

Neživá příroda I

Cvičení 3

Reálné struktury minerálů
Krystalové soustavy

Jak si představit strukturu látek?

Jak jsou uspořádány atomy a ionty v krystalové struktuře?
Jak „těsné“ je vyplnění prostoru atomy?

Princip uspořádání atomů a iontů v prostoru konkrétní struktury shrnuli Goldschmidt a Laves do tří jednoduchých pravidel:

Princip nejtěsnějšího uspořádání. Atom se v krystalové struktuře pokouší zaujmout takovou pozici, aby daný prostor využil co možná nejefektivněji.

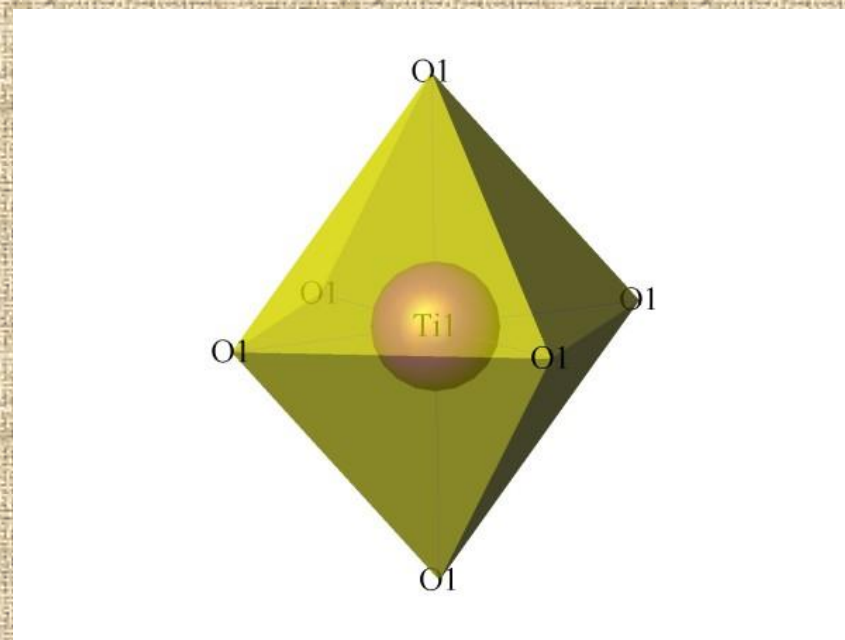
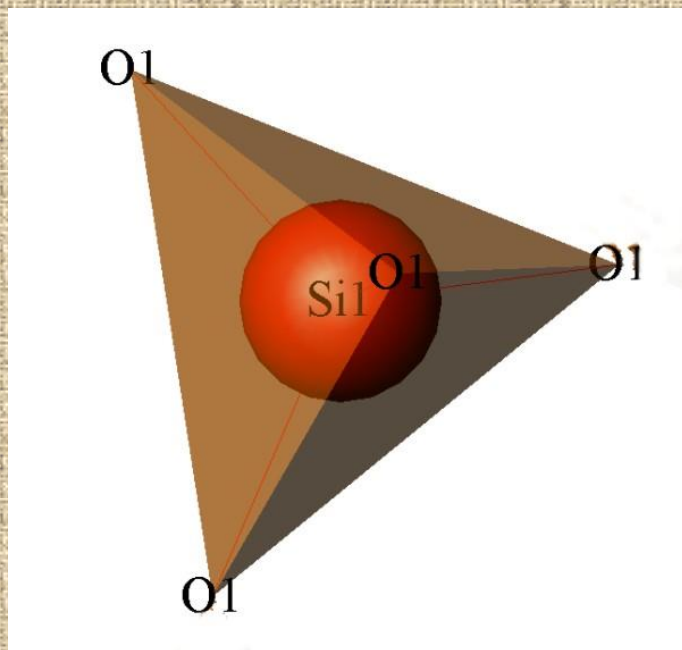
Princip symetrie. Atom se snaží v krystalové struktuře zaujmout takovou pozici, aby symetrie jeho okolí byla co možná nejvyšší.

Princip interakce. Atom se snaží v krystalové struktuře dosáhnout maximální možné koordinaci; snaží se získat maximální možný počet nejbližších sousedů, se kterými může být v kontaktu.

Reálná struktura minerálů

V reálné krystalové struktuře jsou konkrétní atomy, ionty nebo molekuly uspořádány podle pravidel symetrie kolem uzlových bodů krystalové mřížky.

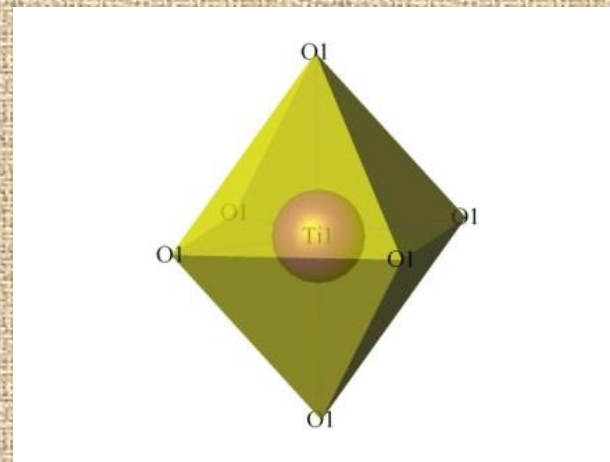
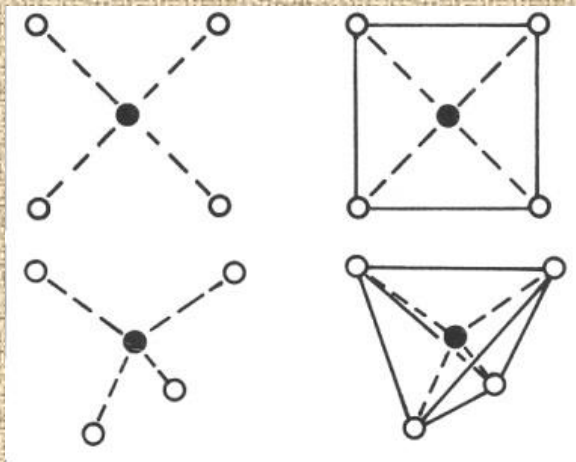
Pokud krystalovou strukturu tvoří opačně nabitě ionty, každý iont je obklopen ionty opačného znaménka, které tvoří **koordinační polyedr**.



Ve stabilní krystalové struktuře leží každý kationt v přibližném středu koordinačního polyedru aniontů a naopak.

Struktury minerálů – koordinační číslo

Počet nejbližších sousedů centrálního atomu nebo iontu ve struktuře je označován jako jeho **koordinační číslo** a polyedr, který vznikne spojením nejbližších sousedů, je nazýván **koordinační polyedr**.



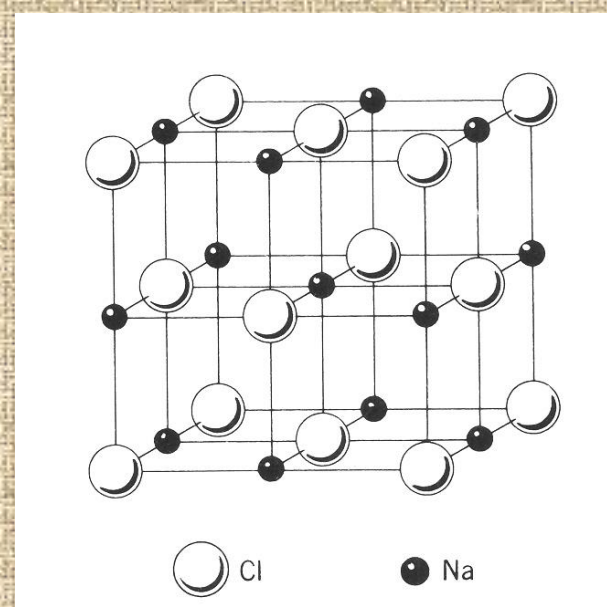
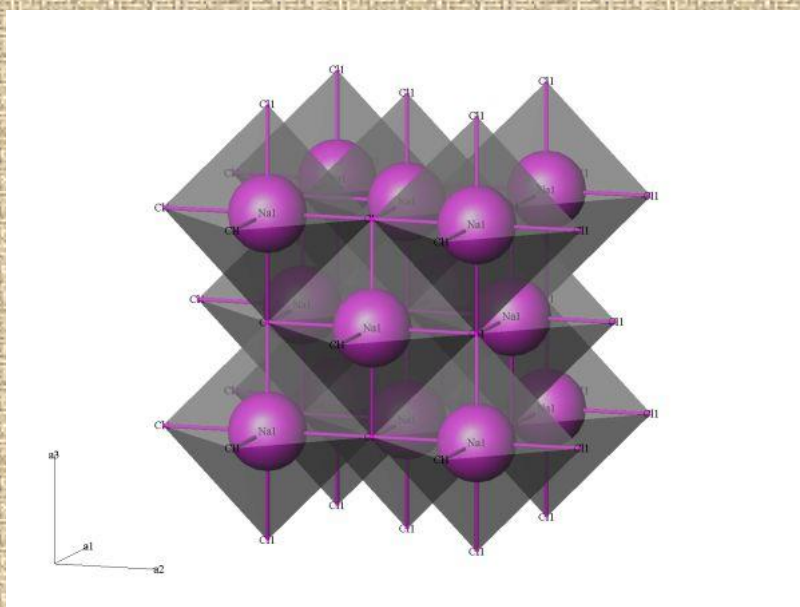
Ve strukturách silikátů je kationt hliníku Al³⁺ obklopen čtyřmi kyslíky vytvářejícími koordinační polyedr ve tvaru tetraedru, koordinační číslo hliníku je 4. Může však být obklopen šesti kyslíky ve tvaru oktaedru s koordinačním číslem 6.

Celkový počet kationtů a aniontů ve stabilní iontové struktuře musí být takový, aby krystal byl navenek elektricky neutrální.

Příklad struktury halitu (NaCl)

Mezi sodíkem a chlórem vzniká převážně iontová vazba. Sodík poskytne přebytečný elektron do valenčních orbitalů chlóru.

Ionty Na^+ a Cl^- mají přibližně kulovitý tvar, proto je výsledná symetrie struktury kubická. Každý iont je obklopen šesti opačně nabitými ionty (oktaedrická koordinace, koordinační číslo 6).



Iontový charakter vazeb způsobuje nízkou tvrdost halitu, nízký bod tání, nízkou hustotu a dobrou rozpustnost ve vodě.

Symetrie minerálů – krystalů

Symetrie základní buňky krystalové mřížky (tedy i její celé struktury) se u každého minerálu projeví i na jeho krystaly. Zatímco symetrii na úrovni atomů nevidíme, na krystalech je patrná velmi dobře.

Na symetrii krystalů najdeme všechny prvky symetrie kromě těch, které obsahují translaci.

Prakticky jsou tyto **beztranslační prvky symetrie**:

1, 2, 3, 4, 6, -4, i, m.

Na krystalech najdeme i jiné, ale ty lze vždy vyjádřit pomocí těchto osmi.

Jejich vzájemnou kombinací vznikne **32 bodových grup** (všechny prvky symetrie se protínají v jednom bodě. Bodové grupy lze podle společných znaků rozdělit do **7 krystalových soustav**.

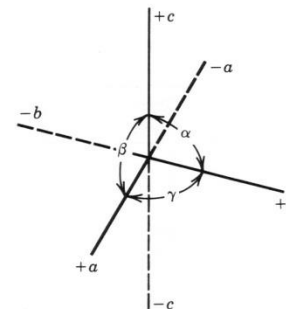
Krystalografický osní kříž

Každý krystal patří do jedné ze sedmi krystalových soustav a lze jej v prostoru orientovat pomocí souřadných os.

Obecně se tento systém označuje jako **krystalografický osní kříž** dané soustavy.

triklinická
monoklinická
rombická
tetragonální
trigonální
hexagonální
kubická

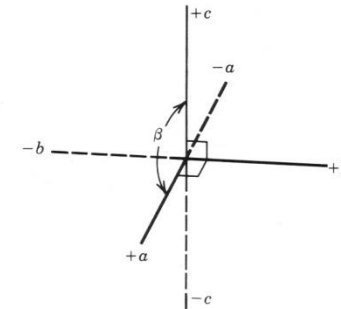
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta > 90^\circ$
 $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
 $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
 $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$

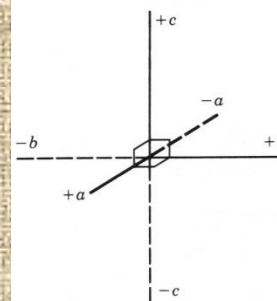
Triclinic



$$a \neq b \neq c$$

$$\beta > 90^\circ; \alpha = \gamma = 90^\circ$$

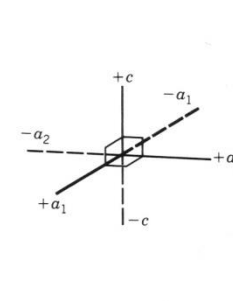
Monoclinic



$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

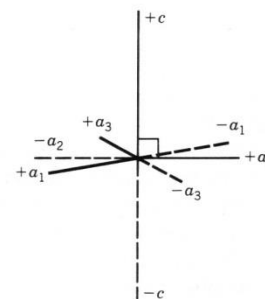
Orthorhombic



$$a = b \neq c; a = a_1; b = a_2$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

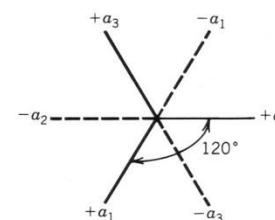
Tetragonal



$$a_1 = a_2 = a_3, \text{ intersecting at } 120^\circ$$

$$c \text{ perpendicular to plane with } a_1, a_2, a_3$$

Hexagonal



$$a_1 = a_2 = a_3; \text{ all axes at } 90^\circ \text{ to each other}$$

Isometric

Jak poznat krystalovou soustavu?

Představit si, do jakého krystalografického osního kříže patří konkrétní krystal, je většinou těžko řešitelný problém. V tento okamžik vám pomůže, pokud umíte na krystalu poznat přítomné prvky symetrie a určit jejich počet a vztah.

Krystal patří do soustavy:

1. **Triklinické**, pokud nemá žádný prvek symetrie nebo pouze střed symetrie.
2. **Monoklinické**, pokud najdete nejvýše jednu dvojčetnou rotační osu a/nebo nejvýše jednu rovinu symetrie.
3. **Rombické**, pokud najdete více než jednu dvojčetnou rotační osu a/nebo více než jednu rovinu symetrie.
4. **Tetragonální**, pokud najdete právě jednu čtyřčetnou rotační nebo inverzní osu symetrie.
5. **Hexagonální**, pokud najdete právě jednu šestičetnou rotační nebo inverzní osu symetrie.
6. **Trigonální**, pokud najdete právě jednu trojčetnou rotační nebo inverzní osu symetrie.
7. **Kubické**, pokud najdete více než jednu trojčetnou rotační nebo inverzní osu symetrie.

Jak poznáme prvky symetrie na krystalu?

Jak poznáte střed, rovinu nebo osu symetrie na krystalu?

Krystal má **střed symetrie**, pokud každá plocha má na opačném konci krystalu svůj obraz otočený o 180° . Střed symetrie je v těžišti krystalu.

Krystal má **rovinu symetrie**, pokud existuje rovina procházející středem krystalu, která pólí krystal na dvě zrcadlově shodné poloviny.

Dvou, tří, čtyř nebo šestičetná **osa rotační symetrie** prochází středem krystalu a je možné kolem ní krystalem otáčet tak, že se krystal dostává do nerozlišitelných poloh po 180° , 120° , 90° resp. 60° .

Čtyřčetná **inverzní osa symetrie** se na krystalu jeví jako dvojčetná s tím, že spodní a horní polovina krystalu je vůči sobě otočena o 90° .

Ostatní **inverzní osy symetrie** lze na krystalech vyjádřit takto:

- ✓ Jednočetná inverzní osa symetrie: i
- ✓ dvojčetná inverzní osa symetrie: m
- ✓ trojčetná inverzní osa symetrie: $(3 + i)$
- ✓ šestičetná inverzní osa symetrie: $(3/m)$

Zapamatujte si ...

Je dobré vědět, že:

- ✓ 230 prostorových grup určuje symetrii krystalových struktur a obsahuje všechny prvky a operace symetrie či jejich vzájemné kombinace
- ✓ 32 bodových grup (krystalografických oddělení) definuje symetrii krystalů a obsahuje kombinace *beztranslačních* prvků a operací symetrie
- ✓ Struktura minerálů se skládá z koordinačních polyedrů jednotlivých iontů, které jsou uspořádány podle symetrie krystalové mřížky
- ✓ Symetrie krystalu minerálu je odrazem symetrie jeho struktury
- ✓ Každý krystal lze orientovat v prostoru vzhledem ke krystalografickému osnímu kříži konkrétní krystalové soustavy
- ✓ Krystalovou soustavu krystalu poznáme nejnázem analýzou jeho prvků symetrie