

# CRISTALOGRAFIE:

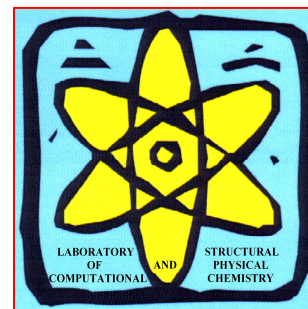
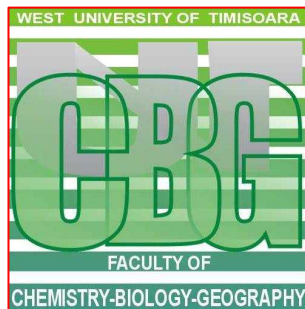
## C7: PROIECȚIA STEREOGRAFICĂ

### Conf. Dr. Mihai V. PUTZ

Chemistry Department, West University of Timisoara,  
Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;  
E-mails: [mvputz@cbg.uvt.ro](mailto:mvputz@cbg.uvt.ro) or [mv\\_putz@yahoo.com](mailto:mv_putz@yahoo.com) ;  
Web: <http://mvputz.iqstorm.ro>

Member of American Chemical Society  
Member of European Society of Mathematical Chemistry

Editor in-Chief of *Int. J. Chem. Model.* (at NOVA Publishers)  
Editor in-Chief of *Int. J. Environ. Sci.* (at SERIALS Publishers)  
Guest Editor & Editor of *Int. J. Mol. Sci.* (at MDPI Organization)



## Proiecția Stereografică. Harta Wulff

reprezentarea planelor și a direcțiilor; o alegere imediat convenabilă o reprezintă normalele la plane ca „reprezentante” ale planelor respective.

Apoi, trebuie ales un sistem uniform de reprezentare al diferitelor habitusuri cristaline indiferent de forma și dimensiunea acestora.

În acest scop, alegerea ideală este reprezentarea sferică; cristalul, cu toate direcțiile și planurile de analizat va fi poziționat în centrul sferei, cu o rază unică pentru toate cristalele din toate sistemele cristaline.

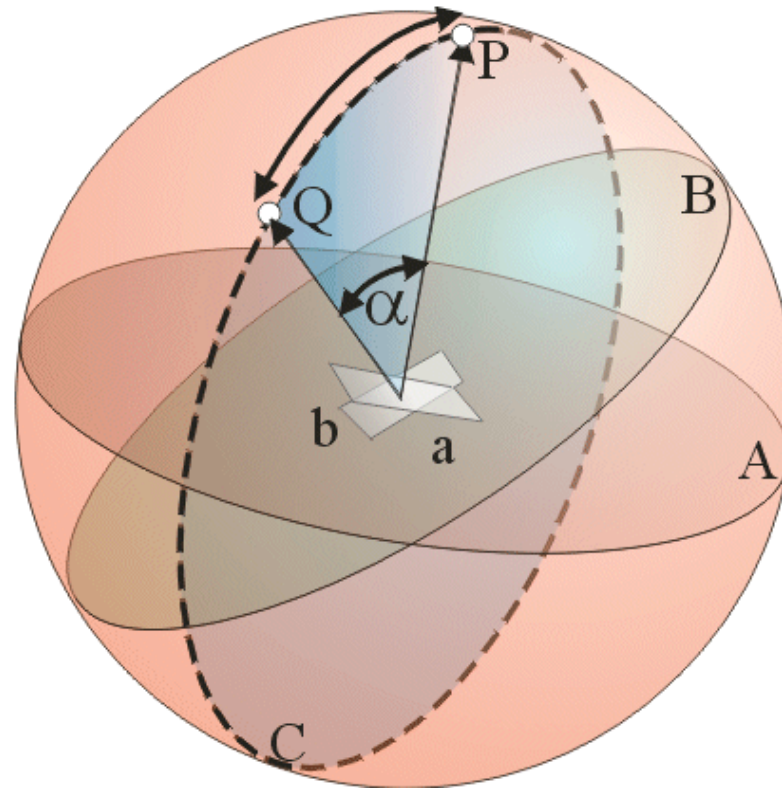
Această sferă se va numi *sferă de referință* sau *sferă de proiecție*. În raport cu aceasta, planele și direcțiile cristaline se vor reprezenta pe suprafața sferei.

Astfel, reprezentarea planelor se poate face în două moduri:

**i)** se consideră normala la planul respectiv ca trecând prin centrul sferei și se prelungește până când interesează sfera într-un punct numit *pol*;

**ii)** se extinde planul (sau planul paralel cu planul în cauză) prin centrul sferei până când interesează suprafața sferei după așa numitul *cerc mare*, pentru care normală, trecând prin centrul sferei, va regăsi polul planului, precum în **i**).

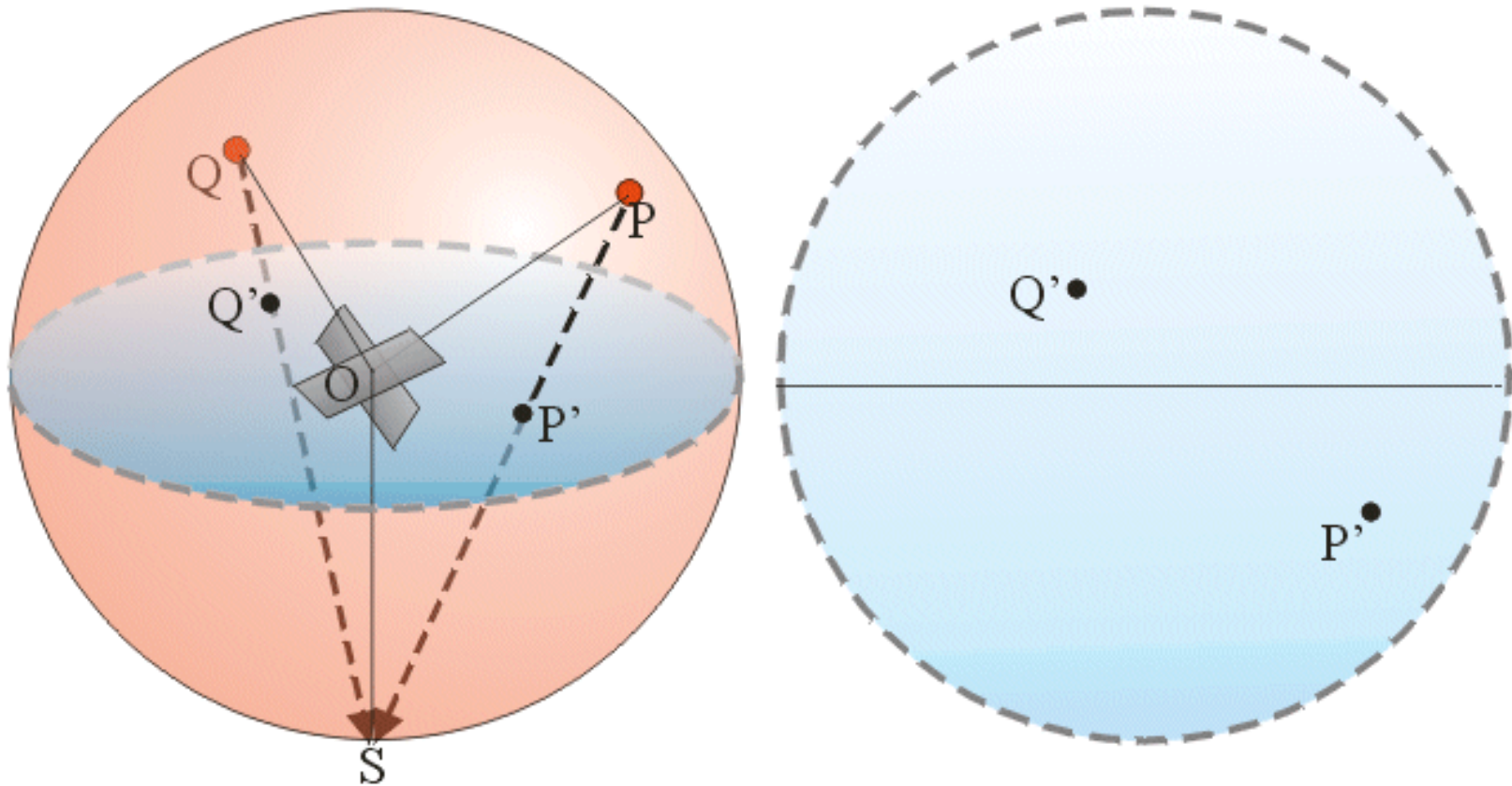
## Ilustrarea proiecției sferice



Unirea pe suprafața sferei a polilor P și Q se poate înscrie chiar pe un cerc mare al sferei, putându-se "citi" direct unghiul dintre aceștia (același cu cel dintre planele asociate) în condițiile în care suprafața sferei a fost calibrată.

În continuare, precum geografil transpun în plan coordonatele sferice, este deosebit de utilă reducerea proiecției sferice la una bi-dimensională, sau, mai simplu: ”pe o suprafață de hârtie”.

*Ilustrarea proiecției stereografice*

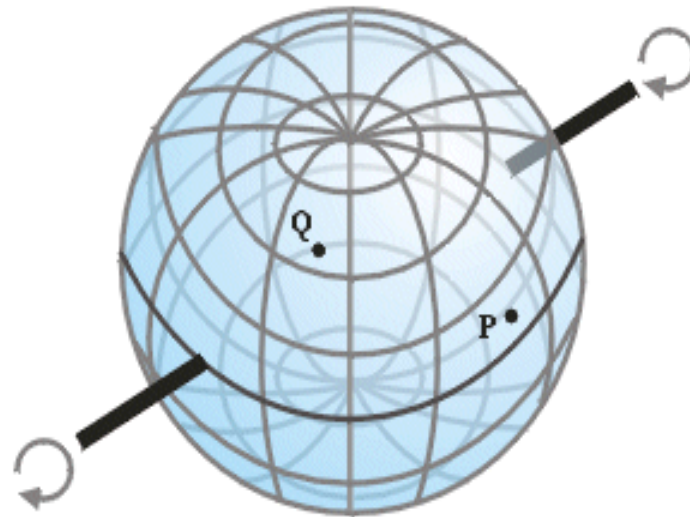




Se remarcă cum, în proiecția stereografică unghiurile dintre polii cristalografici de pe sferă se pastrează, însă distanțele dintre ei se modifică (acest lucru fiind cu atât mai evident cu cât se poate imagina planul de proiecție glisând perpendicular pe direcția axei Nord-Sud).

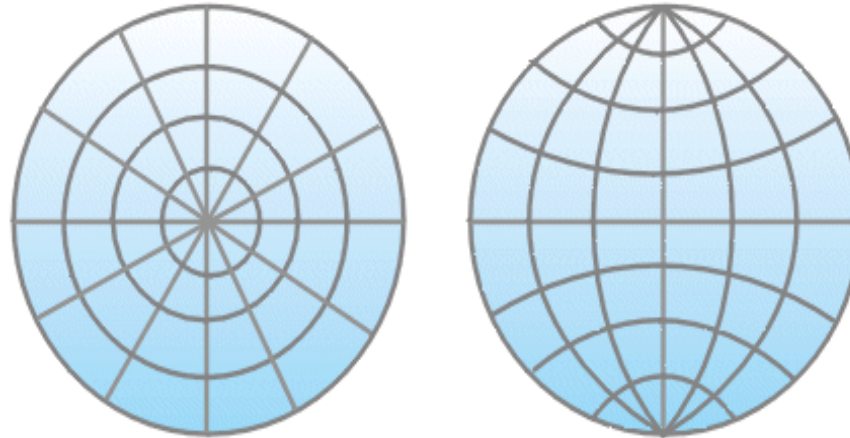
Intersecția planului ecuatorial (pe care se face proiecția stereografică) cu suprafața sferei generează cercul mare al sferei denumit *cerc de bază* sau *cerc primitiv*. Această denumire vine și din faptul că proiecția stereografică a punctelor de pe ecuatorul sferei rezultă în ele însele. În plus, polul Nord (în cazul proiecției stereografice a emisferei nordice) are proiecția sfereografică în centrul cercului primitiv.

*Gridul sferic și operația de aliniere a polilor*



Fiind fixat gridul sferic, mai departe, trebuie considerată proiecția sa plană, pentru a putea fi folosită în conjuncție cu proiecția stereografică, prin intermediul polilor lor.

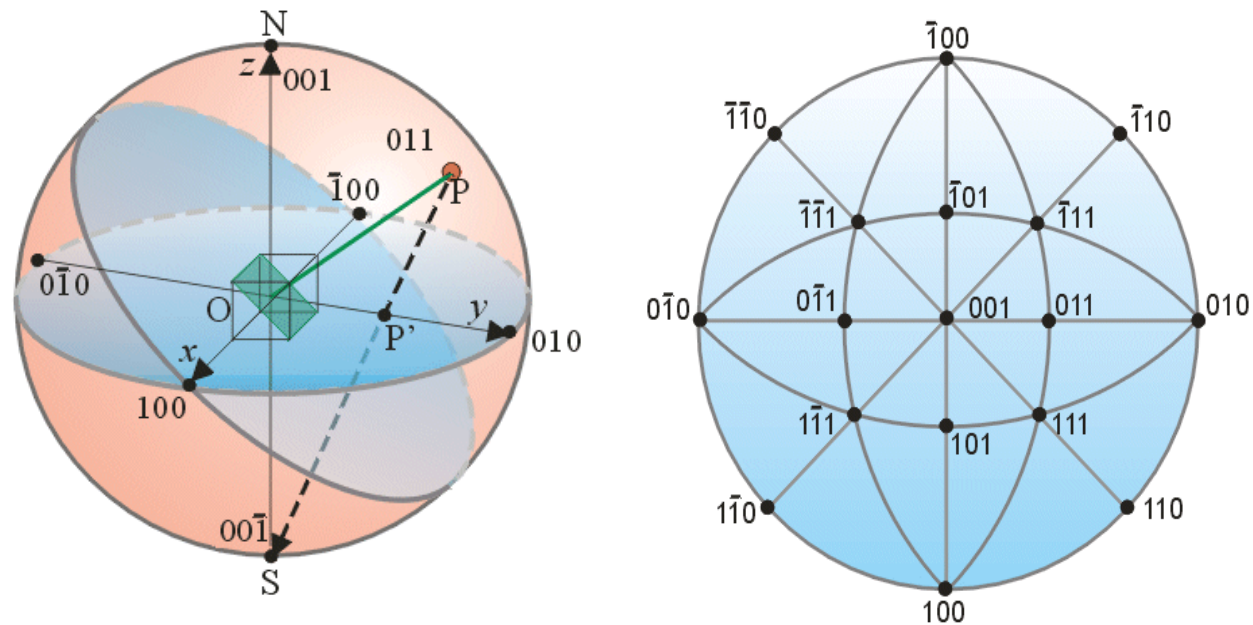
*Proiecția concentrică a gridul sferic și harta Wulff*



În harta Wulff liniile de latitudine sunt arce orizontale, în timp ce liniile longitudinale sunt arce verticale unind polii Nord și Sud. Conjuncția deplină a proiecției stereografice cu harta Wulff se face considerându-se cercul (Wulff) de aceeași rază cu sfera de proiecție din proiecția stereografică.

De obicei, harta Wulff se calibrează în intervale unghiulare de câte  $2^\circ$  sau  $5^\circ$ . În final, prin numărarea liniilor de latitudine dintre polii aliniați pe același arc longitudinal se măsoară unghiul dintre aceștia.

*Proiecția standard al unui cristal cubic: detaliu pentru proiecția planului 001 (în stânga) și a altor plane și direcții (în dreapta)*



De amintit este faptul că doar pentru sistemul cubic direcțiile  $[hkl]$  sunt perpendiculare pe planele  $(hkl)$ , astfel încât se pot omite parantezele drepte sau rotunde din proiecțiile efectuate.

Majoritatea cristalelor se caracterizează prin apariția de grupe sau serii de muchii paralele, fiecare astfel de grupă având o orientare cristalografică proprie. Totalitatea fețelor unei forme poliedrice care se intersectează după muchii paralele și cu o direcție comună alcătuiesc o *zonă*.

Legătura dintre plane și direcții în cristale rezidă în faptul că intersecția a două plane se face după o linie ce, aparținând ambelor plane, se va numi *axa de zonă*, a zonei în care planele respective se întretaie (coexistând).

Proiecția standard indică, într-o manieră clară, orientarea tuturor planelor importante din cristal și ține cont de câteva reguli de bază, precum urmează.

**i)** Normalele la planele ce aparțin aceleiași zone sunt coplanare și la unghi drept cu axa de zonă.

**ii)** Toți polii planelor din aceeași zonă se găsesc pe arcul (proiecția sau urma) aceluiași cerc mare, al cărui pol este chiar proiecția direcției axei de zonă.

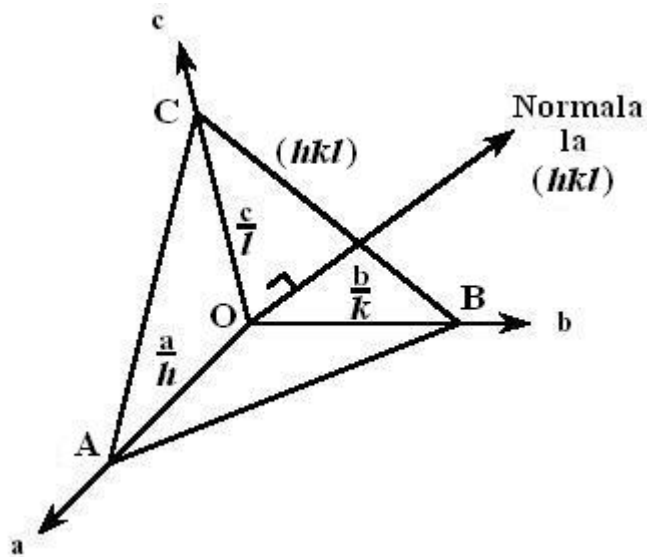
**iii)** Indicii planelor unei zone sunt corelați cu indicii axei zonei respective, prin legea Weiss a zonelor

În termenii indicilor planelor și direcțiilor, condiția ca planul ( $hkl$ ) să fie paralel cu direcția (axa de zonă)  $[uvw]$  se traduce analitic prin ecuația:

$$hu + kv + lw = 0$$



## Construcție pentru demonstrarea legii Weiss a zonelor de fețe



Astfel, pentru ca un vector să fie în (sau paralel cu) planul format de vectorii (aici) de bază  $\mathbf{AB}$  (cu sensul de la A la B) și  $\mathbf{AC}$  (cu sensul de la A la C) este suficient ca vectorul în cauză să fie scris ca o combinație lineară de tipul:

$$\mathbf{r}' = \lambda \mathbf{AB} + \mu \mathbf{AC}, \text{ cu } \lambda \text{ și } \mu \text{ potrivit aleși.}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{AB} &= \mathbf{b}/k - \mathbf{a}/h, \\ \mathbf{AC} &= \mathbf{c}/l - \mathbf{a}/h. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \lambda(\mathbf{b}/k - \mathbf{a}/h) + \mu(\mathbf{c}/l - \mathbf{a}/h) \\ &= -(\lambda + \mu)\mathbf{a}/h + \lambda \mathbf{b}/k + \mu \mathbf{c}/l. \end{aligned}$$

Dacă se identifică acum vectorul  $\mathbf{r}'$  cu vectorul direcției  $[uvw]$

$$\mathbf{r}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

$$\begin{aligned} u &= -(\lambda + \mu)/h, \\ v &= \lambda/k, \\ w &= \mu/l. \end{aligned}$$

$$hu + kv + lw = 0$$

iv) Între indicii planelor aparținând aceleiași zone există relații lineare

a) Dacă se știu două plane de zonă, de exemplu  $(h_1k_1l_1)$  și  $(h_2k_2l_2)$ , atunci, direcția axei lor de zonă  $[uvw]$  poate fi determinată folosindu-se produsul vectorial formal:

$$(h_1k_1l_1) \times (h_2k_2l_2) = \begin{vmatrix} u & v & w \\ h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{vmatrix} \quad \begin{aligned} u &= k_1l_2 - k_2l_1 \\ v &= l_1h_2 - l_2h_1 \\ w &= h_1k_2 - h_2k_1 \end{aligned} \quad \mathbf{r}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

b) Invers, se va spune că planul  $(hkl)$  aparține la două zone, cu axele de zonă  $[u_1v_1w_1]$  și  $[u_2v_2w_2]$ , dacă sunt satisfăcute relațiile

$$[u_1v_1w_1] \times [u_2v_2w_2] = \begin{vmatrix} h & k & l \\ u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \end{vmatrix} \quad \begin{aligned} h &= v_1w_2 - v_2w_1 \\ k &= u_2w_1 - u_1w_2 \\ l &= u_1v_2 - u_2v_1 \end{aligned}$$

c) Condiția ca trei fețe, cu indicii Miller  $(h_1k_1l_1)$ ,  $(h_2k_2l_2)$  și  $(h_3k_3l_3)$ , să facă parte din aceeași zonă este ca determinantul indicilor să fie nul :

$$\begin{vmatrix} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \\ h_3 & k_3 & l_3 \end{vmatrix} = 0 \quad \begin{aligned} h_2 &= h_1 + h_3, & h_2 &= mh_1 \pm nh_3, \\ k_2 &= k_1 + k_3, & k_2 &= mk_1 \pm nk_3, \\ l_2 &= l_1 + l_3. & l_2 &= ml_1 \pm nl_3, \end{aligned} \quad \text{cu } m \text{ și } n \text{ numere întregi.}$$

v) Indicii direcțiilor se prezintă întotdeauna în cel mai mic raport  $h:k:l$  de numere întregi.

vi) Locațiile indicilor proiecției stereografice trebuie să respecte simetria axelor perpendiculare pe planele ce au fost proiectate: a se urmări, de exemplu, cum simetria proiecției 001 este de ordinul 4, iar cum proiecția 011 prezintă o simetrie de ordinul 2 la rotație în raport cu centrul hărții Wulff.

Ultima idee este esențială: scopul introducerii proiecției sferice și a celei stereografice rezidă în aceea de a sistematiza într-o reprezentare plană relațiile de simetrie tri-dimensionale existente între planele (asociate fețelor) și direcțiile importante dintr-un cristal.