

разработки и воплощения музейных экспозиций^I, являющихся, по существу, открытой научной книгой для посетителей Музея. Реализация же выставок должна рассматриваться как внедрение достижений науки в широкие круги специалистов и массы трудящихся.

УДК 549.091

В.О.Поляков

СОЗДАНИЕ БАНКА СОГЛАСОВАННЫХ ДАННЫХ
ПО МИНЕРАЛАМ И ИЗОМОРФНЫМ СЕРИЯМ
НА ОСНОВЕ ИЗУЧЕНИЯ КОЛЛЕКЦИЙ МИНЕРАЛОГИЧЕСКИХ МУЗЕЕВ

Развитие электронно-вычислительной техники в последние годы сделало принципиально возможной реализацию идеи создания всеобщего банка минералогических данных. Информация о всех минералах, введенная в ЭВМ, может служить базой для различных информационных и информационно-диагностических систем. Работы в этом направлении ведутся во многих научных учреждениях СССР. В большинстве случаев это сбор, систематизация литературных данных и подготовка их для введения в ЭВМ. Между тем подобные банки данных в сокращенном варианте уже реализованы без использования ЭВМ. К такому относятся, например, рентгеновская картотека ASTM, созданная в США, или справочник "Минералы", издаваемый в СССР, и некоторые другие минералогические справочники, претендующие на содержание всей необходимой информации о каждом описываемом минерале. В этих справочниках разные физические и химические характеристики одного минерала, полученные разными авторами в разное время с различного материала, сведены воедино, но не всегда приведены в соответствие между собой. Приведенная ниже схема (см. рисунок), учитывающая только основные связи, показывает, какие физические и химические характеристики одного и того же вещества теоретически должны соответствовать друг другу.

Очевидно, что пространственная группа симметрии минерала должна находиться в соответствии с точечной группой симметрии, ориентировка элементов пространственной и точечной симметрии должна совпадать, рентгеновское отношение осей должно соответствовать морфологическому и дифракционные данные, полученные разными методами (электронография, монокристалльная рентгеновская съемка, микродифракция, порошкограмма) должны находиться в соответствии между собой по межплоскостным расстояниям и интенсивностям одинаковых рефлексов и т.д.

Тем не менее почти для любого минерала, за исключением породообразующих и широко распространенных рудных, обнаруживаются в справочниках многочисленные несоответствия. В справочнике "Минералы", например, встречается несоответствие морфологической и рентгеновской установок (фергусонит), несоответствие морфологического и рентгеновского отношения осей (пирофанит), несоответствие записи пространственной группы принятой установки, не говоря уже о полном наборе характеристик, полученных с одного и того же вещества. В наиболее полной рентгеновской картотеке ASTM

^I Разработка и воплощение музейной экспозиции приравниваются Положением о Музейном фонде Союза ССР № 273 от 26 июля 1965 г., утвержденным Приказом министра культуры, к научной публикации.

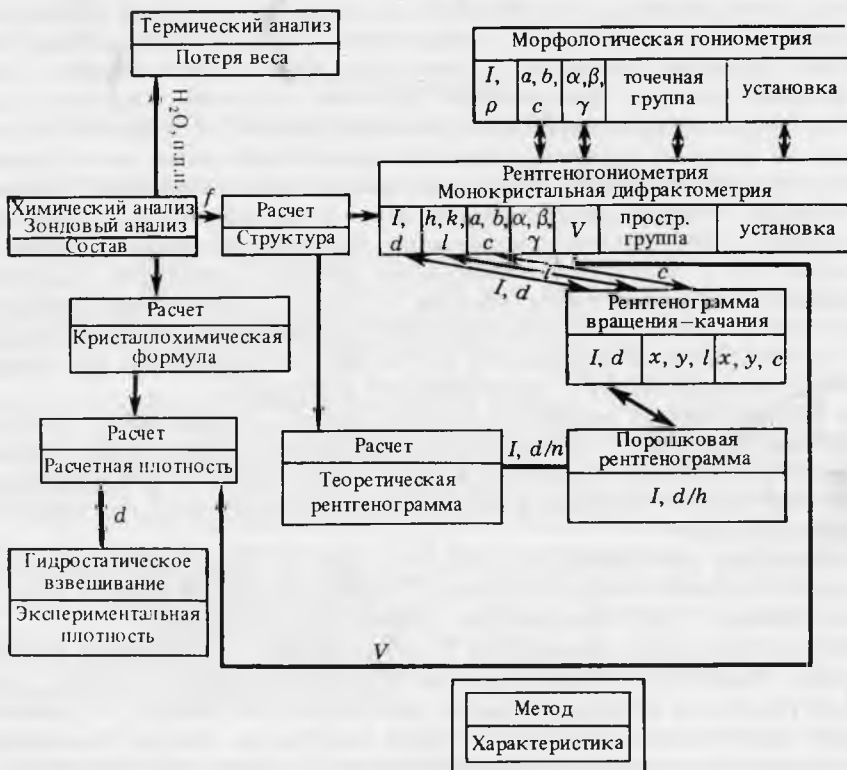


Схема теоретического соответствия важнейших физических и химических характеристик кристаллического вещества

также встречаются многочисленные несоответствия: существенно разные порошкограммы минерала одинакового химического состава с одинаковыми параметрами элементарной ячейки (шерветит), рефлексы некоторых индексов порошкограмм также часто не обнаруживаются на монокристалльных рентгенограммах этого же вещества. Таким образом, наиболее полные информационно-диагностические системы содержат много информационных "шумов" и в ряде случаев мало пригодны для практической работы. В связи с этим наряду с созданием наиболее полных банков данных по минералам целесообразно создание банков согласованных данных, где для каждого минерала или изоморфной серии содержатся физические и химические характеристики, полученные с одного и того же минерала.

В настоящее время наибольшее разнообразие минералов представлено в минералогических музеях, а современные методы позволяют получать различные физические и химические характеристики с минимального количества материала, причем с сохранением последнего после исследований. Этот материал также удобнее всего хранить в минералогическом музее для дальнейшего исследования более совершенными, ныне еще не известными методами.

Эмпирическое соответствие многих физических и химических характеристик, полученных с одного и того же материала, может быть проверено теоретически, согласно приведенной выше схеме. Помимо указанных ранее соответствий, возможна и проверка соответствия по интенсивностям и межплоскостным расстояниям рефлексов эмпирической рентгенограммы с теоретически рассчитанной для кристаллического вещества известного состава и структуры. Широко

известны также проверки соответствия экспериментальной и расчетной плотности минералов, соответствия измеренного и вычисленного углов оптических осей в двусных минералах и некоторых других соответствий. Такие операции в одних случаях обеспечивают взаимный контроль полученных данных, что позволяет свести к минимуму случайные ошибки, а в других если соответствие не устанавливается, служат ключом к получению новой информации. Так, несоответствия могут свидетельствовать о параморфозах, псевдоморфозах, распадах твердых растворов или даже о неправильной расшифровке структуры минерала. Результаты комплексного изучения изоморфных серий минералов, кроме того, позволяют эмпирически наметить тенденции к изменению многочисленных физических характеристик в связи с изменением химического состава и указать пути для теоретического обоснования эмпирически установленных связей. Эти же результаты могут быть использованы для выявления различных типоморфических характеристик минералов.

Банк согласованных минералогических данных, созданный по такому принципу, должен составить основу минералогических справочников следующего поколения, а повторное изучение в дальнейшем этого сохраненного исследованного всесторонне материала будет иметь определенное научно-методологическое значение.

В заключение целесообразно привести одну из схем последовательного применения различных видов анализов, пригодную для изучения кристаллов (размером менее 1 мм) большинства прозрачных минералов.

Изучение кристалла начинается с ориентировки и юстировки кристалла на оптическом гониометре, желательна на гониометрической головке, пригодной для перестановки в монокристалльную рентгеновскую камеру, и производится измерение сферических координат граней кристалла. Затем отъюстированный кристалл вместе с головкой переставляется в камеру РКВ, где снимается рентгенограмма вращения. По рентгенограмме вращения устанавливается один из параметров элементарной ячейки - период идентичности по оси вращения - и головка с кристаллом переставляется в камеру КФОР, где снимаются развертки нескольких слоевых линий и определяются индексы рефлексов, по которым вычисляются недостающие параметры элементарной ячейки. Полученная картина обратной решетки может быть спроектирована на стереографическую проекцию и сопоставлена со стереографической проекцией граней. Далее кристалл переставляется в прибор ППМ, где определяется положение оптической индикатриссы и измеряются показатели преломления. Затем измеряется плотность одним из микрометодов. Для определения химического состава часть кристалла подготавливается для зондового анализа, а другая - измельчается для съемки порошкограммы. Прежде чем индцировать порошкограмму на основе полученных в результате монокристалльной съемки параметров и пространственной группы, целесообразно проиндцировать и рентгенограмму вращения, содержащую практически все рефлексы, имеющиеся на порошкограмме. Далее по индцированной порошкограмме уточняются параметры и проводится проверка всех соответствий.