi_b$), получаем

$$v = 1, \quad (13)$$

при $T = \text{const}$

$$v^* = 0. \quad (14)$$

Равенства (13) и (14) отражают конечные состояния кристалла. Равенство (13) идентифицирует моновариантное состояние при вариации температуры. Возникает габитус кристалла консервативной формы, изменяющийся в процессе роста по трансляционному/переносному механизму, сохраняется морфологическое подобие. Равновесие b -гранной системы инвариантное, и невозможно появление хотя бы одной дополнительной ретикулярной грани с меньшей ретикулярной плотностью; это свойство не зависит от сингонии кристалла. Равенство (14) представляет условие равновесия базисной гранной системы кристалла. Это равновесие особенное, оно абсолютно консервативное в границах стабильности кристалла. Возникновение новой грани с меньшей ретикулярной плотностью структурно невозможно. Поэтому условие (14) является показателем достижения конечного состояния гранной системы. Такой вывод из геометрических принципов кристаллографии не вытекает.

Итак, полярность ретикулярных граней является фундаментальным понятием, характеризующим вариантность и равновесие гранной системы кристалла, составляет основу теории его роста. Кристаллографический многогранник по своим свойствам перестал быть геометрическим понятием и как материальное образование характеризуется собственными свойствами, из которых на первом месте по значению стоит полярность.

В гранной системе возможны вариации соотношений площадей b - и s -граней при росте кристалла,

так как базисные и дополнительные ретикулярные грани полярные. Согласно условию (10), пока число действительных ретикулярных граней остается постоянным, вариантность гранной системы не изменяется. В этом случае базисные грани могут расти, а дополнительные сокращаться. Вариантность bs -гранной системы изменяется вследствие исчезновения s -ретикулярных граней.

Преобразование bs -гранной системы – сложный процесс, и это обусловлено полярностью ретикулярных граней. В замкнутом кристаллическом bs -многограннике s -грани ассоциируют с b -гранями по общим ребрам, но стили их развития диаметрально противоположные. Кристаллический bs -многогранник неравновесный, в котором сопряженный рост b -граней и исчезновение s -граней – процесс самопроизвольный, необратимый, сопровождается изменением соотношения сопряженных площадей b - и s -граней (F_s/F_b). Это соотношение проявляется в условиях самопроизвольно преобразующейся и неравновесной bs -гранной системы. Оно может быть определено на основе принципа Бергло – последовательного сокращения s -граней при росте кристалла, т.е. в любой момент может сокращаться лишь одна из совокупности граней. Именно та, которая характеризуется наименьшей ретикулярной плотностью, соответственно, наибольшей парциальной поверхностной свободной энергией, дающей наибольший тепловой эффект. Остальные s -грани остаются нейтральными до исчезновения активной грани. Этот процесс представлен геометрически на диаграмме [6]. Представляя функции поверхностной энергии (1) в дифференциальной форме

$$d\epsilon_i = \sigma_i dF_i,$$

получим отношение площадей b - и s -граней:

$$dF_s/dF_b = -\sigma_s/\sigma_b d\epsilon_s/d\epsilon_b, \quad (15)$$

где ϵ_s и ϵ_b – свободная поверхностная энергия дополнительных и базисных ретикулярных граней соответственно, σ_s и σ_b – парциальная свободная поверхностная энергия дополнительных и базисных ретикулярных граней соответственно. Знак “минус” в уравнении (15) обусловлен тем, что дополнительные ретикулярные грани при росте кристалла сокращаются и исчезают. Так как σ_s/σ_b для каждой s -грани – величина постоянная, приращение площадей обратно пропорциональны друг другу. Особенностью динамики bs -гранной системы является последовательное исчезновение s -граней в соответствии с правилом Бергло. Так как bs -гранная система преобразуется путем последовательного, самопроизвольного и необратимого исчезновения s -граней, площадь каждой активной s -грани прирастает с разной скоростью. В результате профиль трека роста b -гранной системы изломанный, последовательно уменьшаются углы наклона

треков. Следует подчеркнуть, что движущей силой взаимодействия полярных граней является различие значений свободной поверхностной энергии ретикулярных граней разных типов, что создает разность потенциалов, а условие Бергло определяет последовательность исчезновения s -граней.

С геометрической точки зрения любопытен вопрос изменения формы ретикулярных граней в процессе преобразования полярной гранной системы в базисную. Эта проблема в геометрической кристаллографии исследована недостаточно. Понятие полярности гранной системы позволяет рассмотреть некоторые зависимости. В bs -гранной системе b - и s -границ представляют собой сопряженные по ребрам многоугольники, вершины которых имеют различные индексы Миллера. Вершины многогранника, имеющие отличные от простой формы индексы, назовем вторичными. Количество углов в этих гранях зависит от числа s -граней, ассоциирующихся с b -гранью. При сокращении s -границ число вершин сохраняется постоянным относительно исходной гранной формы, при исчезновении изменяется в соответствии с последовательностью Бергло. В результате число углов в сопряженном базисном многоугольнике уменьшается за счет исчезновения идентичных s -граней. Уменьшение числа углов распространяется на оба типа граней и происходит каждый раз при последовательном исчезновении s -границ. Процесс продолжается до полного исчезновения вторичных углов базисного многоугольника, который превращается в грань элементарной ячейки. Самопроизвольное и необратимое структурное преобразование bs -многогранника в b -гранную систему завершено, образован консервативный габитус. Однако квазистатический рост обратимый, может продолжаться по трансляционному/переносному механизму, но консервативная форма остается инвариантной.

БАЗИСНЫЙ ГАБИТУС – КОНЕЧНАЯ ФОРМА ЛЮБОГО КРИСТАЛЛА

Базисная гранная система специфическая. Она возникает при исчезновении всех дополнительных граней (рис. 1). Процесс исчезновения самопроизвольный и необратимый. Образуется замкнутый базисный кристаллический многогранник с собственным набором ретикулярных граней с наибольшими ретикулярными плотностями, соответственно, с наименьшими значениями парциальной свободной энергии. В базисной гранной системе невозможно образование ретикулярной грани с меньшей ретикулярной плотностью, соответственно, с большей парциальной свободной поверхностной энергией. Из возможного многообразия в bs -гранной системе базисный многогранник имеет наименьшее число ретикулярных граней, которое может изменяться в зависимости от категории сингонии от единицы до трех. Базисная гранная

система инвариантна, является конечной формой кристалла. Любой bs -кристалл, самопроизвольно и необратимо преобразовавшись в b -кристалл, принимает инвариантный габитус. Особенность конечной формы кристалла состоит в том, что он индифферентен при вариациях интенсивных параметров в границах его стабильности. Такое состояние можно назвать по аналогии с фазовой системой квазистатическим, а равновесие – квазистатическим равновесием [14]. Кристаллы конечной формы растут медленно. Те, что характеризуются большой кристаллизационной силой, образуются на ранних стадиях кристаллизации магматического расплава. В петрографии они именуются акцессорными [9] и, как правило, имеют относительно более совершенную форму.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В геометрической кристаллографии господствует представление о ретикулярных гранях как однородных совокупностях кристалла. Оно лежит в основе условия равновесия Гиббса. В последнее время появились очевидные свидетельства ошибочности функции Гиббса, и нахождение термодинамического состояния кристалла стало актуальным. Совокупность ретикулярных граней кристалла названа гранной системой, являющейся аналогом фазовой системы, а ретикулярные грани – аналогами фаз. Вместо представления об однородности ретикулярных граней введено понятие об их полярности в кристалле. Возник новый метод анализа вариантности и равновесия кристалла – метод полярности. Его основу составляют типы ретикулярных граней (базисных и дополнительных) и образуемые ими полярная и базисная гранные системы. Приведены подробные характеристики этих термодинамических элементов. Базисные грани образуют собственную гранную систему. Они систематические, могут лишь расти или находиться в состоянии покоя. Дополнительные ретикулярные грани не образуют собственной системы, ассоциируют с базисными гранями и при росте кристалла самопроизвольно и необратимо сокращаются и исчезают, т.е. являются переменными гранной системы. Подчеркнуто, что сокращение и исчезновение s -граней осуществляется в последовательности, определяемой принципом Бергло. Проведен анализ вариантности полярной и базисной гранных систем, установлены критерии равновесия. Впервые установлено, что полярная гранная система неравновесная, преобразуется путем сокращения и исчезновения s -граней при росте кристалла, превращаясь самопроизвольно и необратимо в базисную гранную систему. Приведен пример преобразования bs -гранной формы β -кварца в базисную систему. Полярная гранная система может находиться в стационарном состоянии и быть охарактеризована энтропией. Базисная гранная система

инвариантна, систематическая, составляет основу системы, с которой ассоциируют дополнительные переменные варианты ретикулярные грани. Базисная гранная система является конечной формой кристалла, устойчива в границах его стабильности. В ней невозможно возникновение хотя бы одной грани с меньшей ретикулярной плотностью, соответственно, с большей (относительно базисных граней) парциальной свободной поверхностной энергией. Габитус базисного кристалла инвариантен, может изменяться в процессе роста по трансляционному/переносному механизму. Открытие полярности ретикулярных граней изменило метод исследования и оценки равновесия кристалла. Кристалл перестал олицетворять собой однородную геометрическую форму. Теперь совокупность его ретикулярных граней полярная, представляет реальную специфическую термодинамическую систему.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Браве О. Избранные научные труды. Л.: Наука, 1974. 420 с.
2. Гаюи Р.Ж. Структура кристаллов. М.: Изд-во АН СССР. 1962, 176 с.
3. Гиббс Дж. В. Термодинамика и статистическая механика. М.: Наука, 1982. 584 с.
4. Мильбурн Г. Рентгеновская кристаллография. М.: Мир, 1975. 256 с.
5. Адмакин Л.А., Трубочёв А.И. // Кулагинские чтения: техника и технология процессов. Матер. XXI Междунар. науч.-практ. конф. Чита: ЗабГУ, 2021. С. 87.
6. Адмакин Л.А., Адмакин А.Л. // Кристаллография. 2023. Т. 68. № 2. С. 323.
<https://doi.org/10.31857/S0023476123020029>
7. Шефталъ Н.Н. // Процессы реального кристаллообразования / Ред. Белов Н.В. М.: Наука, 1977. С. 36.
8. Винчелл А.Н., Винчелл Г. Оптическая минералогия. М.: ИЛ, 1953. 561 с.
9. Заварицкий А.Н. Изверженные горные породы. М.: Изд-во АН СССР, 1956. 480 с.
10. Адмакин Л.А. // Докл. АН СССР. 1972. Т. 222. № 4. С. 82.
11. Шамбадаль П. // Развитие и приложения понятия энтропии. М.: Наука, 1967. С. 137.
12. Эткинс П. Порядок и беспорядок в природе. М.: Мир, 1987. 224 с.
13. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. М.: ИЛ, 1960. 128 с.
14. Леонтович М.А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. М.: Наука, 1983. 416 с.

POLARITY OF RETICULAR FACES AND THE THERMODYNAMIC STATE OF THE FACE SYSTEM OF A CRYSTAL

© 2024 L. A. Admakin*, A. L. Admakin

ООО International Association of Postgraduate Education (МАРО), St. Petersburg, Russia

*e-mail: admakin.leonid@yandex.ru

Abstract. A new concept is introduced into crystallography – the polarity of the reticular faces of a crystal. Reticular faces are divided into basic and additional. The basal faces, systematic in a facet system, only increase as the crystal grows. The shape of the crystal is invariant, stable within the limits of its stability and does not affect the state of its equilibrium. Additional faces, on the contrary, shrink and disappear, and therefore are variable extensive parameters of the facet system. They do not form their own system and associate with the basic ones, determining the variation of the facet system. The polar system is nonequilibrium, spontaneously and irreversibly transforms into the final basic facet system and is in quasi-static equilibrium. The habit of a basic crystal of an invariant shape changes during its growth according to the mechanism of translational symmetry.