MINERALOGIA POLONICA
Vol. 16, No 1—1985

*Hubert SYLWESTRZAK*

# MINERALOGIA A NOWOCZESNA KRYSTALOGRAFIA

## RECENZJA I DYSKUSJA

Punktem wyjścia dla rozważań autora nad stosunkiem mineralogii do krystalografii jest kilka prac wydanych jako „Mała monografia" w serii „Wykłady z krystalografii współczesnej" przez Wydawnictwa Politechniki Warszawskiej. Seria ta obejmuje następujące prace:

Zygmunt Trzaska Durski — „Symetria w krystalografii", str. 165, 1983.
Janusz Leciejewicz — „Wstęp do dyfraktomerii neutronów", str. 118, 1979.
Zygmunt Trzaska Durski — „Sieć odwrotna i interpretacja retigramów", str. 134, 1980.
Janusz Leciejewicz — „Zarys neutronografii kryształów", str. 111, 1980.
Stanisław Szarras — „Budowa i badanie kryształu rzeczywistego", str. 104, 1980.

W dyskusji uwzględniono także:

A. S. Sonin — „O krystalografii". Biblioteka Problemów t. 276. PWN 1982.
Tadeusz Penkala — „Zarys krystalografii", wyd. 3. PWN 1983.
Zofia Skrzat — „Elementy krystalografii", wyd. 3, UMK Toruń 1980.

Krystalografia jest nauką, której przedmiot i metoda są ściśle określone. Przedmiotem badań są kryształy, metodą jest badanie symetrii przejawiającej się w zewnętrznej postaci, wewnętrznej budowie i w rozkładzie cech fizycznych. Obecnie uważa się, że krystalografia jest nauką, której zakres pokrywa się częściowo z trzema naukami podstawowymi: matematyką, fizyką i chemią. Zdaniem A. S. Sonina krystalografia matematyczna (wywodząca się z geometrycznej) łączy się w matematyce z teorią grup i algebrą tensorową. Krystalografia fizyczna wiąże się z fizyką ciała stałego, a krystalografia chemiczna odpowiednio z chemią ciała stałego.

Taki jest punkt widzenia współczesnych krystalografów. Mineralog jednak nie zapomina, że krystalografia wyrosła z mineralogii i wzajemny związek tych nauk był w początkowym okresie tak silny, że były one ze sobą wręcz utożsamiane. U podwalin krystalografii legło prawo stałości kątów sformułowane przez Steno w 1669 r., a potwierdzone w sto lat później na podstawie wielkiej ilości pomiarów przez Romé de l'Isle, który pierwszy użył terminu „krystalografia" w tytule swej książki "Les essais de cristallographie ou déscription des figures geometriques" (1772). Obserwacje łupliwości kryształów kalcytu nasunęły Haüy myśl, że podlegająca ścisłym regułom zewnętrzna postać kryształu jest odbiciem jego uporządkowanej struktury wewnętrznej. Prawo wymiernych wskaźników było możliwe do objaśnienia tylko przy

założeniu istnienia sieci przestrzennej. Hipoteza ta, na której udowodnienie przyszło czekać przez przeszło 130 lat, aż do doświadczenia Laue-Friedricha-Knippinga w 1912 r., okazała się bardzo płodna. W oparciu o nią udowodniono istnienie 32 klas symetrii i 230 grup przestrzennych. Przez cały ten czas podstawowymi obiektami badań były naturalne kryształy minerałów, zaś teorie krystalograficzne były wykorzystywane przede wszystkim do identyfikacji minerałów. W okresie tym wielu badaczy zajmujących się badaniem minerałów i ich zespołów prowadziło jednocześnie prace teoretyczne z zakresu krystalografii geometrycznej. Tylko spośród badaczy pracujących ówcześnie na terenach Dolnego Śląska można tutaj wymienić takie nazwiska, jak Websky, Liebish i Lasaulx.

Równocześnie jednak zaczął się wyodrębniać w badaniach krystalograficznych nowy nurt. Obserwacje Mitscherlicha stały się dla Pasteura punktem wyjścia do badań nad symetrią cząsteczki i nad wpływem tej symetrii na własności optyczne kryształu. Nieco później bracia Curie w pracach nad piezoelektrycznością (i znaną już przed nimi piroelektrycznością) wykazali, że badanie symetrii łączy ze sobą krystalografię i fizykę. Podobne związki tych nauk wykazał w odniesieniu do sprężystych własności kryształów Neumann, zaś matematyczne uogólnienie fizyki kryształów przedstawił Voigt w 1910 r. (a więc jeszcze przed udowodnieniem sieciowej budowy kryształów).

Obecny stosunek krystalografii do mineralogii można określić jako zerwanie w młodszym pokoleniu więzów pokrewieństwa. Krystalografia, jaką uprawiają mineralodzy, a raczej jaką wykorzystują do opisu badanych obiektów — minerałów, to krystalografia, którą można określić jako klasyczna. Równolegle z nią istnieje jednak i rozwija się w dalszym ciągu inna, nowoczesna krystalografia.

I piszący tę recenzję powinien w zasadzie w tym miejscu ją zakończyć przyznając się do swojej niewiedzy, a raczej do niemożności zrozumienia krystalografii nowoczesnej. Rzecz w tym, że recenzent niemożność tę uważa za typową dla obecnego pokolenia pracowników naukowych o wykształceniu mineralogiczno-petrograficznym.

Punktem wyjścia do dalszych rozważań jest porównanie z jednej strony podręczników krystalografii w ujęciu klasycznym, tradycyjnym, z drugiej zaś opracowań z zakresu krystalografii nowoczesnej.

Pierwszy z tych kierunków reprezentuje podręcznik T. Penkali oraz skrypt Z. Skrzat. Kierunek drugi reprezentuje monografia Z. Trzaski Durskiego (oraz inne monografie z wymienionej serii), a także książka A. S. Sonina.

Obszerna książka T. Penkali oprócz trzech wydań w kraju została również wydana w Związku Radzieckim. Książka jest podzielona na 7 rozdziałów: wprowadzenie, krystalografia geometryczna (40% objętości książki), struktura kryształów, analiza rentgenostrukturalna, krystalochemia, krystalografia fizyczna (20% objętości) oraz kryształy w nauce i technice. Symetrię postaci kryształów określa obecność elementów symetrii, takich jak środek symetrii, płaszczyzny symetrii, osie symetrii zwykłe i inwersyjne. Symetrię sieci przestrzennej określają dodatkowo płaszczyzny poślizgu i osie śrubowe. Działanie elementów symetrii i ogólniej wszystkie zagadnienia są przedstawiane w ten sposób, że student, który opanował trygonometrię w zakresie szkoły średniej, a wyobraźnię przestrzenną rozwinął na wykładach geometrii wykreślnej może bez trudności zrozumieć cały materiał. Podobny sposób wykładu przedstawia znacznie skromniejszy objętościowo skrypt Z. Skrzat.

Inny natomiast sposób wykładu zastosowano w monografii Z. Trzaski Durskiego „Symetria w krystalografii". Jak wynika ze wstępu, monografia ta jest przeznaczona głównie dla studentów Wydziału Chemicznego PW, specjalizujących się w technologii ciała stałego. Ma ona stanowić podstawową pomoc dydaktyczną do przedmiotu „struktura ciała stałego". Autor we wstępie wyraża nadzieję, że monografia „pomoże studentom w zgłębianiu tajników symetrii wewnętrznej i zewnętrznej budowy kryształów oraz w zrozumieniu uniwersalnego znaczenia symetrii nie tylko w krystalografii, ale także w całej fizyce ciała stałego". Autor podkreśla także, że monografia jest przewodnikiem po nowych, tzw. uogólnionych teoriach symetrii, które powstały w ostatnich 30 latach, a w języku polskim nie były dotąd prezentowane. Zdaniem Autora z monografii będą mogli korzystać także inni studenci mający w programie studiów krystalografię, mineralogię i fizykę ciała stałego.



Monografia dzieli się na dwie części. Pierwsza z nich omawia klasyczną teorię symetrii kryształów. Wśród makroskopowych elementów symetrii wyróżniono tutaj także przemienne osie symetrii. Zasadniczą różnicę w stosunku do tradycyjnego przedstawiania klasycznej teorii stanowi to, że przekształcenia symetryczne (działanie elementów symetrii) sprowadzono do mnożenia macierzy tych przekształceń. Omówiono także pojęcie grup granicznych (grup Curie) — punktowych grup symetrii, w których występują osie symetrii o krotności nieskończonej. Znaczenie tych grup polega na tym, że są one pomocne w opisaniu fizycznych własności kryształów.

Druga część monografii omawia uogólnione teorie symetrii powstałe na gruncie klasycznej teorii symetrii. Okazało się bowiem, że klasyczna teoria symetrii nie dawała wystarczająco dokładnego opisu niektórych wielościanów krystalograficznych (zrostów kryształów, kryształów szkieletowych) oraz niektórych rodzajów struktur kryształów, takich jak struktury kryształów magnetycznych. Badania ostatnich lat wykazały także, że w krystalografii wirusów obserwuje się niezgodność z klasyczną teorią, występują bowiem także osie 5- i 7-krotne. Stwierdzono także cząsteczki wirusów o symetrii ikosaedru — dwudziestościanu regularnego, który, mimo że należy do brył platońskich, nie posiada symetrii krystalograficznej. W monografii omówiono, jak wynika ze wstępu do jej drugiej części, tylko te uogólnione teorie, które można przedstawić za pomocą operacji geometrycznych. Są to symetria pozorna, harmonia (pojęcie to wprowadził C. M. Viola już w 1904 r.) i homologia, z których każdy posiada elementy symetrii analogiczne do klasycznych elementów symetrii (środek, płaszczyzny, osie). Budowę organizmów żywych opisuje symetria krzywoliniowa z właściwymi sobie elementami symetrii.

Dosyć szeroko omówiono wprowadzoną przez A. W. Szubnikowa teorię symetrii podobieństwa z elementami takimi, jak translacja podobieństwa (operacja K), płaszczyzna podobieństwa i poślizgowa płaszczyzna podobieństwa (operacja M), spiralny ruch wokół osi podobieństwa (operacja L) oraz ruch po rozszerzającej się od szczególnego punktu linii śrubowej (operacja N). Symetria podobieństwa pozwala na przykład opisywać w uproszczony sposób kryształy śniegu.

Sformułowana również przez Szubnikowa teoria antysymetrii odnosi się do układów przedmiotów i ich przeciwieństw (negatyw i pozytyw fotografii, postacie wzrostu i rozpuszczania kryształów itd.). Elementami antysymetrii są: antytożsamość, środek antysymetrii, osie antysymetrii, płaszczyzny antysymetrii, osie antytranslacji, śrubowe osie antysymetrii i antysymetryczne płaszczyzny poślizgu. Przekształcenie antysymetryczne działa zawsze w połączeniu ze zwykłymi elementami symetrii. Klasyczne elementy symetrii są więc szczególnym przypadkiem elementów antysymetrii. Omówiono antysymetrię figur skończonych, grup granicznych i figur nieskończonych (antysymetryczne czarno-białe sieci Bravais'go).

Szczególnym przypadkiem antysymetrii jest zdefiniowana przez N. W. Biełowa symetria wielobarwna (symetria mozaik) zawierająca p-barwne n-krotne osie symetrii.

Podano dla przykładu, że przy zastosowaniu pojęć antysymetrii można opisywać

struktury kryształów magnetycznych, w których rolę barwy białej i czarnej odgrywają kierunki spinów. Pojęcia antysymetrii pozwalają także wyjaśnić strukturę takich minerałów i związków chemicznych, jak ZnS, $CdCl_2$, $CaF_2$ i innych. Również i przekształcenia antysymetryczne przedstawiono w postaci macierzy przekształceń.

W popularnonaukowej książce Sonina „O krystalografii" (jej dosłowny tytuł według oryginału powinien brzmieć „Rozmowy o krystalofizyce") motto jednego z rozdziałów stanowi wypowiedź Voigta „By dojść do ziemi obiecanej — krystalografii fizycznej, należy najpierw przebyć pustynię krystalografii geometrycznej". Przykład tej, w zamyśle autora popularnej książki utwierdza mineraloga o tradycyjnym wykształceniu, że do „ziemi obiecanej" nigdy nie dojdzie. Zrozumienie książki wymaga znajomości rachunku tensorowego. Badanie symetrii zjawisk fizycznych zastąpiono tutaj badaniem symetrii opisujących te zjawiska tensorów (recenzent przyjmuje to oczywiście na wiarę). Lektura książki, a z konieczności tych jej partii, które bez znajomości rachunku tensorowego można zrozumieć, nasuwa wniosek, że dla zrozumienia współczesnej krystalografii potrzebny jest aparat matematyczny, jakim nie dysponuje dotychczasowy absolwent kierunku mineralogiczno-petrograficznego.

A może w mineralogii taka nowoczesna krystalografia nie jest mimo wszystko potrzebna? Może do charakterystyki minerałów w zupełności wystarczają kategorie krystalografii klasycznej i tradycyjny sposób jej wykładu? Trzeba bowiem zauważyć, że na takim tradycyjnym ujęciu nadal poprzestają powszechnie uznane podręczniki mineralogii. Za przykład może tu posłużyć ostatnie, 16 wydanie „Klockmanns Lehrbuch der Mineralogie" (Ferdinand Enke Verlag Stuttgart 1978).

Z drugiej strony jednak wiadomo, że już obecnie wielu absolwentów mineralogii znajduje pracę w dziedzinach odległych od klasycznej „mineralogii geologicznej", a związanych raczej z zastosowaniem kryształów. Już obecnie wykorzystanie kryształów stało się powszechne w optyce, elektronice i metalurgii. Należy tu wymienić wytwarzanie i wykorzystanie ferrytów, ferroelektryków, półprzewodników, piezoelektryków, piroelektryków, kryształów do techniki laserowej, optyki podczerwonej i nadfioletowej, sztucznych kamieni, wiskersów itd...

Z podanych w recenzowanej monografii przykładów wynika, że niektóre cechy tak pospolitych minerałów, jak sfaleryt czy magnetyt, dają się wyjaśnić tylko w kategoriach nowej krystalografii. Ta nowa krystalografia jest zaś nie do pomyślenia bez dysponowania odpowiednim aparatem pojęciowym z zakresu matematyki. Czy współczesny mineralog (zwłaszcza ten, który dopiero ukończy studia) może sobie pozwolić, na to, że opisu pewnych cech i zjawisk nie potrafi zrozumieć?