

Přednáška 2: Krystalové struktury a krystaly

Textový přehled přednášky

SLIDE 2: POSTAVENÍ MINERALOGIE V GEOLOGICKÝCH OBORECH

Mineralogie je jednou z vědních geologických disciplín. V mineralogii se využívají poznatky z řady jiných vědních oborů, dochází k interdisciplinárnímu prolínání:

- matematika (především v krystalografii a optice)
- fyzika (v oblasti RTG difrakce nebo optice)
- chemie (hlavně v krystalochemii)

Mineralogie je velmi široký vědní obor (jako dnes všechny) a dělí se do mnoha dílčích oborů, které se zaměřují na různé vlastnosti minerálů:

- morfologická krystalografie - zabývá se vnějším tvarem krystalů
- strukturní krystalografie - studuje zákonitosti krystalových struktur
- fyzikální krystalografie - zabývá se fyzikálními vlastnostmi minerálů
- krystalová chemie - studuje chemické vztahy a zákonitosti v minerálech
- genetická mineralogie - řeší vznik, výskyt a přeměny minerálů
- systematická (speciální) mineralogie – klasifikuje minerály
- topografická mineralogie - zpracovává výskyt nerostů podle nalezišť
- experimentální mineralogie - studuje fáze syntetizované v laboratorních podmínkách
- technická mineralogie – aplikuje poznatky na technické hmoty

Mineralogie jako geologická věda tvoří základ pro většinu ostatních geologických disciplín, především pro petrologii, geochemii, ložiskovou geologii nebo pedologii. Jsou to zejména ty, které pracují s minerálem nebo horninou jako předmětem svého zkoumání.

Poznatky z mineralogie mohou být pak aplikovány do mnoha praktických oborů:

- energetika (složení surovin, složení popílků)
- stavební hmoty (složení cementů, reakce ve stavebních hmotách)
- medicína (žlučové a ledvinové kameny)
- archeologie (rozbor artefaktů)
- materiálové inženýrství (keramika, slitiny)

SLIDE 3: KRYSTALICKÉ LÁTKY – KRYSTALY

Minerály jsou krystalické látky a svůj vnější tvar mohou omezit jako krystaly. Těleso, tvořené jediným krystalem nebo kompaktním agregátem několika krystalů se stejnou orientací, označujeme (v mineralogii) jako monokrystal. Agregát více různě orientovaných krystalů se označuje jako polykrystal nebo polykrystalická látka.

Ideální krystal lze definovat jako homogenní anizotropní prostředí s ostrým bodem tání a trojrozměrně periodickým uspořádáním stavebních částic.

Ideální krystal je pouhým modelem, který se používá pro různé teoretické výpočty a hypotézy, v přírodě se ale něco podobného prakticky nevyskytuje. Krystaly (krystalické látky) kolem nás jsou reálné krystaly, ve kterých běžně dochází k porušování trojrozměrné periodicity, zejména těmito způsoby:

- ohraničení povrchu je poruchou periodicity
- na některých strukturních pozicích může docházet k vzájemné substituci dvou a více různých atomů
- během růstu krystalu, může docházet ke vzniku poruch v krystalové struktuře
- ve vrstevnatých strukturách může být periodicitu narušena odlišným nebo zcela nepravidelným kladem vrstev

SLIDE 4: KDY JE LÁTKA REÁLNĚ KRYSTALICKÁ?

Reálný krystal je tvořen krystalovou strukturou, a tím rozumíme způsob, jakým jsou stavební částice uspořádány v krystalovém prostoru. Lokální uspořádání částic je takové, které je ve struktuře realizováno díky silám působícím na „krátkou vzdálenost“. Celkové uspořádání částic je takové, které je realizováno pomocí sil působících na „dlouhou vzdálenost“. Příkladem může být struktura krystalických modifikací SiO_2 a amorfního SiO_2 .

Stavební jednotka je nesouvislou částí struktury. Soustava stavebních jednotek tvoří úplnou strukturu a neexistuje žádná část struktury, která by nebyla součástí existující stavební jednotky. Konfigurace stavebních jednotek představují možnosti, jak mohou být jednotlivé stavební jednotky vzájemně uspořádány.

Látku považujeme za krystalickou, když jsou pro stavební jednotky, které jsou pro ni charakteristické splněny tyto podmínky:

- 1 Všechny stavební jednotky jsou geometricky ekvivalentní, nebo počet druhů stavebních jednotek je malý v porovnání s celkovým počtem stavebních jednotek obsažených v uvažovaném krystalu.

- 2 Počet druhů párů sousedících stavebních jednotek je také malý v porovnání s celkovým počtem těchto párů v krystalu.

SLIDE 5: SYMETRIE KRYSTALOVÝCH STRUKTUR

Při popisu krystalových struktur se neobejdeme bez určitých pravidel a zákonitostí, které jsou shrnuty do pojmu symetrie nebo symetrie krystalové struktury. Jedná se o obecné zákonitosti, které zjednodušují popis i velmi komplikovaných struktur.

Symetrické uspořádání struktury minerálů se projevuje nejen na pravidelném uspořádání atomů a iontů, ale rovněž na vnějším krystalovém tvaru minerálů a na jejich fyzikálních vlastnostech.

Symetrii krystalových struktur i makroskopických krystalů popisují operace a prvky symetrie. *Operace symetrie* je geometrická transformace, která zachovává vzájemné vzdálenosti v tělese, a po jejím provedení nerozlišíme, zda byla s tělesem nějaká transformace provedena. Uzavřené operace symetrie jsou takové, při jejichž provádění zůstává alespoň jeden bod transformovaného tvaru nepohyblivý. Otevřené operace symetrie vždy obsahují translaci a aplikované na libovolný objekt netransformují tento nikdy do výchozí polohy.

Prvek symetrie je geometrický prvek (bod, přímka, rovina), vůči němuž provádíme s tělesem příslušnou operaci symetrie.

Operace symetrie

Inverze – I

Zrcadlení – M (o1, o2)

Rotace – R (α , o)

Translace

Rotace s inverzí – Ri (α , o)

Rotace s translací – S (α , o, t)

Prvek symetrie

Střed symetrie – i

Rovina symetrie – m

Osy rotace – n

Translační vektor – t

Inverzní osa – (-n)

Šroubové osy – nj (j= 1,2,...,n-1)

SLIDE 6: INVERZE – STŘED SYMETRIE

Inverze (I) je základní operací symetrie, při které se bod o souřadnicích (x, y, z) transformuje na bod se souřadnicemi (x', y', z') tak, že platí:

$$x' = -x$$

$$y' = -y$$

$$z' = -z$$

Střed symetrie nebo střed inverze (značení i , -1 , C_i) je jednoduchým prvkem symetrie, podle kterého provádíme operaci inverze.

SLIDE 7: ZRCADLENÍ – ROVINA SYMETRIE

Zrcadlení (M) je základní operace symetrie definována obvykle symbolem $M(o_1, o_2)$, kde o_1 a o_2 jsou osy definující rovinu zrcadlení, např. $M(x, y)$. Bod o souřadnicích (x, y, z) se zrcadlením transformuje na bod se souřadnicemi (x', y', z') tak, že platí (rovina zrcadlení x, y):

$$x' = x$$

$$y' = y$$

$$z' = -z$$

Rovina symetrie (m, σ) je jednoduchým prvkem symetrie, podle kterého provádíme operaci zrcadlení.

SLIDE 8: ROTACE – ROTAČNÍ OSY SYMETRIE

Rotace (R) je základní operace symetrie definována obvykle symbolem $R(\alpha, o)$, kde α je úhel otáčení a o je osa kolem níž se otáčí, např. $R(\pi, z)$.

Rotační osy symetrie (gyry) nebo osy rotace (n) jsou jednoduchými prvky symetrie, podle kterých provádíme operaci rotace.

Osy se rozlišují podle velikosti úhlu $\alpha = 2\pi/n$, o který je nutné n -krát otočit tělesem (bodem) kolem osy, abychom se přes nerozlišitelné ekvivalentní polohy vrátili zpět do výchozí pozice. Číslo n je **četnost osy rotace**. Krystalografické rotační osy symetrie mají pouze tyto četnosti: $n = 1, 2, 3, 4, 6$.

SLIDE 9: ROTAČNÍ INVERZE – INVERZNÍ OSA ROTACE

Rotační inverze je složená operace symetrie vzniklá kombinací rotace s inverzí. Kombinuje se rotace o úhel α (podle osy o) s inverzí.

Inverzní osy symetrie (gyroidy) se označují podobným symbolem jako rotační osy, ale s pruhem nad číslicí. Na pořadí operací nezáleží, musí se však provádět jako celek.

Symetrii podle inverzních os lze někdy nahradit kombinací základních prvků symetrie:

$$-1 = i$$

$$-2 = m$$

$$-3 = 3 + i$$

$$-4 = \text{nelze nahradit}$$

$$-6 = 3 \perp m$$

SLIDE 10: ŠROUBOVÁ OPERACE – ŠROUBOVÁ OSA SYMETRIE

Šroubová operace je složená operace symetrie, která vzniká složením rotace a translace podél osy rotace. Translace t je vyjádřena zlomkem celkového stoupání šroubového pohybu. Jde-li např. o rotaci o π , pak je $t = \pi/2\pi = 1/2$ a výslednou operaci lze zapsat: $S(\pi, z, 1/2)$.

Máme-li n -četnou rotační osu symetrie, pak n otočení o $\alpha = 360^\circ/n$ doprovázených n translacemi τ podél šroubové osy, musí vést k translačnímu pohybu výchozího objektu o celočíselný násobek (m) mřížové translace t : $\tau = (m/n)t$, kde m, n jsou celá čísla.

Obecně lze vyjádřit symbol šroubové osy jako n_m .

$$2_1 (1/2)$$

$$3_1 (1/3), 3_2 (2/3)$$

$$4_1 (1/4), 4_2 (2/4), 4_3 (3/4)$$

$$6_1 (1/6), 6_2 (2/6), 6_3 (3/6), 6_4 (4/6), 6_5 (5/6)$$

SLIDE 11: GRUPY SYMETRIE

Analýzou kombinací prvků symetrie a operací jim příslušejících, lze odvodit grupy symetrie. Podle toho, které prvky symetrie zahrneme do analýzy, lze rozlišit tři typy grup.

- ✓ bodové grupy
- ✓ rovinné grupy
- ✓ prostorové grupy

Bodové grupy jsou množinou prvků symetrie, jejichž operace v trojrozměrném prostoru ponechávají alespoň jeden bod tělesa nepohyblivý. Tomuto požadavku vyhovuje 8 (beztranslačních) prvků symetrie: **1, 2, 3, 4, 6, -4, i, m**.

Tyto prvky a jejich možné kombinace tvoří 32 bodových grup (krystalografická oddělení), jimiž lze charakterizovat symetrii vnějšího tvaru krystalů.

Prostorové grupy jsou množinou prvků symetrie, jejichž operace jsou realizovány v trojrozměrném prostoru. Prostorová grupa charakterizuje symetrii krystalové struktury. Celkový počet **230 prostorových grup** zahrnuje všechny kombinace translačních a beztranslačních prvků symetrie.

SLIDE 12: KRYSTALOVÁ MŘÍŽKA – KRYSTALOVÁ STRUKTURA

Krystalová mřížka je abstraktní pojem, který vyjadřuje translační periodicitu rozmístění identických bodů v krystalu. Tyto body mají stejnou hodnotu fyzikálních a geometrických vlastností (tj. stejné a stejně orientované okolí).

Pojem **reálná struktura** krystalu představuje konkrétní prostorové rozložení stavebních částic a je dána fyzikálními zákonitostmi, takže symetrické rozložení atomů není příčinou, ale důsledkem konfigurace fyzikálních sil v prostoru.

Krystalová struktura (struktura minerálu) = krystalová mřížka + báze

Symetrii mřížky je definována kombinací základních prvků a operací symetrie. **Bázi** můžeme vyjádřit jako krystalochemický vzorec, který zahrnuje všechny prvky zúčastněné na stavbě struktury minerálu.

SLIDE 13: ZOBRAZENÍ KRYSTALOVÉ STRUKTURY

Pro lepší pochopení krystalových struktur a lepší prostorovou představu se používá nejrůznějších způsobů zobrazení krystalových struktur.

4x různý typ zobrazení

SLIDE 14: VLASTNOSTI KRYSTALOVÉ MŘÍŽKY

Výchozím bodem pro konstrukci prostorové mřížky je bod A_0 , který podrobíme translaci **a**. Vzniklou uzlovou (mřížkovou) přímkou podrobíme translaci **b** a dostaneme mřížkovou rovinu. Translace **c** (která neleží v mřížkové rovině) vytvoří kompletní prostorovou mřížku. Uzlové body mřížky A_{uvw} jsou translačně identické s výchozím bodem A_{000} .

Mřížková přímka je taková přímka, která prochází dvěma mřížkovými uzly. Mřížková rovina je definována třemi mřížkovými uzly, které neleží na jedné přímce.

Jako **základní (elementární) buňku** mřížky označujeme rovnoběžnostěn definovaný základní velikostí vektorů period identity v jednotlivých směrech a charakterizující příslušnou krystalovou strukturu. Jako **parametry buňky** se označují hodnoty $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$.

SLIDE 15: BRAVAISOVY MŘÍŽKY

K popisu krystalových struktur se běžně používá Bravaisových mřížek. Základem konstrukce každé prostorové mřížky je 5 typů rovinných mřížek, které se vrstvením ve směru osy c mění na prostorové (trojrozměrné) mřížky.

Prostorovou mřížku vytvoříme opakováním základního motivu rovinných mřížek ve třetím nekomplanárním směru. Lze dokázat, že existuje pouze 14 jedinečných možností, jak v prostoru poskládat pět rovinných mřížek a tedy 14 typů prostorových Bravaisových mřížek.

Platí, že pokud jsou si mřížkové translace ve dvou směrech rovny, budou si rovny i fyzikální vlastnosti v týchž směrech.

Bravaisovy mřížky tvoří v každé struktuře tzv. základní buňku, což je jedna z možných buněk mřížky, ale vybraná tak, aby danou mřížku reprezentovala. Základní vektory (\mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c}) jsou definovány hranami základní buňky a jejich délky jsou základní periody identity (a , b , c).

Společně se třemi úhly (α , β , γ), které základní vektory svírají, tvoří těchto šest hodnot tzv. **mřížkové parametry**.

SLIDE 16: TYPY PROSTOROVÝCH BRAVAISOVÝCH MŘÍŽEK

Čtrnáct Bravaisových mřížek (základních buněk) můžeme rozdělit na 7 primitivních a 7 centrovaných. Tyto mřížky reprezentují 14 jedinečných způsobů, jak je možné vyplnit prostor uzlovými body při zachování periodického uspořádání. Všechny krystalické látky mají za základ jednu z těchto mřížek. Každá krystalová struktura má pouze jednu Bravaisovu mřížku.

Primitivní prostorové mřížky obsahují 1 uzlový bod na mřížku.

Centrované prostorové mřížky obsahují více uzlových bodů:

- **bazálně centrované** (A , B , C)
- **prostorově centrované** (I)
- **plošně centrované** (F)

SLIDE 17: KRYSTALOVÉ SOUSTAVY

Každý typ prostorové mřížky je definován vektory \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} a tyto je třeba vztáhnout ke krystalografickým osám x , y , z . Můžeme vyčlenit sedm osních systémů (krystalových soustav), které odpovídají sedmi možným primitivním Bravaisovým prostorovým buňkám. Všechny mřížky, krystalové struktury a krystalové tvary, které mohou být definovány stejným systémem souřadných os, patří též ke krystalové soustavě.

Na základě sedmi primitivních Bravaisových buněk je definováno sedm krystalových soustav, které lze rozdělit do tří skupin.

Soustavy **nižší kategorie**: krystaly obsahují maximálně dvojčetné osy symetrie, osní kříže jsou tvořeny třemi různocennými osami (triklinická, monoklinická, rombická).

Soustavy **střední kategorie**: krystaly mají jeden jedinečný vertikální směr s vícečetnou rotační osou (tetragonální, trigonální, hexagonální).

Soustavy **vyšší kategorie**: krystaly nemají jedinečné směry (kubická).

SLIDE 18: KRYSTALOGRAFICKÉ OSNÍ KŘÍŽE

přehled obrázků krystalografických osních křížů

SLIDE 19: INDEXOVÁNÍ UZLŮ A PŘÍMEK V KRYSTALOVÉ MŘÍŽCE

Pro snazší popis a orientaci v krystalové mřížce je výhodné označit (indexovat) jednotlivé mřížkové uzly, přímky a roviny.

Indexy jednotlivých mřížkových uzlů jsou čísla m , n , p , která jsou násobky základních period identity (translačních vektorů) ve směru krystalografických osy a , b , c . Nachází-li se uzlové body ve vrcholech elementárních buněk, jsou indexy m , n , p celočíselné. Skupina těchto tří indexů charakterizuje každý uzel a označuje se jako symbol uzlu – mnp (častěji se užívá uvw).

Přímky, definované uzlovými body, označujeme jako uzlové (mřížkové) přímky. V krystalové mřížce se uzlové přímky vyskytují v nekonečných množinách. Množina uzlových přímek je definována: periodou identity (vzdálenost mezi uzlovými body) a směrem (orientací vůči souřadným osám).

K indexování určité množiny přímek vybíráme vždy přímku procházející počátkem. Tato je pak jednoznačně charakterizována indexy prvního uzlu od počátku, který na ní leží. **Indexy mřížkové přímky** značíme $[uvw]$ a hovoříme pak o Millerových indexech dané přímky $[uvw]$.

SLIDE 20: INDEXOVÁNÍ ROVIN V KRYSTALOVÉ PŘÍŽCE

V libovolné struktuře najdeme nekonečné množství uzlových rovin, každý je definována třemi uzlovými body neležícími na jedné přímce. Pokud má soubor mřížkových rovin stejnou vzájemnou mezirovinnou vzdálenost a shodnou hustotu mřížkových uzlů tvoří množinu vzájemně *stejnocenných strukturních rovin*, které se mohou na vnějším tvaru krystalu projevit jako jedna krystalová plocha.

Pro identifikaci stačí charakterizovat orientaci roviny nejbližší počátku a její vzdálenost od počátku považovat za mezirovinnou vzdálenost dané množiny stejnocenných rovin. Tato

rovina vytíná na osách úseky základní periody identity a/h , b/k , c/l . Celá čísla h , k , l charakterizují orientaci roviny a označují se jako Millerovy indexy roviny (hkl).

Millerovy indexy (hkl) množiny navzájem rovnoběžných rovin udávají, kolikrát se úseky vytnuté na souřadnicových osách první rovinou od počátku (z celé množiny ekvivalentních rovin) vejdou do periody identity odpovídajících os.

SLIDE 21: ODRAZ STRUKTURY NA MORFOLOGII KRYSTALU

Každý minerál má vnější krystalovou formu a svoje vnitřní uspořádání stavebních částic. Mezi morfologií krystalu a jeho vnitřní strukturou existuje velmi úzký vztah. Krystalová struktura je složena ze stavebních částic, které jsou periodicky uspořádány v prostoru a tvoří různé typy strukturních rovin. Některé z těchto strukturních rovin se projeví na morfologii krystalu jako krystalové plochy.

Každá krystalová plocha na krystalu je paralelní se systémem odpovídajících strukturních rovin. Podobně každá krystalová hrana odpovídá systému uzlových přímek ve struktuře.

Odpovídající si krystalové plochy a strukturní roviny můžeme popsat stejnými Millerovými symboly (hkl) a stejně tak krystalové hrany a uzlové přímky struktury.

SLIDE 22: KRYSTAL A KRYSTALICKÝ AGREGÁT

Minerály, s výjimkou amorfních fází, mají svoji charakteristickou strukturu, od které je odvozen jejich **krystalový tvar**. Minerály se v přírodě častěji vyskytují ve formě **krystalických agregátů**, které vznikají při krystalizaci, kdy krystalizující hmota zcela vyplní prostor (většina hornin).

V některých případech jsme schopni jednotlivé krystalky v agregátu rozlišit pouhým okem, v jiných případech nelze krystalický původ agregátu určit makroskopicky a označujeme jej jako **mikrokrystalický agregát**. Pokud jsou krystalová individua nelze rozlišit ani mikroskopem, ale můžeme je detekovat RTG difrakčními technikami, hovoříme o **agregátech kryptokrystalických**.

SLIDE 23: MORFOLOGIE KRYSTALU

Výskyt krystalů omezených pravidelnými krystalovými plochami je v přírodě méně častým jevem. Krystaly, charakteristické pro jednotlivé minerály, jsou vlastně geometrickými mnohostěny, více či méně pravidelnými.

Povrch krystalu tvoří plochy, hrany a rohy. Vzájemné úhlové vztahy spolu s velikostí a tvarem ploch tvoří **morfologii krystalu**. Morfologie krystalu určitého minerálu závisí na

podmínkách při krystalizaci, tj. na teplotě, tlaku, složení roztoku, směru proudění roztoku a velikosti krystalizačního prostoru.

Těleso krystalu se skládá z krystalových ploch, krystalových hran a krystalových rohů. Jejich vzájemný počet je definován Eulerovou rovnicí, která je platná pouze pro monokrystaly (neplatí pro srostlice se zapuklými úhly hran): **P (plochy) + R (rohy) = H (hrany) + 2.**

Součet počtu ploch (P) a rohů (R) na krystalu je roven počtu hran (H) zvýšený o 2.

SLIDE 24: KRYSTALOVÉ PLOCHY, HRANY A ROHY

Na krystalech se vyskytují plochy různého druhu. Podle symetrie rozeznáváme:

- plochy *pravidelné* lze rozdělit více jak dvěma řezy na zrcadlově shodné poloviny např. čtverec, rovnostranný trojúhelník nebo pravidelný šestiúhelník
- plochy *souměrné* lze rozdělit nejvýše dvěma řezy na zrcadlově shodné poloviny např. obdélník nebo rovnoramenný trojúhelník.
- plochy *nesouměrné* jsou ostatní plochy bez roviny symetrie

Skutečná krystalová hrana je místo na krystalu, kde se přímo setkávají dvě různoběžné krystalové plochy. Pokud se plochy nestýkají přímo, hovoříme o *hraně myšlené*.

Prostorový vztah stýkajících se ploch označujeme buď přibližně (hrana ostrá, tupá), nebo přesně pomocí úhlu krystalové hrany. *Vnitřní úhel hrany* (α) je úhel mezi vnitřními stranami ploch. *Vnější úhel hrany* (ϵ) je doplněk vnitřního úhlu do 180° a zároveň je to úhel kolmic spuštěných na krystalové plochy ze středu krystalu.

V krystalových rozích se sbíhají plochy a hrany krystalu. Krystalové rohy dělíme podobně jako plochy na *pravidelné*, *souměrné* a *nesouměrné*, podle stupně pravidelnosti plochy, která vznikne rovnoměrným seříznutím krystalového rohu.

SLIDE 25: ZNAČENÍ KRYSTALOVÝCH PLOCH

Plochy na krystalu mají jasně definovanou polohu vzhledem ke krystalografickým osám a jsou značeny pomocí Weisových nebo Millerových symbolů.

Principem **Weissových symbolů** je vyjádření trojpoměru součinu odvozovacích indexů (m, n, p) a základních parametrů $a : b : c$. Příklad: plocha rovnoběžná s osami a, b , vytínající jednotkový úsek na ose c je vyjádřena $\infty a : \infty b : 1c$.

Millerovy indexy ploch zobrazují poměr odvozovacích indexů, vyjádřených reciprokými celými čísly. Millerovy indexy hkl jsou reciproké hodnoty Weissových symbolů, převedené na tři nejmenší nesoudělná čísla.

Máme-li např. plochu vyjádřenou jako $2a : 2b : 3/2c$, vyjádříme ji Millerovými indexy jako reciproké hodnoty koeficientů: $2 : 2 : 3/2 = 1/2 : 1/2 : 2/3$ a převedeme na nejmenší nesoudělná čísla (334).

Obecný symbol Millerových indexů je (hkl) v pořadí vytnutých os x, y, z . Záporné indexy označujeme pruhem nad příslušnou číslicí. Pokud je plocha rovnoběžná s některou z os, vyjádříme to obecně symboly $(0kl)$, $(h0l)$ nebo $(hk0)$.

SLIDE 26: ZÁKLADNÍ KRYSTALOVÉ PLOCHY

Každá plocha na krystalu odpovídá souboru rovin ve struktuře.

Podle polohy krystalových ploch vůči krystalografickým osám, můžeme vyčlenit plochy:

- **jednoúsekové**
- **dvojúsekové** a
- **trojúsekové**.

Každá plocha je definována úseky, které vytne na krystalografických osách, viz Millerovy symboly. Úseky vyjadřují vždy jen relativní vzdálenosti.

Jednoúsekové krystalové plochy vytínají pouze jednu krystalografickou osu, s ostatními jsou rovnoběžné. Dvojúsekové krystalové plochy vytínají dvě krystalografické osy, s ostatními jsou rovnoběžné. Trojúsekové krystalové plochy vytínají všechny krystalografické osy v dané soustavě.

SLIDE 27: HABITUS A KRYSTALOVÝ TVAR

V krystalografii je pro vnější tvar (omezení) krystalu používáno označení **habitus**, zatímco výraz **krystalový tvar** se používá ve speciálním významu. Pojem **typus** krystalu označuje krystalový tvar, který převládá na krystalu, např. prizmatický, pyramidální nebo oktaedrický.

Pokud je těleso krystalu omezeno pouze stejnocennými krystalovými plochami, označujeme ho jako **jednoduchý krystalový tvar**. Je-li těleso krystalu tvořeno dvěma a více krystalovými tvary, označujeme ho jako **spojku**.

Krystalový tvar, jehož plochy zcela omezují krystalové těleso v prostoru, se označuje jako **uzavřený krystalový tvar**. Krystalový tvar, který sám o sobě není schopen omezit krystal, se nazývá **otevřeným krystalovým tvarem** a vyskytuje se vždy ve spojkách.

SLIDE 28: SYMETRIE KRYSTALOVÝCH TVARŮ A BODOVÉ GRUPY

Symetrii všech krystalů definují beztranslační prvky symetrie: 1, 2, 3, 4, 6, -4, m, i. Jejich kombinace dává vzniknout 32 bodovým grupám = krystalografickým oddělením. Ta se na

základě určitých společných znaků rozpadají do 7 krystalových soustav. Každá soustava má také charakteristické význačné směry, které definují orientaci přítomných prvků symetrie. V každé soustavě je právě jedno oddělení, které obsahuje maximální možný počet prvků symetrie – holodrické oddělení.

Trigonální soustava: právě jedno osu 3 nebo -3, 1. směr šestičetné osy podél osy z, 2. směr \perp k 1. směru podél osy y, 3. směr \perp k 1. směru, svírá úhel 30° s 2. směrem

Kubická soustava: obsahuje více než jednu 3 číselnou, -3, 4 nebo -4 osu, 1. směr jedné ze tří navzájem kolmých os x, y, z; 2. směr jedné z tělesových úhlopříček krychle; 3. směr některé ze stěnových úhlopříček krychle

Počet ploch krystalového tvaru je určen symetrií krystalového oddělení.

SLIDE 29: POJMENOVÁNÍ ZÁKLADNÍCH KRYSTALOVÝCH TVARŮ

Pedion je otevřený krystalový tvar obsahující jednu plochu. Vyskytuje se pouze na spojně alespoň dvou krystalových tvarů.

Pinakoid je otevřený krystalový tvar tvořený dvěma paralelními plochami. Vyskytuje se pouze na spojkách s jinými tvary.

Prizma je otevřený krystalový tvar, skládající se z různého počtu různoběžných ploch, jejichž společné hrany (skutečné i myšlené) jsou vzájemně rovnoběžné.

Dipyramida je uzavřený krystalový tvar, skládající se z různého počtu různoběžných ploch. Polovina ploch se protíná v jednom bodě, druhá polovina ploch se protíná v bodě na opačném konci krystalu.

SLIDE 30: KRYSTALOVÉ TVARY KUBICKÉ SOUSTAVY

Všechny krystalové tvary kubické soustavy jsou uzavřené a mohou se vyskytovat pouze na kubických krystalech. Naopak tvary uvedené v předchozích kapitolách se nikdy neobjeví na kubickém krystalu. Krystalové tvary kubické soustavy rozlišujeme podle symetrie a počtu ploch.

Hexaedr (krychle) má šest navzájem kolmých čtvercových ploch, které se sbíhají ve stejně dlouhých hranách.

Oktaedr má osm ploch ve tvaru rovnostranných trojúhelníků, které se sbíhají do bodu v horní a dolní polovině krystalu (podobně jako dipyramida).

Rombický dodekaedr je příklad dvanáctiplochého tvaru, jehož plochy mají tvar kosočtverců.

Hexaoktaedr (osmačtyřicetistěn) je tvar s nejvyšším počtem stejnocenných ploch.

SLIDE 31: TRIKLINICKÁ SOUSTAVA

Krystaly triklinické soustavy se vztahují ke krystalografickému kříži se třemi nezávislými osami a, b, c, které svírají zcela obecné úhly. Triklinická soustava: může obsahovat maximálně střed symetrie, žádný směr není význačný. Holoedrickým oddělením je triklinicky pinakoidální.

Mezi nejčastější krystalové tvary patří jednoúsekové pinakoidy $\{100\}$, $\{010\}$ a $\{001\}$, dvojúsekové pinakoidy např. tvary $\{0kl\}$ a $\{0-k\}$ jsou rovnoběžné s osou x a trojúsekové pinakoidy $\{hkl\}$.

Příklady minerálů: chalkantit, mikroklin, plagioklasy, rodonit nebo wollastonit.

SLIDE 32: MONOKLINICKÁ SOUSTAVA

Krystaly s monoklinickou symetrií se vztahují ke třem nestejnocenným osám (a, b, c), úhly α a γ jsou 90° . Ve většině krystalů je úhel β (mezi osami a, c) větší než 90° . Holoedrickým oddělením je monoklinicky prizmatické. Krystaly monoklinické soustavy mohou být symetrické maximálně podle jedné dvojjetné osy a na ni kolmé roviny symetrie. Význačným směrem je směr souřadnicové osy y.

K nejběžnějším krystalovým tvarům patří monoklinické prizma, což je obecný čtyřplochý otevřený tvar trojúsekových ploch $\{hkl\}$ nebo dvojúsekových ploch $\{0kl\}$ a $\{hk0\}$.

Jednoúsekové plochy tvoří tři druhy nezávislých pinakoidů $\{100\}$, $\{010\}$ a $\{001\}$.

Příklady minerálů: amfiboly, pyroxeny, ortoklas, slídy, sádrovec, titanit, epidot nebo malachit.

SLIDE 33: ROMBICKÁ SOUSTAVA

Krystalové tvary rombické soustavy se vztahují ke třem různocenným krystalografickým osám (a, b, c), které svírají navzájem 90° . Relativní délka os nebo jejich poměr je pro každý rombický minerál jiný.

Holoedrickým oddělením je rombicky dipyramidální, krystaly tohoto oddělení jsou symetrické podle tří různocenných **rovin symetrie**, které jsou rovnoběžné s osními rovinami. V jejich průsečnicích vznikají tři různocenné **dvojjetné rotační osy** symetrie, které jsou totožné s krystalografickými osami. Společný průsečík všech prvků symetrie je **střed symetrie**. Význačné směry odpovídají navzájem kolmým osám x, y, z.

Obecným tvarem $\{hkl\}$ je rombická dipyramida, která je složena z osmi trojúsekových ploch ve tvaru nerovnostranného trojúhelníku. Častými krystalovými tvary jsou dvojúseková

prizmata $\{hk0\}$, $\{h0l\}$ a $\{0kl\}$. Jednoúsekové plochy v tomto oddělení tvoří pinakoidy $\{100\}$, $\{010\}$ a $\{001\}$.

Příklady minerálů: amfiboly, pyroxeny, andalusit, baryt, síra, antimonit nebo olivín.

SLIDE 34: TETRAGONÁLNÍ SOUSTAVA

Krystaly s tetragonální symetrií se vztahují k trojosému pravoúhlému krystalografickému kříži, ve kterém je osa c vertikální a osy a , b jsou na ni kolmé a vzájemně stejnocenné.

Tetragonální soustava: obsahuje právě jednu 4 nebo -4 , 1. směr podél osy z , 2. směr \perp k 1. směru podél osy y , 3. směr \perp k 1. směru svírá úhel 45° s 2. směrem. Holoedrickým oddělením je oddělení ditetragonálně dipyramidální se symetrií $4/m\ 2/m\ 2/m$.

Mezi nejčastější tvary patří:

- obecný tvar **ditetragonální dipyramida** $\{hkl\}$. Tvar je složený z 16 rovnoramenných trojúhelníků a v pasném řezu najdeme pravidelný osmiúhelník - ditetragon.
- tetragonální dipyramida $\{h0l\}$ nebo $\{hhl\}$
- ditetragonální $\{hk0\}$ nebo tetragonální prizma $\{h00\}$ nebo $\{hh0\}$
- bazální pinakoid

Příklady minerálů: kasiterit, zirkon, rutil nebo vesuvián.

SLIDE 35: HEXAGONÁLNÍ SOUSTAVA

Krystalová oddělení v hexagonální soustavě vychází z hexagonální strukturní mřížky a krystaly jsou popisovány vzhledem k čtyřosému krystalografickému kříži. Tři osy, označované jako a_1 , a_2 , a_3 , leží v horizontální (pasné) rovině, mají stejnou délku a svírají úhel 120° mezi svými pozitivními konci. Čtvrtá je vertikální osa c .

Hexagonální soustava: obsahuje právě jednu 6 osu nebo -6 , 1. směr šestičetné osy podél osy z , 2. směr \perp k 1. směru podél osy y , 3. směr \perp k 1. směru, svírá úhel 30° s 2. směrem

Čtyřmístný index ploch je $\{hk-il\}$ a platí pravidlo $h + k + i = 0$.

Mezi nejčastější tvary patří:

- Obecný tvar **dihexagonální dipyramida** $\{hk-il\}$ složená z 24 ploch ve tvaru rovnoramenných trojúhelníků.
- **hexagonální dipyramida** $\{h0-hl\}$ nebo $\{hh-2hl\}$
- **hexagonální prizma** $\{10-10\}$ nebo $\{11-20\}$
- **bazální pinakoid** $\{0001\}$

Příklady minerálů: beryl, apatit, molybdenit.

SLIDE 36: TRIGONÁLNÍ SOUSTAVA

Krystalografický osní kříž je totožný s křížem hexagonální soustavy, pouze ve směru vertikální osy c najdeme právě jednu trojčetnou rotační nebo trojčetnou inverzní osu symetrie.

Holoedrickým oddělením je ditrigonálně skalenoedrické se symetrií $-3 2/m$, ose c odpovídá trojčetná inverzní osa symetrie (kombinace trojčetné rotační osy a středu symetrie), tři dvojčetné rotační osy symetrie odpovídají třem pasným osám. Tři vertikální roviny symetrie v meziosních směrech jsou kolmé na dvojčetné osy.

Nejčastější krystalové tvary:

- Obecný tvar oddělení je ditrigonální skalenoedr $\{hk-il\}$, jehož plochy jsou omezeny třemi různocennými hranami a mají tvar skalenického trojúhelníku.
- romboedr (klenec) $\{h0-hl\}$ nebo $\{0h-hl\}$, krystalový tvar se skládá ze šesti ploch kosočtvercového omezení.
- hexagonální prizma
- bazální pinakoid

Příklady minerálů: kalcit, siderit, magnezit, hematit nebo korund.

SLIDE 37: KUBICKÁ SOUSTAVA

Krystaly kubické soustavy se vztahují ke třem navzájem kolmým krystalografickým osám stejné délky. Pouze formálně se tyto stejnocenné osy označují a_1, a_2, a_3 .

Krystalovým osám odpovídají tři **čtyřčetné rotační osy** symetrie, na něž jsou kolmé tři osní roviny symetrie. V diagonálních směrech leží čtyři **trojčetné inverzní osy** symetrie. Šest **dvojčetných rotačních os** symetrie pólí úhly mezi krystalografickými osami a na ně je kolmých šest diagonálních rovin symetrie. Přítomen je i **střed symetrie**. Toto oddělení obsahuje maximální možnou kombinaci prvků symetrie.

Holoedrickým oddělením je hexaoktaedrické $4/m -3 2/m$, obsahuje maximální možnou kombinaci prvků symetrie.

Mezi nejběžnější tvary patří:

- obecný tvar **hexaoktaedr** $\{hkl\}$ tvořený 48 plochami
- **rombický dodekaedr** $\{110\}$ 12 kosočtvercových ploch
- **oktaedr** $\{111\}$ osm rovnoramenných trojúhelníků
- **hexaedr** (krychle) $\{100\}$ šest kolmých čtvercových ploch

Příklady minerálů: granát, fluorit, magnetit nebo galenit.

SLIDE 38: KRYSTALOVÉ SRŮSTY

Dokonalé (automorfnní) krystaly jsou v přírodě relativně vzácné. Většina minerálů se vyskytuje ve formě zrnových agregátů. Srůsty zrn v agregátu jsou zcela nahodilé (náhodné), bez jakékoliv zákonitosti. Mezi stejnými nebo různými minerály existují zákonité srůsty, které dodržují určitá pravidla.

Paralelní srůst je agregát identických krystalů, jejichž krystalografické osy a plochy jsou paralelní. Příkladem je křemen, kalcit nebo baryt.

Dvojčatné srůsty (nebo dvojčata) představují symetrický srůst dvou nebo více krystalů stejného minerálu. Individua obou krystalů jsou vzájemně souměrná podle dvojčatného prvku symetrie (pozor ne dvojčetný!), kterým je dvojčatná osa nebo rovina. Rozlišujeme:

- **kontaktní dvojčata** (dotyková) se srůstají v dvojčatné rovině (mají pravidelný dotykový povrch).
- **penetrační dvojčata** (prorostlice) jsou definována zpravidla směrem dvojčatné osy, jejich srůstová plocha je nepravidelná.

Vícenásobné dvojčatění vzniká, pokud opakovaně aplikujeme stejný dvojčatný zákon. Při dvojnásobném opakování vznikají trojčata, při trojnásobném opakování čtyřčata atd. Podle způsobu opakování vícenásobné srůsty polysyntetické a cyklické.

O **epitaxi** mluvíme, pokud podle určitého pravidla srůstají dvě různé krystalické látky, např. se může jednat o srůsty dvou polymorfních modifikací.

SLIDE 39: VZNIK KRYSTALŮ – KRYSTALIZACE

Krystaly představují vysoce uspořádanou hmotu v pevném skupenství a obvykle vznikají krystalizací z látek kapalných (roztok, tavenina), plyných nebo pevných. Krystal vzniká při definované teplotě, tlaku a chemickém složení krystalizujícího roztoku.

Krystalizace probíhá v různých fyzikálních podmínkách a v různých chemických prostředích. Ke krystalizaci může docházet řadou procesů, z nichž nejčastější jsou:

- krystalizace (tuhnutí) taveniny
- krystalizace nasyceného roztoku
- desublimace par
- chemické srážení
- rekrytalizační pochody v pevné fázi

SLIDE 40: KRYSTALIZACE Z ROZTOKŮ

Mezi pevnou fází a roztokem vzniká **rovnovážný stav**, když se látka přestává rozpouštět – v takovém případě označíme roztok jako **nasycený**. Zvýšením teploty nasyceného roztoku se stává **nenasyceným**, protože rozpustnost pevné látky se zvyšuje s teplotou.

Budeme-li z nasyceného roztoku odpařovat vodu nebo snížíme-li jeho teplotu, dostaneme **přesycený** roztok. Z přesyceného roztoku může dojít ke krystalizaci a to přirozené nebo uměle vyvolané.

Krystalizaci můžeme vyvolat tzv. očkovaním, kdy vložíme těleso (nečistota, krystal) do roztoku. K samovolné krystalizaci dojde v případě, že vzniknou **krystalizační jádra – nuklea**.

Pokud má krystalizace z roztoku plynule probíhat musí být splněna některá z následujících podmínek:

- snižuje se teplota roztoku nebo taveniny
- zvyšuje se koncentrace krystalizujícího roztoku odpařováním rozpouštědla
- dosycuje se krystalizující roztok krystalizující látkou

Příkladem rozsáhlé krystalizace minerálů z roztoku je vznik ložisek evaporitů.

SLIDE 41: KRYSTALIZACE Z TAVENINY A V PEVNÉ FÁZI

V přírodě je asi nejčastějším případem krystalizace z taveniny. Tento proces je spjat se vznikem minerálů ve všech typech magmatických hornin. Při krystalizaci z tavenin je hlavní řídicí veličinou **teplota**, v menší míře se podílí i **tlak** a celkové **složení** taveniny.

Základem pro krystalizaci pevné fáze je vznik **krystalizačního jádra**, které se zvětšuje připojováním iontů jednotlivých prvků přítomných v magmatu. Proces krystalizace z magmatu probíhá zpravidla postupně a jednotlivé minerály vznikají v závislosti na fyzikálně chemických podmínkách prostředí.

Krystalizace v pevném stavu probíhá především v metastabilních systémech, jako jsou látky s neuspořádanou vnitřní stavbou (látky amorfní). V amorfních látkách najdeme pouze lokální uspořádání stavebních částic v rámci stavebních jednotek (např. tetraedry SiO_4 v opálu). Tyto uspořádané domény mohou posloužit jako **krystalizační zárodky**, které jsou základem pro postupnou rekrystalizaci v pevném stavu.

Za krystalizaci v pevném stavu můžeme považovat všechny fázové změny v horninách, které jsou spojeny s metamorfními pochody a všechny typy polymorfních přeměn.

SLIDE 42: RŮST KRYSTALŮ

Podmínkou pro následný růst krystalů je vznik zárodků, tzv. **krystalizačních jader**. Jakmile tato jádra přesáhnou kritickou velikost, postupuje jejich růst. Z okolního roztoku se stavební částice ukládají na povrch rostoucího krystalu.

Proces přikládání iontů během růstu se označuje jako **apozice**. V nejbližším okolí krystalu postupně ubývá stavebních částic a snižuje se tak jejich koncentrace a vytváří se **krystalizační dvorec**. Další růst krystalu je možný pouze díky difúzi mezi krystalizačním dvorcem a okolní přesycenou taveninou.

Při apozici iontů na krystal dochází při slučování k uvolnění určité energie. Její velikost závisí na pozici iontu na povrchu krystalu, tzn., je-li na krystalové ploše, krystalové hraně nebo rohu. Částice na krystalové ploše je vázána se čtyřmi částicemi v téže ploše a jednou částicí z plochy spodní. Její valenční nenasycenost je minimální a tím je i minimální pravděpodobnost apozice další částice. Částice na hranách jsou vázány čtyřmi vazbami a dvě zůstávají volné, takže jejich energetický potenciál je větší. Částice na rozích krystalu mají největší kapacitu volných valencí a pravděpodobnost apozice další částice na tomto místě je značná.

Kolmice spuštěné ze zárodečného bodu (většinou totožný se středem krystalu) na krystalové plochy udávají růstové směry těchto ploch. Rychlost postupu dané krystalové plochy při jejím růstu se označuje jako **růstová rychlost**.

Krystalové plochy se stejným tvarem a růstovou rychlostí označujeme jako fyzikálně a **krystalograficky stejnocenné**.

SLIDE 43: RYCHLOST A SMĚR RŮSTU KRYSTALŮ

Na rovnoměrně rostoucím krystalu jsou nejlépe vyvinuté ty plochy, které odpovídají strukturním rovinám s největší retikulární hustotou (s největším počtem uzlových bodů).

Z hlediska rychlosti růstu různocenných ploch můžeme říci, že na krystalu se prosadí plochy s nízkou růstovou rychlostí.

Rovnoměrně vyvinutý krystal je v přírodních podmínkách velmi vzácný. Vyžaduje to ideální krystalizační podmínky, které je možné dodržet zpravidla jen v laboratoři. V přírodě se setkáváme nejčastěji s tzv. **různoměrným vývinem krystalů**.

