

VŠEOBECNÁ MINERALOGIE

Část 1.

doc. RNDr. Jiří Zimák, CSc.

Katedra geologie PřF UP Olomouc, tř. Svobody 26, 77146 Olomouc,
tel. 585634533, e-mail: zimak@prfnw.upol.cz

(říjen 2005)

Obsah obou částí studijního textu:

Část 1.

Úvod

1. Mineralogie a její rozdělení
2. Strukturní a chemická krystalografie
 - 2.1. Struktura krystalu a prostorová mřížka
 - 2.2. Základní buňka
 - 2.3. Reálné krystalové struktury
 - 2.4. Zastupování atomů v krystalové struktuře
 - 2.5. Krystalochemické vzorce
 - 2.6. Polymorfie a polytypie
3. Morfologická krystalografie
 - 3.1. Prvky omezení krystalu
 - 3.2. Zákon o stálosti úhlu hran
 - 3.3. Souměrnost krystalů, krystalová oddělení

Část 2.

- 3.4. Krystalové osní kříže, Weissovy, Millerovy a Bravaisovy symboly, jednoduché krystalové tvary a spojky, krystalové osní elementy
- 3.5. Krystalové soustavy
- 3.6. Habitus a typus krystalu
- 3.7. Zákonité krystalové srůsty
4. Vznik a vývoj krystalu
 - 4.1. Nukleace
 - 4.2. Mechanismus růstu krystalu
 - 4.3. Defekty růstu krystalu

- 4.4. Zonální růst krystalu
 - 4.5. Sektorový růst krystalu
 - 4.6. Rychlost růstu krystalu
 - 4.7. Nerovnoměrný růst reálných krystalů, morfologie reálných krystalů a krystalických agregátů
 - 4.8. Rekrystalizace
 - 4.9. Rozpouštění krystalů
 - 4.10. Pseudomorfózy
 - 5. Fyzikální krystalografie
 - 5.1. Optické vlastnosti nerostů
 - 5.1.1. Odraz a lom světla, polarizační mikroskop
 - 5.1.2. Propustnost světla
 - 5.1.3. Barva a vryp
 - 5.1.4. Lesk
 - 5.2. Štěpnost a lom
 - 5.3. Tenacita (tuhost, kvalita soudržnosti)
 - 5.4. Tvrdost
 - 5.5. Hustota
 - 5.6. Magnetismus
 - 5.7. Piezoelektrina a pyroelektrina
 - 5.8. Tavitelnost
- Literatura doporučená pro další studium

Všeobecná mineralogie – část 1.

Úvod

Tento studijní text, rozdělený do dvou na sebe navazujících částí, obsahuje základy strukturní a chemické krystalografie, morfologické krystalografie a krystalografie fyzikální.

1. Mineralogie a její rozdělení

Mineralogie je věda o nerostech čili minerálech. Nerost (minerál) je anorganická homogenní přírodnina, jejíž složení lze vyjádřit chemickým vzorcem. Nerosty jsou skupenství pevného, vzácně kapalného. Vzhledem k tomu, že pod pojmem nerost rozumíme přírodninu, která vzniká nezávisle na činnosti člověka, nelze za nerosty považovat například uměle vyrobené drahé kameny. Za nerosty jsou někdy považovány i některé látky organického původu (např. fosilní pryskyřice označované jako jantar).

Minerály a horniny netvoří jen zemskou kůru a určitou část zemského pláště. Prokazatelně je jimi tvořen povrch Měsíce (a možná i celý Měsíc), povrch Marsu, Venuše a některých dalších planet sluneční soustavy. Je možné, že se nacházejí i ve vnitřním jádře Země (v tzv. jádérku), avšak vzhledem k tam panujícím termodynamickým podmínkám budou značně odlišné od minerálů a hornin zemské kůry.

Mineralogie se zpravidla dělí na mineralogii všeobecnou, genetickou, systematickou, topografickou, experimentální a aplikovanou. Všeobecná mineralogie se zabývá vnějším tvarem (morfologií) a vnitřní stavbou (strukturou) minerálů, jejich fyzikálními vlastnostmi -

nejvýznamnější součástí všeobecné mineralogie je krystalografie (nauka o krystalech). Genetická mineralogie sleduje procesy a podmínky vzniku (geneze) minerálů, zabývá se studiem vztahů mezi minerály v jejich přirozených společenstvech (asociacích) a též studuje procesy přeměny minerálů; genetická mineralogie je někdy považována za součást všeobecné mineralogie. Systematická mineralogie detailně popisuje jednotlivé minerály a řadí je do mineralogického systému. Topografická mineralogie se zabývá rozšířením nerostů na jednotlivých nalezištích. Experimentální mineralogie modeluje přírodní procesy vzniku nerostů v různých látkových prostředích za různých termodynamických podmínek. Aplikovaná mineralogie (někdy označovaná jako technická mineralogie) se zaměřuje na průmyslové využití nerostných surovin, jejich úpravu i vyhledávání.

V obecné rovině je za minerál pokládán prvek nebo chemická sloučenina, která je krystalická a která vznikla jako produkt geologických procesů. Krystalické látky jsou za určitých podmínek schopny tvořit krystaly.

Krystal je pevná látka (tj. látka v pevném skupenství), která je omezena přirozenými rovinnými plochami, které se označují jako krystalové plochy. Podle jedné ze starších definic je krystal geometrický mnohostěn se stěnami rovnými, hladkými a víceméně lesklými. Vnější tvar krystalu je odrazem pravidelného uspořádání jeho základních stavebních částic (iontů, atomů, molekul), které nemají možnost translačního ani rotačního pohybu a jejichž atomové oscilace se uskutečňují kolem rovnovážných poloh, což podmiňuje existenci krystalové struktury. Pravidelné uspořádání stavebních částic ve struktuře krystalu se projevuje anizotropií, čímž rozumíme závislost některých fyzikálních vlastností (např. tvrdosti, tepelné a elektrické vodivosti) na směru, v němž je zjišťujeme (např. při určování tvrdosti rýpáním do ploch krystalu lze zjistit, že v různých směrech je tvrdost různá). S ohledem na strukturu krystalu a na výše zmíněnou anizotropii lze krystal definovat jako homogenní (stejnorodé) anizotropní diskontinuum se zákonitou a periodicky se opakující vnitřní stavbou, přičemž termínem diskontinuum rozumíme souhrn hmotných částic (iontů, atomů, molekul), které jen diskontinuitně (tj. nespojitě, tedy „s mezerami“) vyplňují prostor zaujímaný krystalem.

Jako krystalická látka se tedy označuje libovolná pevná látka s vnitřní stavbou charakteristickou pro krystal, přičemž je lhostejno, zda jednotlivá pevná tělesa (individua) tvořící tuto látku jsou nebo nejsou omezena krystalovými plochami. Krystalická látka může být například tvořena dokonale vyvinutými krystaly nebo zcela nepravidelnými zrny neomezenými krystalovými plochami.

Až na několik výjimek patří minerály mezi krystalické látky, avšak poměrně vzácně se minerály nacházejí v podobě větších, krystalovými plochami dokonale omezených krystalů (některé minerály se v určitých typech hornin často vyskytují v podobě téměř dokonale vyvinutých krystalků, avšak jejich rozměry jsou obvykle mikroskopické).

Adjektivem „krystalovaný“ se často vyjadřuje skutečnost, že určitý minerál tvoří individua, která jsou zcela nebo alespoň z velké části omezena krystalovými plochami - jde například o krystalovaný křemen (tj. krystaly křemene) pokrývající stěny dutin v křemenné žíle, která je tvořena nepravidelnými zrny křemene.

Studiem krystalických látek se zabývá krystalografie. Krystalografie se zpravidla dělí na strukturní, chemickou, morfologickou a fyzikální krystalografii. Strukturní krystalografie se zabývá strukturou krystalických látek; chemická krystalografie studuje vztahy mezi strukturou krystalů a jejich chemickými vlastnostmi, zabývá se charakterem chemických vazeb v krystalických látkách apod. Ostrá hranice mezi strukturní a chemickou krystalografií neexistuje, a proto jsou obě disciplíny v těchto skriptech sloučeny do jedné kapitoly. Morfologická krystalografie se zabývá studiem vnějšího tvaru krystalů. Fyzikální krystalografie se zabývá fyzikálními vlastnostmi krystalických látek a studuje vztahy mezi

fyzikálními vlastnostmi a krystalovou strukturou - některé z nejzákladnějších poznatků fyzikální krystalografie jsou uvedeny v kapitole věnované fyzikálním vlastnostem nerostů.

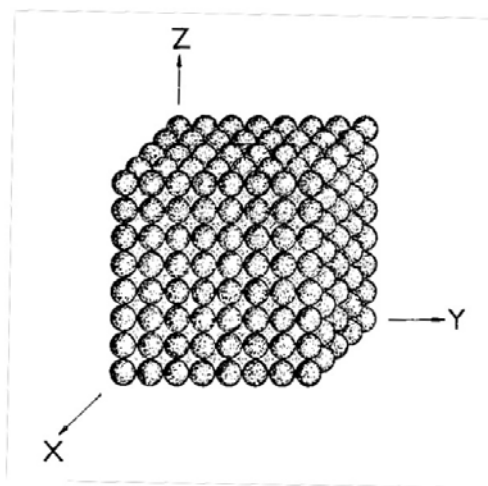
Mezi minerály se však vyskytují i pevné látky, které krystalické nejsou. Lze je rozdělit na dvě skupiny, a to na amorfni látky a metamiktní látky. Amorfni (beztvaré) minerály nemají strukturu charakteristickou pro krystalické látky a nikdy ji neměly. Typickým amorfním minerálem je opál. Metamiktní minerály původně krystalické byly. Ztrátu krystalinity neboli přechod od vysoce uspořádaného krystalického stavu do metamiktního stavu způsobují nárazy α -částic, vznikajících při přeměně radioaktivních prvků (U a Th), přítomných ve struktuře minerálu. K metamiktní přeměně dochází např. u uraninitu, někdy u zirkonu a allanitu.

Speciální případ představují přírodní látky, které jsou za běžných podmínek kapalné. Jediným kapalným minerálem je rtuť, jejíž bod tání je $-38,9\text{ }^{\circ}\text{C}$, a proto se na Zemi v krystalické podobě nevyskytuje. Naproti tomu voda (v kapalně formě) není pokládána za minerál, zatímco její pevná forma (led) ano.

2. Strukturní a chemická krystalografie

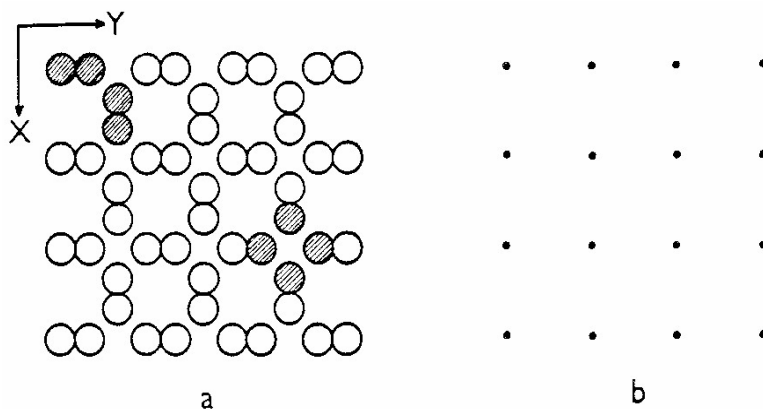
2.1. Struktura krystalu a prostorová mřížka

Na obr. 1 je znázorněn krystal α -polonia, jehož jednotlivé atomy jsou zde zobrazeny jako koule. Z tohoto obrázku je zřejmé, že vnitřní stavba krystalických látek je podmíněna určitým řádem - libovolně zvolený atom Po se pravidelně opakuje ve třech směrech X, Y a Z, přičemž dva sousední atomy jsou od sebe vzdáleny vždy o konstantní vzdálenost. V této struktuře představuje atom polonia základní motiv, jehož pravidelným opakováním se vytváří trojrozměrná krystalová struktura.



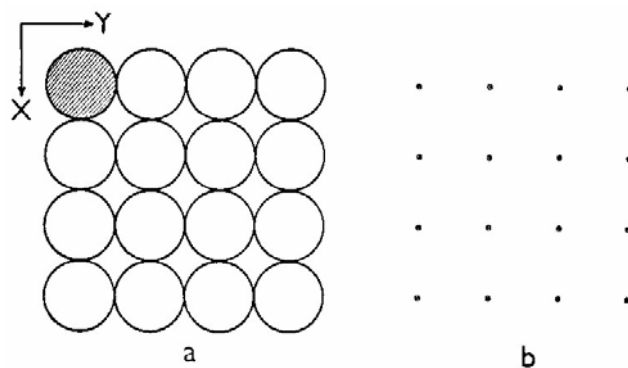
Obr. 1. Krystalová struktura α -polonia.

Výběr základního motivu není vždy tak jednoduchý a jednoznačný jako u krystalové struktury α -polonia, kde jej tvoří pouze jediný atom. Na obr. 2a je znázorněna složitější struktura (pro přehlednost pouze dvojrozměrně). Základní motiv této struktury musí obsahovat již čtyři atomy a lze jej zvolit několika způsoby, z nichž dva jsou znázorněny na obr. 2a - pravidelným opakováním prvního nebo druhého základního motivu ve směru os X a Y lze postupně vytvořit celou na obrázku znázorněnou strukturu.



Obr. 2. Krystalová struktura a dvojitý výběr základního motivu (a) a znázorněné krystalové struktury odpovídající mřížka (b).

Obecně lze v libovolné krystalové struktuře vymezit základní motiv, což je vlastně seskupení nejmenšího počtu stavebních jednotek (atomů, iontů), jehož periodickým opakováním ve třech směrech lze vytvořit krystalovou strukturu. Pokud chceme vyjádřit geometrii krystalové struktury jako celku, nahradíme základní motiv jediným bodem. Tento bod se bude v prostoru periodicky opakovat a vytvoří tak množinu bodů, která se označuje jako prostorová mřížka (nebo jen jako mřížka). Je zřejmé, že takto odvozená prostorová mřížka zachovává původní geometrické vztahy v krystalové struktuře. Každý bod prostorové mřížky (zvaný též mřížkový bod nebo uzel) má stejné a stejně orientované okolí a vůbec nezáleží na tom, jaká je pozice uzlu vůči základnímu motivu; je však nezbytné, aby tato pozice byla u všech uzlů stejná.



Obr. 3. Projekce struktury α -Po do roviny XY (a) a odpovídající mřížka (b).

Na obr. 3a je znázorněna projekce struktury α -Po do roviny XY. Odpovídající mřížka, v níž každý mřížkový bod reprezentuje jeden atom polonia, je znázorněna na obr. 3b. Geometrii o něco komplikovanější krystalové struktury na obr. 2a lze vyjádřit mřížkou, která je znázorněna na obr. 2b (volba strukturního motivu nemá žádný vliv na rozměry a orientaci mřížky). Porovnáním mřížek na obr. 2b a 3b, které vyjadřují geometrii dvou výrazně odlišných krystalových struktur, zjistíme, že obě mřížky jsou téměř totožné a že tedy jde o mřížky téhož typu. Z toho plyne obecně platný závěr: Každá krystalová struktura má pouze jednu vlastní mřížku, ale dvě navzájem odlišné krystalové struktury mohou mít mřížku stejného typu. Je nutno zdůraznit, že krystalová struktura představuje určitou fyzikální realitu (tedy existuje), zatímco mřížka je pouze pomůckou, která slouží k popisu krystalové struktury. Ne ve skutečnosti, ale pouze v abstrakci lze krystalovou strukturu rozložit na

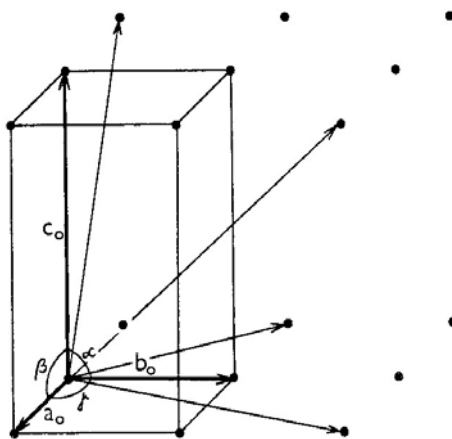
mřížku a základní motiv (nebo obráceně: z mřížky a základního motivu lze vytvořit krystalovou strukturu).

2.2. Základní buňka

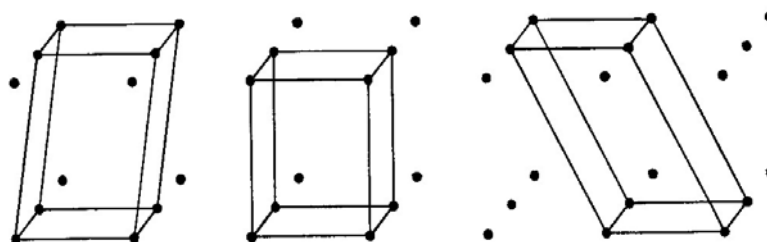
Protože v každé mřížce se uzly pravidelně opakují, lze celou mřížku odvodit z libovolného uzlu, který si zvolíme za počátek mřížky. Mřížku získáme postupným posunováním (translací) tohoto uzlu ve třech nekomplanárních směrech (tj. směrech neležících v jedné rovině) pomocí trojice translačních vektorů. Na obr. 4 je znázorněna mřížka, z jejíhož libovolného uzlu můžeme vést řadu translačních vektorů - sedm translačních vektorů je na obrázku znázorněno, avšak pro jednoznačný popis dané mřížky stačí vybrat pouze tři vektory neležící v jedné rovině. Tato trojice vektorů určuje rovnoběžnostěn, jenž se nazývá základní buňka. Délky hran základní buňky označujeme jako a_0 , b_0 a c_0 a jimi sevřené úhly jako α , β a γ (přičemž úhel α leží mezi hranami b_0 a c_0 , úhel β mezi a_0 a c_0 , úhel γ mezi a_0 a b_0). Hodnoty a_0 , b_0 , c_0 , α , β a γ se označují jako mřížkové parametry (případně parametry základní buňky). Obr. 5 naznačuje, že zobrazenou mřížku by snad bylo možno popsat pomocí různě zvolených buněk. Není tomu tak, neboť při výběru buňky vhodné pro konkrétní mřížku (a tedy krystalovou strukturu) je nutno respektovat tato pravidla:

1. Základní buňka musí mít stejnou souměrnost jako celá struktura.
2. Počet stejných hran a úhlů mezi hranami zvolené základní buňky musí být maximální.
3. Počet pravých úhlů v buňce musí být maximální.
4. Při splnění předcházejících požadavků musí být objem základní buňky co nejmenší.

Ze tří na obr. 5 znázorněných základních buněk tedy zvolíme tu prostřední.



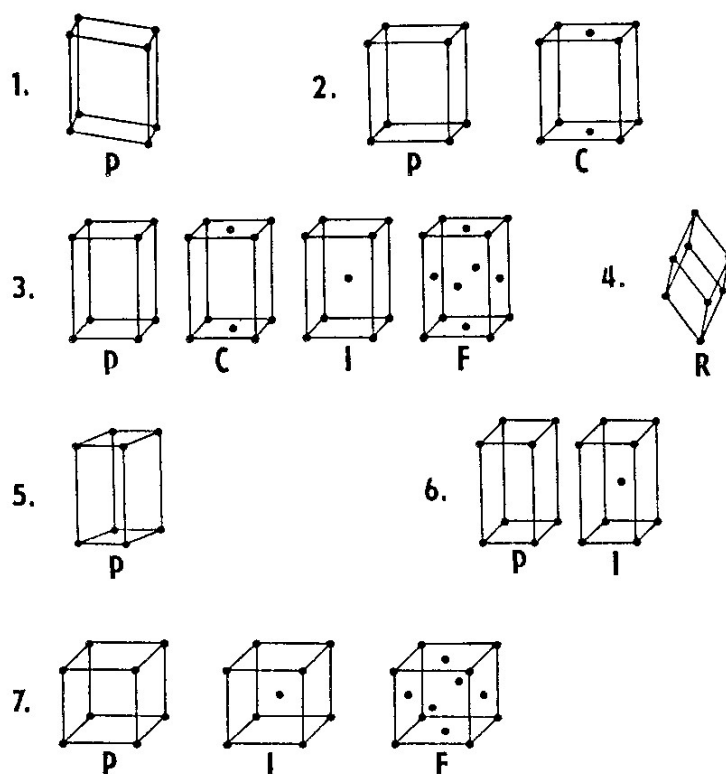
Obr. 4. Část množiny základních translačních vektorů v mřížce a základní buňka.



Obr. 5. Volba buněk v mřížce.

Základní buňky můžeme rozdělit podle toho, kolik uzlů připadá na jejich objem. Primitivní buňka obsahuje uzly pouze ve svých osmi vrcholech, přičemž každý z těchto uzlů jí patří jednou osminou, neboť každý z uzlů je společný pro 8 sousedních buněk. Na objem primitivní buňky tedy připadá pouze jeden uzel. Tělesně (prostorově) centrovaná buňka obsahuje kromě osmi uzlů ve vrcholech ještě jeden uzel v průsečíku tělesových úhlopříček - na objem tělesně centrované buňky tedy připadají 2 uzly. Bočně (bazálně) centrovaná buňka je kromě osmi uzlů ve vrcholech tvořena další dvojicí uzlů, které leží ve středu dvou protilehlých stěn, přičemž každý z uzlů této dvojice náleží současně dvěma buňkám - na objem bočně centrované buňky tedy připadají opět 2 uzly. Plošně centrovaná buňka je tvořena osmi uzly ve vrcholech a šesti uzly ve středech všech šesti stěn - na objem plošně centrované buňky tedy připadají 4 uzly.

Jak již bylo uvedeno, je znám obrovský počet odlišných krystalových struktur, z nichž každá má svou vlastní mřížku, v níž lze za použití výše uvedených pravidel zvolit vhodnou základní buňku. Existuje však pouze 14 typů strukturních mřížek, jimž odpovídá 14 základních buněk, označovaných jako Bravaisovy buňky. Na obr. 6 je znázorněno všech čtrnáct Bravaisových buněk, které jsou na základě své souměrnosti rozděleny do 7 krystalových soustav (primitivní buňky jsou označeny písmenem P nebo R, tělesně centrované písmenem I, bočně centrované písmenem C a plošně centrované písmenem F).



Obr. 6. Čtrnáct Bravaisových buněk: 1 - triklinická soustava, 2 - monoklinická soustava, 3 - romboická soustava, 4 - trigonální soustava, 5 - hexagonální soustava, 6 - tetragonální soustava, 7 - kubická soustava. Primitivní buňka trigonální soustavy je označena písmenem R (jde o tzv. romboedrickou buňku), primitivní buňky ostatních soustav jsou označeny písmenem P; prostorově centrované buňky jsou označeny písmenem I, bočně centrované buňky písmenem C a plošně centrované buňky písmenem F.

Symetrie prostorových mřížek a následně Bravaisových buněk má vliv na hodnoty některých mřížkových parametrů a na vztahy mezi nimi. U jednotlivých krystalových soustav je situace následující:

triklinická soustava: $a_0, b_0, c_0, \alpha, \beta$ a γ jsou libovolné;

monoklinická soustava - existují dvě možnosti:

a/ $\alpha = \gamma = 90^\circ$; β, a_0, b_0 a c_0 jsou libovolné;

b/ $\alpha = \beta = 90^\circ$; γ, a_0, b_0 a c_0 jsou libovolné;

rombická soustava: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; a_0, b_0 a c_0 jsou libovolné;

tetragonální soustava: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; $a_0 = b_0$; c_0 je libovolné;

trigonální soustava: $\alpha = \beta = \gamma < 90^\circ$; $a_0 = b_0 = c_0$;

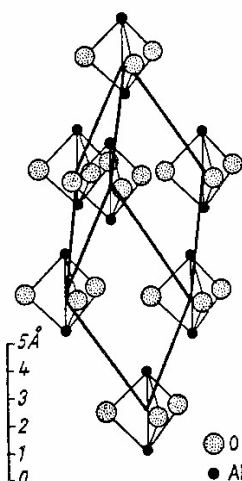
hexagonální soustava: $\alpha = \beta = 90^\circ$; $\gamma = 120^\circ$; $a_0 = b_0$; c_0 je libovolné;

kubická soustava: $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$; $a_0 = b_0 = c_0$.

K vyjádření geometrie triklinické mřížky je tedy nutno uvést hodnoty všech mřížkových parametrů - např. chalkantit (modrá skalice) má $a_0 = 6,12$, $b_0 = 10,69$, $c_0 = 5,96$ (tyto hodnoty jsou uvedeny v \AA , přičemž $1\text{\AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$), $\alpha = 97^\circ 35'$, $\beta = 107^\circ 10'$ a $\gamma = 77^\circ 33'$. Například u látek krystalujících v soustavě rombické stačí k vyjádření geometrie příslušného typu Bravaisovy mřížky uvést hodnoty a_0, b_0 a c_0 , neboť hodnoty úhlů α, β a γ jsou dány rombickou soustavou - např. rombická modifikace síry (označovaná jako α -S) má $a_0 = 10,44$, $b_0 = 12,84$ a $c_0 = 24,37$. V případě látek krystalujících v kubické soustavě se uvádí pouze hodnota a_0 - např. u diamantu $a_0 = 3,57$.

Délky hran základní buňky se dosud často uvádějí (a tak je tomu i v těchto skriptech) v \AA . V soustavě SI není používání této jednotky povoleno a délky hran základní buňky by měly být udávány v nanometrech, přičemž $1 \text{ nm} = 1 \times 10^{-9} \text{ m}$ ($1 \text{ nm} = 10 \text{\AA}$).

Mřížkové parametry se někdy nesprávně označují jako mřížkové konstanty. Tento termín je však nevhodný, neboť velikost mřížkových parametrů závisí na teplotě, tlaku, ale též na chemickém složení daného minerálu.

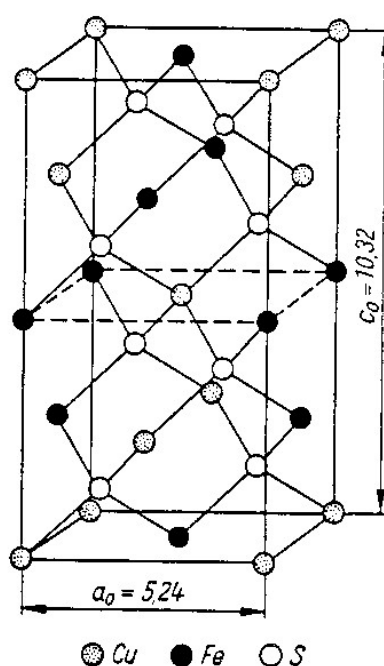


Obr. 7. Krystalová struktura korundu.

Obr. 7 schematicky znázorňuje krystalovou strukturu korundu. Je to minerál o vzorci Al_2O_3 , jenž krystaluje v soustavě trigonální. Základní motiv korundu je tvořen molekulou

Al_2O_3 . Rozložení těchto molekul v krystalové struktuře určuje geometrii základní buňky, která je na obrázku pro přehlednost znázorněna jen neúplně (je zobrazeno pouze 7 uzlů - tomu odpovídá 9 vyznačených hran buňky z celkového počtu 12); uzel základní buňky je umístěn vždy v centru znázorněných základních motivů.

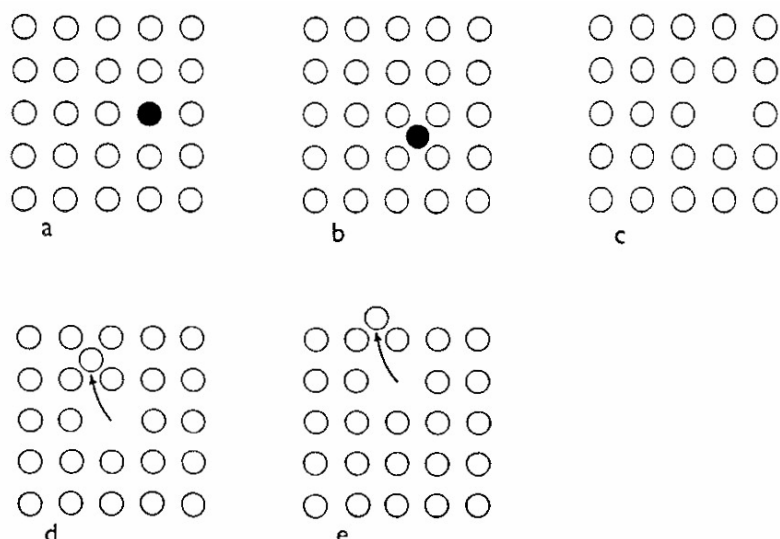
Na obr. 8 je schematicky znázorněna základní buňka chalkopyritu (CuFeS_2), jenž má primitivní tetragonální buňku. Na objem základní buňky tohoto minerálu připadají 4 atomy Cu, 4 atomy Fe a 8 atomů S, což znamená, že na objem základní buňky připadají 4 vzorcové jednotky ($4 \times \text{CuFeS}_2$). Počet vzorcových jednotek v základní buňce se zpravidla označuje písmenem Z (v případě chalkopyritu $Z = 4$).



Obr. 8. Základní buňka chalkopyritu.

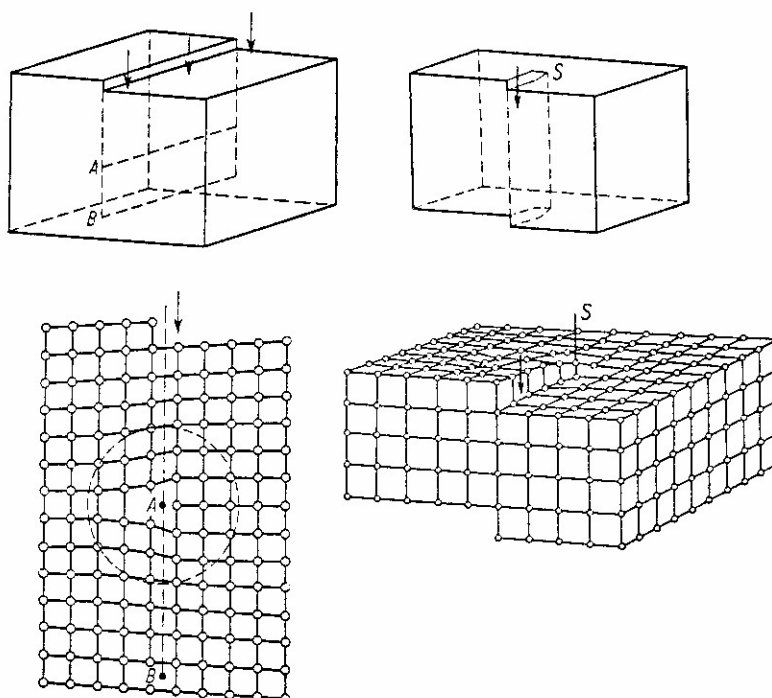
2.3. Reálné krystalové struktury

Až dosud jsme předpokládali, že krystalová struktura je ideálně periodická a že se její základní motiv periodicky opakuje. Takovou ideální strukturu by měl pouze ideální, nekonečně velký krystal, který ve skutečnosti neexistuje. Význam idealizované představy krystalu spočívá v tom, že pomocí ideální krystalové struktury jsme schopni definovat skutečnou (reálnou) krystalovou strukturu. Reálná krystalová struktura je ve srovnání se svým ideálním vzorem vždy určitým způsobem více či méně porušena. Za poruchu ideální krystalové struktury považujeme každou (i zcela nepatrnou) odchylku od dokonalé periodičnosti.



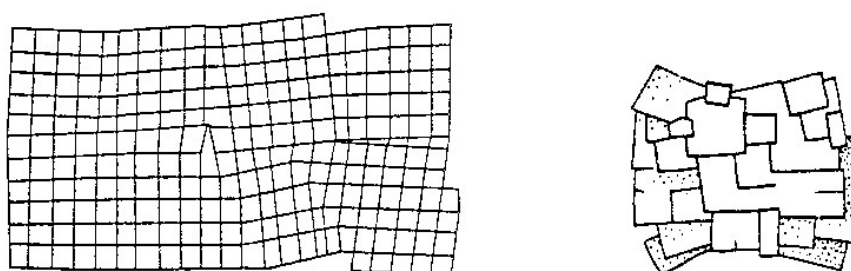
Obr. 9. Bodové poruchy ve struktuře reálných krystalů: nahrazení atomu neboli substituce (a), umístění atomu v intersticiální poloze (b), vakance (c), Frenkelova porucha (d) a Schottkyho porucha (e).

Existuje celá řada typů poruch ideální krystalové struktury, z nichž nejběžnější jsou bodové poruchy a dislokace. Bodové poruchy různých typů znázorňuje obr. 9. V reálné krystalové struktuře je vždy přítomen určitý počet cizích atomů (nevyjádřených v idealizovaném chemickém vzorci minerálu), které zaujímají polohy, jež jsou v ideální krystalové struktuře vyhrazené jiným atomům. Uvedené nahrazování či zastupování se označuje jako substituce a je schematicky znázorněno na obr. 9a - protože substituce je velmi rozšířeným jevem a z hlediska mineralogie je neobyčejně významná, bude detailně vyložena v kapitole 2.4. Ideální krystalová struktura je narušována i přítomností atomů v tzv. intersticiálních (vmezeřených) polohách (obr. 9b) nebo vakancemi, tj. neobsazenými atomovými polohami v krystalové struktuře (obr. 9c). Při tepelných vibracích struktury se atom může ze své rovnovážné polohy vychýlit natolik, že zůstane v intersticiální poloze a zanechá po sobě vakanci - tato kombinace intersticiálního atomu s vakancí se označuje jako Frenkelova porucha (obr. 9d); obdobně vzniká Schottkyho porucha (obr. 9e), při níž však atom vystoupí až na povrch krystalu. Je pochopitelné, že bodové poruchy se ve svém okolí projevují vždy určitou deformací krystalové struktury (v porovnání s ideální strukturou). Dislokace jsou v podstatě dvou základních typů: jde o hranové a šroubové dislokace, jejichž charakter a možný způsob vzniku je zřejmý z obr. 10.



Obr. 10. Hranová dislokace (vlevo) a šroubová dislokace (vpravo). V dolní polovině obrázku jsou znázorněny mřížky porušené těmito dislokacemi, v horní polovině jsou znázorněny mechanické modely vzniku dislokací.

Uvedené poruchy a jejich vzájemné kombinace často způsobují mozaikovou stavbu krystalických látek. V krystalové struktuře těchto látek lze rozlišit jednotlivé oblasti s víceméně ideální stavbou (tzv. bloky), které jsou vůči sobě navzájem poněkud posunuty (obr. 11a); někdy lze mozaikovou (blokovou) stavbu krystalů pozorovat i makroskopicky (na obr. 11b je znázorněn krystal pyritu s velmi výraznou blokovou stavbou). Defekty v krystalové struktuře se mohou projevit např. i přítomností tzv. „štěrbín“, tj. prázdných dutin zpravidla ploše čočkovitého tvaru, které sahají od povrchu krystalu do určité hloubky. Defekty v krystalové struktuře významně ovlivňují procesy růstu krystalů (kapitola 4.2).



Obr. 11. Schéma mozaikové stavby krystalu (vlevo); mozaiková stavba pyritu (vpravo).

2.4. Zastupování atomů v krystalové struktuře

Mnoho minerálů má proměnlivé chemické složení. Zastupování jednoho elementu druhým ve struktuře minerálu je spíše pravidlem než výjimkou. Krystalické látky, v jejichž struktuře k tomuto zastupování dochází, jsou někdy označovány jako pevné roztoky nebo také jako směsné krystaly. Tyto termíny odpovídají původním představám, podle nichž proměnlivé

chemické složení minerálů souvisí s tím, že v jediném homogenním krystalu jsou přítomny molekuly dvou nebo více sloučenin. Tak například olivín byl považován za směs dvou hlavních složek: forsteritu $Mg_2[SiO_4]$ a fayalitu $Fe_2[SiO_4]$. Složení v přírodě rozšířených olivínů lze vyjádřit vzorcem $(Mg,Fe)_2[SiO_4]$, přičemž z takto uvedeného vzorce není zřejmý poměr mezi Mg a Fe. Pokud přesně známe chemické složení určitého olivínu, lze k vyjádření jeho chemismu užít krystalochemického vzorce, z něhož již bude poměr mezi Mg a Fe zřejmý (způsob výpočtu krystalochemických vzorců je uveden v následující stati).

Termíny „pevný roztok“ a „směsný krystal“ se v mineralogii stále používají velmi často, i když v iontové struktuře minerálů nejsou jednotlivé molekuly přítomny. Strukturu těchto minerálů je možno považovat za teoreticky nekonečnou trojrozměrnou strukturu, v níž se jednotlivé ionty zastupují v ekvivalentních pozicích bez podstatných deformací této struktury.

Hlavním faktorem, jenž určuje, zda se dva prvky nebo ionty mohou ve struktuře minerálu vzájemně zastupovat, je jejich velikost. Zastupující se ionty nemusí mít stejnou valenci nebo náboj, neboť elektroneutrality může být dosaženo dalším souběžným zastupováním v téže struktuře (jde o tzv. sdruženou substituci). Například v řadě „pevných roztoků“ mezi albitem $Na[AlSi_3O_8]$ a anortitem $Ca[Al_2Si_2O_8]$, kde kationt Na^+ je nahrazován kationtem Ca^{2+} , je elektroneutrality dosahováno současným nahrazováním kationtu Si^{4+} kationtem Al^{3+} (jde tedy o sdruženou substituci dvojice Na^+Si^{4+} za dvojici $Ca^{2+}Al^{3+}$). Obdobně ve struktuře diopsidu $CaMg[Si_2O_6]$ dochází k zastupování kationtu Mg^{2+} kationtem Al^{3+} za současného nahrazování Si^{4+} kationtem Al^{3+} (jde o sdruženou substituci, kterou vyjadřuje schéma $Mg^{2+}Si^{4+} \rightleftharpoons 2Al^{3+}$).

Pokud se náboje iontů s obdobnými iontovými poloměry liší více než o jednotku, je jejich zastupování v krystalové struktuře zpravidla velmi omezené nebo k němu vůbec nedochází - např. kationt U^{4+} není schopen nahrazovat kationt Na^+ , přestože jejich iontové poloměry jsou prakticky stejné.

Na zastupování prvků ve struktuře má mj. značný vliv teplota vzniku minerálů - za jinak stejných podmínek se rozsah zastupování často zvětšuje s rostoucí teplotou. Jestliže při vysoké teplotě se mohou např. prvky „A“ a „B“ v pevném roztoku zastupovat ve zcela libovolných poměrech, může být při nižších teplotách možnost jejich vzájemného zastupování omezena a pevný roztok tvořený prvky „A“ a „B“ se tak může stát nestabilním. Takový pevný roztok se může zvolna rozpadnout na dvě samostatné fáze, z nichž jedna bude bohatší na prvek „A“ a druhá na prvek „B“. Tento proces se označuje jako rozpad pevného roztoku. K rozpadu pevných roztoků dochází např. u alkalických živců: Při vysokých teplotách se v alkalických živcích neomezeně zastupuje sodík a draslík, takže existuje souvislá řada homogenních fází od „čistého“ draselného živce o složení $K[AlSi_3O_8]$ přes alkalický živec o složení $(K,Na)[AlSi_3O_8]$ s nejrůznějšími poměry mezi K a Na až po „čistý“ sodný živec o složení $Na[AlSi_3O_8]$; při nižších teplotách jsou možnosti vzájemného zastupování K a Na ve struktuře alkalických živců jen velmi omezené, a tak při nízkých teplotách dochází k rozpadu sodno-draselného živce na sodný živec a draselný živec.

Zastupování různých prvků v ekvivalentních strukturních pozicích se často označuje jako izomorfní zastupování a „pevné roztoky“ jsou považovány za součást tzv. izomorfních řad (jde např. o izomorfní řadu forsterit-fayalit). Jako izomorfní příměsi se označují prvky, které nejsou uvedeny v idealizovaném chemickém vzorci minerálu, ale které se díky izomorfnímu zastupování v minerálu vyskytují v obvykle malém množství (jde např. o Fe, Mn, Cd a In ve sfaleritu nebo o Mn a Ni v olivínu). Termínem izomorfie byla původně označována schopnost sloučenin podobných chemických vlastností tvořit krystaly stejného tvaru (slovo „izomorfie“ lze přeložit jako „stejnotvarost“) a vytvářet směsné krystaly; nyní se termínu izomorfie užívá k vyjádření vzájemného zastupování prvků v krystalové struktuře.

2.5. Krystalochemické vzorce

Krystalochemické vzorce zpravidla vyjadřují počty atomů jednotlivých prvků v základní buňce nebo v jejím určitém dílu. Izomorfní zastupování určité skupiny prvků naznačujeme v krystalochemickém vzorci jejich uzavřením v kulaté závorce, přičemž u každého prvku uvádíme počet jeho atomů (obvykle na dvě desetinná místa); za touto závorkou je zpravidla uvedena suma atomů zastupujících se prvků. Na rozdíl od chemických vzorců, v nichž je naznačeno izomorfní zastupování bez uvedení počtu jednotlivých atomů, nejsou v krystalochemických vzorcích značky zastupujících se prvků odděleny čárkami. Výpočet krystalochemického vzorce se provádí z výsledku kvantitativní chemické analýzy, a to obvykle na základě určité znalosti struktury analyzovaného minerálu (např. v podrobnější učebnici systematické mineralogie zjistíme vzorec minerálu s naznačeným izomorfním zastupováním prvků).

Výsledky chemických analýz minerálů se vyjadřují v hmotnostních procentech. Při výpočtu krystalochemického vzorce je nutno tato hmotnostní procenta převést na atomové kvocienty, které udávají počet atomů jednotlivých prvků. Při výpočtu atomového kvocientu určitého prvku se obsah tohoto prvku zjištěný chemickou analýzou (v hmot. %) dělí jeho atomovou hmotností. Takto se postupuje při výpočtu krystalochemických vzorců minerálů z třídy elementů, sulfidů a halogenidů (tj. elementů a nekyslíkatých sloučenin). Postup výpočtu krystalochemického vzorce lze ukázat například na sfaleritu, tj. na minerálu, jehož idealizovaný vzorec je ZnS , avšak o němž víme, že obsahuje řadu izomorfních příměsí, z nichž nejběžnější jsou Fe, Mn, Cd, příp. In a další elementy - toto izomorfní zastupování zinku ve struktuře sfaleritu lze naznačit vzorcem $(Zn,Fe,Mn,Cd,In)S$. Výsledek kvantitativní chemické analýzy sfaleritu je uveden v 1. sloupci tab. 1. (Suma uvedených prvků je 100,67 %, což svědčí o určité chybě při analýze nebo o nepřesnosti použité analytické metody.) Atomové hmotnosti stanovených prvků zjistíme v literatuře ($Zn = 65,37$, $Fe = 55,85$, $Cd = 112,40$, $Mn = 54,94$ a $S = 32,06$) a provedeme výpočet atomových kvocientů (výsledky jsou uvedeny v 2. sloupci). Nyní již známe počty atomů jednotlivých elementů v krystalochemickém vzorci a bylo by již možno tento vzorec napsat. Vidíme však, že v idealizovaném vzorci je 1 atom síry, zatímco v našem krystalochemickém vzorci by bylo 1,0197 atomu S. Je proto vhodné provést přepočítání zjištěných atomových kvocientů tak, aby jejich vzájemný poměr zůstal zachován, avšak aby krystalochemický vzorec obsahoval přesně 1 atom síry. Tento přepočítání provedeme tak, že hodnotu 1 (tj. požadovaný počet atomů síry) dělíme hodnotou 1,0197 (tj. vypočteným atomovým kvocientem síry). Takto získáme určitý faktor, jehož hodnota je v našem případě 0,9807. Tímto faktorem násobíme atomové kvocienty uvedené ve sloupci 2 a získáme tak nové atomové kvocienty (sloupec 3), které po zaokrouhlení na tři desetinná místa (sloupec 4) můžeme použít k sestavení krystalochemického vzorce, v němž vyjádříme i sumu atomů, jež se vzájemně zastupují. Krystalochemický vzorec analyzovaného sfaleritu je $(Zn_{0,957}Fe_{0,061}Cd_{0,005}Mn_{0,002})_{1,025}S_{1,000}$. (Zaokrouhlení na tři desetinná místa bylo provedeno proto, že při obvyklém zaokrouhlení na dvě desetinná místa by nebylo možno v krystalochemickém vzorci vyjádřit obsah manganu.)

Tab. 1. Postup výpočtu krystalochemického vzorce sfaleritu

	1.	2.	3.	4.
Zn	63,77	0,9755	0,9567	0,957
Fe	3,49	0,0625	0,0613	0,061
Cd	0,60	0,0053	0,0052	0,005
Mn	0,12	0,0022	0,0022	0,002
S	32,69	1,0197	1,0000	1,000

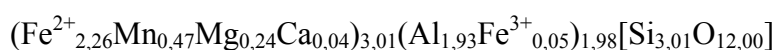
V případě kyslíkatých sloučenin jsou výsledky chemických analýz zpravidla vyjadřovány v hmotnostních procentech kysličníků jednotlivých prvků, přičemž však celkový obsah kyslíku zpravidla není stanovován. V těchto případech se při výpočtu krystalochemického vzorce nejdříve zjistí molekulární kvocienty jednotlivých kysličníků a z nich se potom odvodí atomové kvocienty jednotlivých prvků. Dále je postup v podstatě shodný s tím, jenž byl dokumentován na příkladu sfaleritu.

Tab. 2. Postup výpočtu krystalochemického vzorce granátu

	1.	2.	3.	4.	5.	6.
SiO ₂	36,73	0,6112	1,2224	0,6112	3,0074	3,01
Al ₂ O ₃	19,99	0,1961	0,5883	0,3922	1,9298	1,93
Fe ₂ O ₃	0,83	0,0052	0,0156	0,0104	0,0512	0,05
FeO	33,00	0,4593	0,4593	0,4593	2,2600	2,26
MnO	6,79	0,0957	0,0957	0,0957	0,4709	0,47
MgO	1,95	0,0484	0,0484	0,0484	0,2382	0,24
CaO	0,51	0,0091	0,0091	0,0091	0,0448	0,04
H ₂ O ⁻	0,03		$\Sigma=2,4388$			

$$f = 12 : 2,4388 = 4,9205$$

Postup výpočtu krystalochemického vzorce kyslíkaté sloučeniny lze ukázat na příkladu minerálu ze skupiny granátu. U granátů dochází k velmi rozsáhlému izomorfnímu zastupování. Obecně má vzorec granátu formu $R^{2+}_3R^{3+}_2[SiO_4]_3$, kde R^{2+} jsou dvojmocné kationty jako Fe^{2+} , Mn^{2+} , Mg^{2+} a Ca^{2+} a R^{3+} jsou trojmocné kationty jako Al^{3+} , Fe^{3+} nebo někdy i Cr^{3+} , příp. další. Výsledek chemické analýzy granátu je uveden v 1. sloupci tabulky 2 (jako H₂O⁻ se uvádí ztráta vlhkosti sušením vzorku při teplotě do 105 °C, a proto při výpočtu krystalochemického vzorce H₂O⁻ vynecháme; suma kysličníků je 99,83 %, což naznačuje, že analýza je zřejmě velmi dobrá). Z obsahu jednotlivých kysličníků vypočteme jejich molekulární kvocienty (molekulární kvocient je roven obsahu kysličníku v hmotnostních procentech dělenému molekulovou hmotností tohoto kysličníku). Z molekulárních kvocientů, jež jsou uvedeny ve sloupci 2, vypočteme kvocienty kyslíku (sloupec 3) a kvocienty kationtů (sloupec 4) - kvocient kyslíku určitého kysličníku je roven molekulárnímu kvocientu tohoto kysličníku násobenému počtem atomů kyslíku v jeho vzorci; kvocient kationtu v určitém kysličníku je analogicky roven molekulárnímu kvocientu tohoto kysličníku násobenému počtem atomů kationtu ve vzorci kysličníku (v případě dvojmocných kationtů je kvocient kyslíku roven kvocientu kationtu a ten je roven molekulárnímu kvocientu příslušného kysličníku). Součtem hodnot ve 3. sloupci tabulky zjistíme sumu kvocientů kyslíku - v našem případě je rovna 2,4388. Víme, že v obecném vzorci granátu je celkem 12 atomů kyslíku. Proto provedeme přepočtení kvocientů kyslíku a kationtů tak, aby suma kvocientů kyslíku byla rovna 12 (znamená to, že kvocienty kationtů násobíme faktorem, jenž má v našem případě hodnotu 12 : 2,4388, tedy 4,9205). Kvocienty kationtů násobené tímto faktorem jsou uvedeny ve sloupci 5. Údaje ve sloupci 5 zaokrouhlíme na dvě desetinná místa (sloupec 6) a můžeme sestavit krystalochemický vzorec, v němž v souladu s obecným vzorcem granátu sloučíme do jedné skupiny dvojmocné kationty a do druhé skupiny trojmocné kationty:



2.6. Polymorfie a polytypie

Polymorfie je schopnost určitého prvku nebo sloučeniny vytvářet odlišné krystalové struktury, označované jako modifikace. Polymorfie u prvků se někdy označuje termínem alotropie a odlišné krystalové struktury téhož prvku se pak nazývají alotropické modifikace.

Příkladem polymorfie u prvků (alotropie) jsou tři v přírodě se vyskytující modifikace síry, z nichž jedna je romboická a dvě jsou monoklinické, nebo dvě modifikace uhlíku - trigonální grafit a kubický diamant. (Dvojice grafit a diamant je známým dokladem toho, jak fyzikální vlastnosti téže látky závisejí na její krystalové struktuře.) V podobě dvou modifikací je v přírodě rozšířen CaCO_3 (jde o trigonální kalcit a romboický aragonit) a FeS_2 (kubický pyrit a romboický markazit). V podobě tří modifikací se vyskytuje např. Al_2SiO_5 (jde o triklinický kyanit, romboický andalusit a rovněž romboický sillimanit).

Jednotlivé modifikace téže látky vznikají za různých termodynamických podmínek a každá z modifikací je stabilní v určitém intervalu teplot a tlaků. Při změně termodynamických podmínek mimo oblast stability určité modifikace se tato modifikace stává nestabilní a může dojít k fázovému přechodu, při němž změnou krystalové struktury se nestabilní modifikace mění v jinou, za daných termodynamických podmínek stabilní modifikaci. Některé fázové přechody probíhají relativně rychle, jiné velmi pomalu (přeměna probíhá několik desítek nebo stovek milionů let) a k některým fázovým přeměnám nedojde vůbec.

Speciálním případem polymorfie je polytypie. Prvek nebo sloučenina je polytypická, vyskytuje-li se v několika modifikacích, které jsou budovány strukturně a chemicky víceméně shodnými vrstvami, přičemž jednotlivé modifikace se liší jen způsobem uložení vrstev. K polytypii dochází např. u muskovitu, sfaleritu, molybdenitu a pyrotinu.

3. Morfologická krystalografie

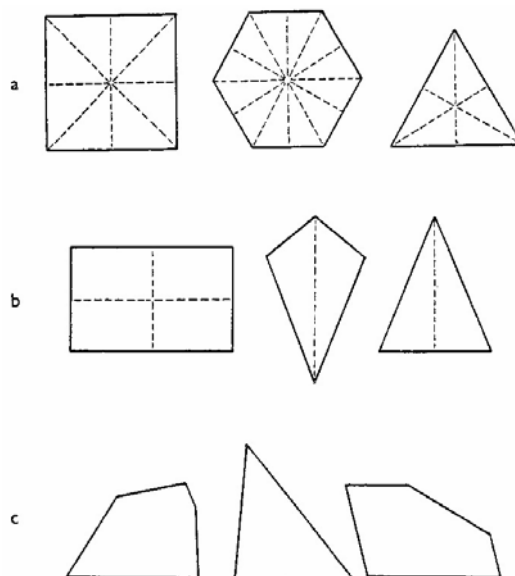
Morfologická krystalografie se zabývá morfologií krystalů, tj. jejich vnějším tvarem. Morfologie krystalu je sice odrazem jeho struktury, ale do značné míry bývá ovlivněna podmínkami, za nichž docházelo k jeho vzniku. Při studiu morfologické krystalografie je nutno začít nejprve s ideálně vyvinutými krystaly. Protože ideálně vyvinuté krystaly o rozměrech umožňujících studium jejich morfologie se v přírodě vyskytují jen zcela výjimečně, používají se při výuce morfologické krystalografie modely ideálních krystalů, které jsou zpravidla zhotoveny z lepenky, dřeva nebo umělé hmoty (např. plexiskla).

3.1. Prvky omezení krystalu

Ideální krystaly jsou omezeny ideálně rovnými plochami. Vzájemně sousedící plochy se stýkají v krystalových hranách. Krystalové plochy a hrany se sbíhají v krystalových rozích. Jako krystalový roh neoznačujeme jen vrchol krystalového mnohostěnu (tj. bod, v němž se sbíhají krystalové plochy a hrany), ale i přilehlou část povrchu krystalu, aby bylo zřejmé, jaké plochy se v rohu stýkají a jaký je způsob jejich styku; zcela obdobně pod pojmem krystalová hrana rozumíme nejen vlastní hranu (tj. úsečku), ale i k hraně přilehlou část krystalových ploch, které se v této hraně sbíhají. Vzájemný vztah mezi počtem ploch, hran a rohů vyjadřuje Eulerova rovnice: $P + R = H + 2$, kde P = počet ploch, R = počet rohů a H = počet hran na krystalu. (Eulerova rovnice obecně platí jen pro monokrystaly; neplatí pro některé srostlice krystalů.)

Na krystalech bývají přítomny plochy různého charakteru. Zpravidla se rozlišují pravidelné, souměrné a nesouměrné krystalové plochy. Jako pravidelné se označují plochy, které lze rozdělit více než dvěma řezy na zrcadelně shodné poloviny - k pravidelným plochám patří např. čtverec, pravidelný šestiúhelník a rovnostranný trojúhelník (obr. 12a). Souměrné

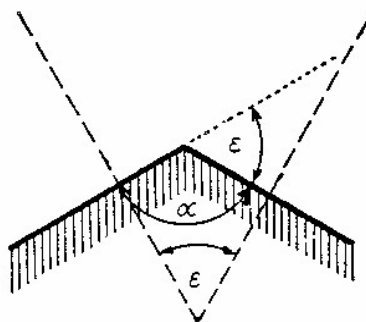
plochy lze rozdělit jedním nebo dvěma řezy na zrcadelně shodné poloviny - k souměrným plochám patří např. obdélník, deltoid a rovnoramenný trojúhelník (obr. 12b). Jako nesouměrné se označují plochy, které nejsou souměrné ani podle jediné k nim kolmé roviny souměrnosti (což však nevylučuje souměrnost jiného druhu!) - nesouměrnými plochami jsou např. obecné trojúhelníky, kosodélníky, různoběžníky, nepravidelné mnohoúhelníky apod. (obr. 12c).



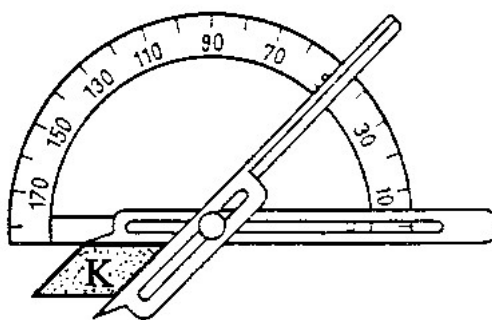
Obr. 12. Plochy pravidelné (a), souměrné (b) a nesouměrné (c).

3.2. Zákon o stálosti úhlů hran

V krystalových hranách se sbíhají dvě různoběžné krystalové plochy. V krystalografii nás však nezajímají pouze skutečné, na krystalu existující hrany, ale význam mají i pomyslné hrany, které lze získat v průřezu dvou nerovnoběžných krystalových ploch, jež se na krystalu neprotínají. Jako úhel hrany se označuje úhel, který svírají dvě plochy tvořící skutečnou nebo pomyslnou hranu. Rozeznáváme tzv. vnitřní úhel hrany (úhel α na obr. 13) a vnější úhel hrany (úhel ε na obr. 13), jenž je doplňkem vnitřního úhlu hrany do 180° . Vnější úhel hrany je roven úhlu, který svírají kolmice na obě plochy tvořící hranu. Vzhledem k tomu, že úhly hran jsou charakteristickým znakem jednotlivých krystalických látek, provádí se jejich měření na přístrojích označovaných jako goniometry. Zpravidla jde o optické přístroje, které umožňují zjišťování úhlů hran na drobných krystalcích, avšak existují i konstrukčně velmi jednoduché příložné goniometry, s jejichž pomocí však lze provádět měření úhlů hran jen na velkých krystalech (alespoň centimetrových). Při měření na příložném goniometru se jedna z ploch tvořících skutečnou nebo pomyslnou hranu přiloží k základně goniometru a druhá plocha se přiloží k otočnému rameni goniometru, které na stupnici ukáže hodnotu vnitřního úhlu hrany (obr. 14).

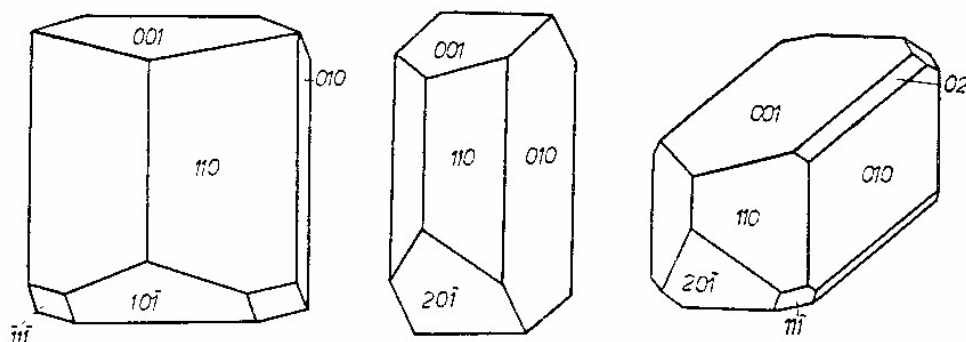


Obr. 13. Úhel hrany: α = vnitřní úhel hrany, ε = vnější úhel hrany.



Obr. 14. Příložný goniometr (K = krystal, měřený úhel hrany je 50°).

Jedním ze základních zákonů morfologické krystalografie je zákon o stálosti úhlů hran - podle svého objevitele se zákon o stálosti úhlů hran často nazývá Stensenův zákon, příp. Stenův zákon. Tento zákon praví, že úhly hran mezi stejnohlými krystalovými plochami na různých krystalech téhož minerálu jsou vždy shodné (za stejných termodynamických podmínek). Vzhledem k tomu, že chemismus některých minerálů je značně variabilní, je možno při velmi přesném měření zjistit, že existují nepatrné rozdíly mezi úhly stejnohlých krystalových ploch na krystalech téhož nerostu (krystaly s rozdílnými úhly hran se liší svým chemickým složením a tedy i svou krystalovou strukturou). Na obr. 15 jsou znázorněny tři různé krystaly ortoklasu, přičemž stejnohlelé plochy jsou na všech třech krystalech označeny shodnými číselnými symboly (jde o Millerovy symboly, jejichž význam bude vysvětlen později). Na všech třech krystalech jsou přítomny plochy označené jako 001, 110 a 010 a je zřejmé, že např. úhel hrany svíraný plochami 110 a 010 je na všech třech krystalech shodný; totéž platí o úhlu hrany mezi plochami 110 a 001 a též mezi plochami 001 a 010 (v případě pravého z vyobrazených krystalů je hrana mezi plochami 001 a 010 pomyslná).



Obr. 15. Tři různě vyvinuté krystaly ortoklasu.

3.3. Souměrnost krystalů, krystalová oddělení

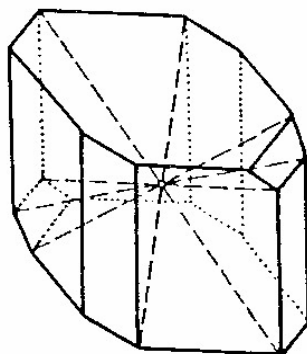
Souměrnost patří k nejdůležitějším vlastnostem krystalů. Na drtivé většině ideálně vyvinutých krystalů lze pozorovat pravidelné opakování určitého motivu (krystalových ploch, hran, rohů). Toto opakování je odrazem souměrného uspořádání základních stavebních jednotek v krystalové struktuře. Plochy, hrany nebo rohy, které se na krystalu pravidelně opakují, se označují jako stejnocenné. Operace, které umožňují převádět morfologické prvky krystalu do stejnocenných (identických či totožných) pozic, se nazývají operace souměrnosti. V morfologické krystalografii se rozlišují čtyři základní typy operací souměrnosti:

- a/ inverze,
- b/ zrcadlení,
- c/ rotace,
- d/ rotace spojená s inverzí.

Jako prvek souměrnosti se označuje geometrické místo bodů, podle něhož lze provést operaci souměrnosti. Výše uvedeným čtyřem typům operací souměrnosti odpovídají čtyři následující typy prvků souměrnosti:

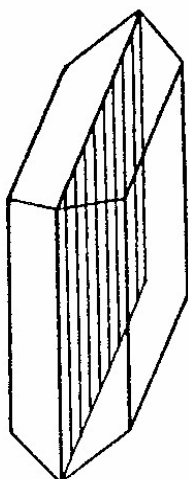
- a/ střed souměrnosti,
- b/ rovina souměrnosti,
- c/ osa souměrnosti,
- d/ inverzní osa souměrnosti.

Střed souměrnosti je bod v centru krystalu, podle něhož lze provést inverzní zobrazení jedné plochy do protiplochy, která je s výchozí plochou stejnocenná; z jedné plochy vzniká inverzní dvojice navzájem rovnoběžných ploch. Na obr. 16 je znázorněn krystal chalkantitu (modré skalice), který má ve svém centru střed souměrnosti - je zřejmé, že zobrazený krystal je omezen šesti dvojicemi navzájem rovnoběžných stejnocenných ploch. Krystal může mít maximálně jeden střed souměrnosti. V krystalografii se pro střed souměrnosti zpravidla používá symbol $\bar{1}$.



Obr. 16. Krystal chalkantitu se středem souměrnosti.

Rovina souměrnosti je plocha procházející středem krystalu, která ztotožňuje dvě stejnocenné plochy pomocí zrcadlení. Rovina souměrnosti dělí krystal na dvě zrcadelně stejné poloviny. Krystal sádrovce na obr. 17 je souměrný podle předozadně orientované roviny souměrnosti, která je zvýrazněna šrafováním. Krystal může mít maximálně 9 rovin souměrnosti. Symbolem roviny souměrnosti je písmeno *m*.



Obr. 17. Rovina souměrnosti (vyznačená šrafováním) probíhající krystalem sádrovce.

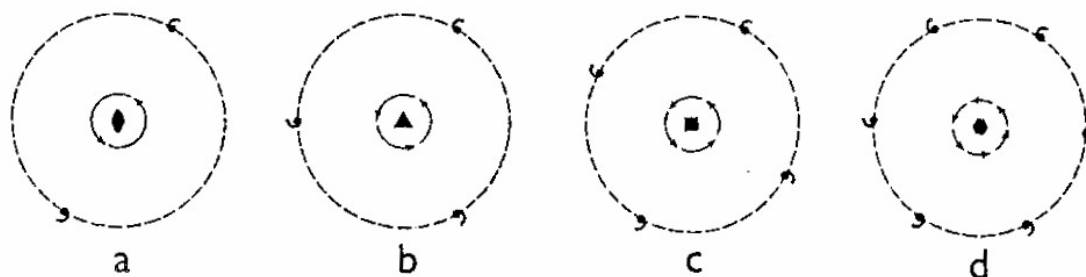
Osa souměrnosti (označovaná též jako gyra) prochází středem krystalu. Otáčením kolem této osy o 360° převádíme krystal několikrát do pozice stejnocenné s pozicí výchozí. Podle toho, kolikrát přejde krystal při otočení o 360° do stejnocenné pozice, rozlišujeme dvojčetnou, trojčetnou, čtyřčetnou a šestičetnou osu souměrnosti - četnost osy je dána poměrem $360^\circ/\alpha$, kde α je nejmenší úhel pootočení, při němž dojde k převedení krystalu z výchozí pozice do pozice stejnocenné s pozicí výchozí.

Dvojčetná osa souměrnosti se označuje též jako digyra (obr. 18a). Úhel otočení $\alpha = 180^\circ$. Krystal může mít maximálně 6 dvojčetných os souměrnosti. Symbolem této osy je číslice 2 (odpovídající její četnosti).

Trojčetná osa souměrnosti se označuje též jako trigyra (obr. 18b). Úhel otočení $\alpha = 120^\circ$. Krystal může mít maximálně 4 trojčetné osy souměrnosti. Symbolem této osy souměrnosti je číslice 3.

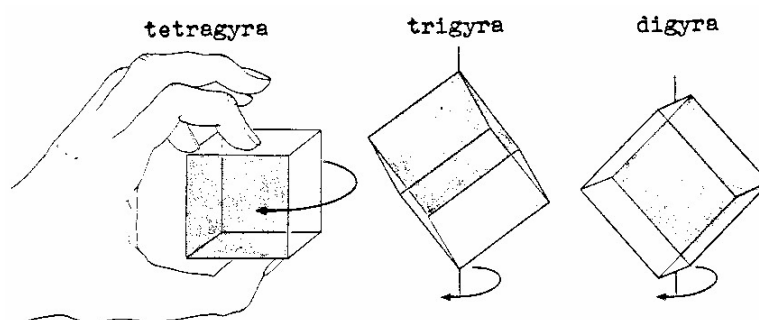
Čtyřčetná osa souměrnosti se označuje též jako tetragyra (obr. 18c). Úhel otočení $\alpha = 90^\circ$. Krystal může mít maximálně 3 čtyřčetné osy souměrnosti. Symbolem této osy je číslice 4.

Šestičetná osa souměrnosti se označuje též jako hexagyra (obr. 18d). Úhel otočení $\alpha = 60^\circ$. Krystal může mít maximálně 1 šestičetnou osu souměrnosti. Symbolem této osy je číslice 6.



Obr. 18. Schematická znázornění rotací, které převádějí daný motiv do stejnocenných pozic. (V centru kružnice jsou uvedeny grafické symboly jednotlivých gyr.)

Na krystalu mohou být současně přítomny gyry různých četností. Na obr. 19 je znázorněn krystal tvaru krychle. Uchopíme-li jej dvěma prsty za středy protilehlých ploch, můžeme jej otočením ve směru šipky o 90° převést do pozice stejnocenné s výchozí pozicí. Středů dvou protilehlých ploch tedy vystupuje tetragyra (krychle má celkem tři tetragyry). Otočením o 120° kolem osy vystupující protilehlými rohy převádíme krychli do pozice stejnocenné s pozicí výchozí. Protilehlými rohy krychle tedy prochází trigyra (krychle má 4 trigyry). Otočením o 180° kolem osy, která prochází středy dvou protilehlých hran, převádíme krychli do pozice stejnocenné s výchozí. Středů protilehlých hran tedy procházejí digyry (krychle má 6 digyr).



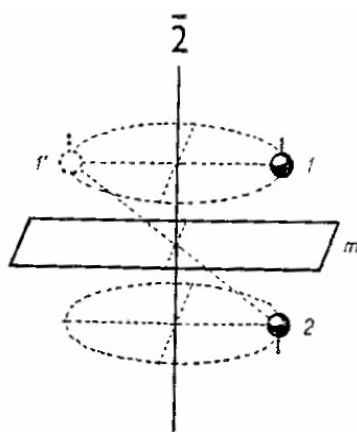
Obr. 19. Osy souměrnosti na krystalu tvaru krychle.

Existuje i jednočetná osa souměrnosti (monogyra). Otočením kolem monogyry o 360° se krystal převádí jedenkrát do pozice identické s pozicí výchozí. Každý krystal má bez ohledu na svou morfologii nekonečně mnoho monogyr, a proto v morfologické krystalografii nemá monogyra žádný praktický význam.

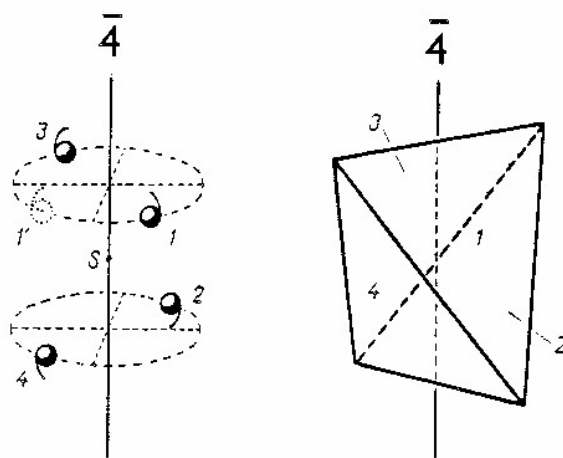
S osami jiných četností se nemůžeme v mineralogii setkat. Pětičetné a sedmičetné osy souměrnosti (tj. pentagyry a heptagyry) jsou známy z některých krystalů virů; s pětičetnou souměrností se někdy setkáváme v živé přírodě (např. květ jabloně nebo tělo hvězdice).

Inverzní osa souměrnosti označovaná též jako inverzní gyroida je složeným prvkem souměrnosti. Odpovídá složené operaci souměrnosti, při níž dochází současně k rotaci a inverzi. Podobně jako u gyr může být úhel otočení 360° (jednočetná inverzní osa

souměrnosti neboli inverzní monogyroida), 180° (dvojčetná inverzní osa souměrnosti neboli inverzní digyroida), 120° (trojčetná inverzní osa souměrnosti neboli inverzní trigyroida), 90° (čtyřčetná inverzní osa souměrnosti neboli inverzní tetragyroida) nebo 60° (šestičetná inverzní osa souměrnosti neboli inverzní hexagyroida). V závislosti na četnosti se gyroidy označují symboly $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ a $\bar{6}$. S výjimkou inverzní tetragyroidy lze všechny ostatní inverzní gyroidy nahradit jednoduchými prvky souměrnosti: inverzní monogyroida je totožná se středem souměrnosti, inverzní digyroida má zcela stejný účinek jako rovina souměrnosti k ní kolmá a jdoucí středem krystalu (obr. 20), inverzní trigyroidu lze nahradit kombinací středu souměrnosti a trigyry, inverzní hexagyroida je v podstatě trigyrou, k níž je kolmá středem krystalu procházející rovina souměrnosti. Inverzní tetragyroida je prvek souměrnosti, který nelze nahradit žádným jiným prvkem souměrnosti nebo kombinací prvků souměrnosti. Podle inverzní tetragyroidy jsou morfologické prvky krystalu převáděny do stejnocenných poloh otáčením o 90° kombinovaným s inverzí po každém pootočení o uvedený úhel. Schematicky je to znázorněno v levé části obr. 21, na němž je prvek z pozice označené číslem 1 otočením o 90° přemístěn do pomyslné pozice 1', avšak díky souběžné inverzi se dostává do pozice 2, z pozice 2 se dalším otočením o 90° a inverzí přemísťuje do pozice 3 a z ní dále do pozice 4. V pravé části obr. 21 je znázorněn čtyřstěn, jehož všechny plochy lze pomocí inverzní tetragyroidy odvodit popsáním postupem z plochy číslo 1.



Obr. 20. Schematické znázornění operace prováděné pomocí inverzní digyroidy. (Je zřejmé, že inverzní digyroida má stejný účinek jako rovina souměrnosti, která je k ní kolmá.)



Obr. 21. Znázornění operace prováděné pomocí inverzní tetragyroidy.

Výše uvedené prvky souměrnosti se na krystalech obvykle vyskytují v určitých kombinacích, které nejsou nahodilé, nýbrž zákonité. Existuje 31 různých kombinací prvků souměrnosti a také existují krystaly, které jsou asymetrické. Krystaly tedy můžeme rozdělit podle jejich souměrnosti do 32 skupin, které označujeme jako krystalová oddělení. Tato oddělení lze na základě podobnosti symetrie sloučit do sedmi krystalových soustav (počet krystalových oddělení v jednotlivých soustavách je 2 až 7). Každá krystalová soustava má tzv. holoedrické (plnoploché) oddělení, které má maximální možnou symetrii v dané soustavě. (Jednotlivá oddělení mají své vlastní názvy; názvy holoedrických oddělení budou uvedeny později společně s charakteristikou krystalových soustav.)

3.4. Krystalové osní kříže, Weissovy, Millerovy a Bravaisovy symboly, jednoduché krystalové tvary a spojky, krystalové osní elementy

K vyjádření polohy krystalových ploch v prostoru je nutno zvolit vhodný souřadný systém, který se označuje jako krystalový osní kříž. Krystalový osní kříž je tvořen zpravidla třemi krystalografickými osami, které se protínají v jediném bodě. Tyto krystalografické osy se označují písmeny x , y a z . Osa x je předozadní, osa y je pravolevá a osa z je vertikální (svislá). Střed osního kříže dělí každou osu na dvě poloosy, z nichž jedna je kladná a druhá záporná. Osa x je kladná vpředu a záporná vzadu, osa y je kladná vpravo a záporná vlevo a vertikální osa z je kladná nahoře a záporná dole. Úhly mezi osami osního kříže se označují jako α (úhel mezi osami y a z), β (úhel mezi x a z) a γ (úhel mezi x a y). Pro všech sedm krystalových soustav používáme šest typů krystalových osních křížů. Pět typů krystalových osních křížů je tvořeno třemi osami (obr. 22, 29, 36, 43 a 66) a každý z této pěti osních křížů je určen pro jednu krystalovou soustavu. Šestý krystalový osní kříž je tvořen čtyřmi osami (obr. 54) a používá se v soustavě hexagonální a trigonální. Čtvrtá krystalografická osa tohoto osního kříže probíhá předozadně, označuje se písmenem u a je středem osního kříže půlena na dvě poloosy, přičemž kladná poloosa směřuje od středu osního kříže dozadu a záporná poloosa směřuje dopředu.

Plochy krystalu vytínají na osách osního kříže určité úseky (parametry), které se v případě trojúsekových osních křížů obecně označují jako a , b a c , přičemž úsek a je vytínán na ose x , úsek b na ose y a úsek c na ose z . Velikostí úseku (parametru) rozumíme vzdálenost od středu osního kříže k průsečíku krystalografické osy s danou plochou (na kladných poloosách mají velikosti úseků kladnou hodnotu, na záporných poloosách zápornou). Absolutní délky úseků jsou samozřejmě na různě velkých krystalech téhož minerálu různé, avšak poměr úseků na osách osního kříže je již pro každou plochu charakteristický a nezávislý na velikosti krystalu. Trojúseková plocha (tj. plocha vytínající na všech třech osách osního kříže úseky konečné délky), která se často vyskytuje na různých krystalech téhož nerostu a která bývá vzhledem k ostatním trojúsekovým plochám na krystalu relativně velká, určuje základní poměr parametrů, jenž má obecnou formu $a : b : c$ (např. poloha nejběžnější trojúsekové plochy na krystalu rombické síry odpovídá základnímu poměru $a : b : c = 0,813 : 1 : 1,903$). Pomocí plochy se základním poměrem parametrů lze vyjádřit orientaci všech dalších ploch na krystalu. Úseky všech dalších ploch získáme násobením základních parametrů tzv. odvozovacími čísly. Tato odvozovací čísla mohou být pouze racionální - jde zpravidla o malá, kladná nebo záporná celá čísla (1, 2, 3, ..., -1, -2, -3, ...) nebo o ∞ . Obecně jsou odvozovací čísla označována jako m , n a p ; m udává počet parametrů a vyřazených určitou plochou na ose x , n udává počet parametrů b na ose y , p udává počet parametrů c na ose z . Pozici odvozené plochy lze potom vyjádřit poměrem $m.a : n.b : p.c$, přičemž u odvozené plochy nesmí být alespoň jedno z odvozovacích čísel rovno jedné. Uvedený poměr se nazývá Weissův symbol.

V současnosti se místo Weissova symbolu používá k vyjádření polohy plochy Millerův symbol. Millerův symbol je odvozen z Weissova symbolu. Je to v podstatě poměr reciprokových hodnot m , n a p , přičemž se tyto reciprokové hodnoty převádějí na nejmenšího společného jmenovatele, jenž se v Millerově symbolu neuvádí. Obecně má Millerův symbol formu hkl , přičemž číslo h je odvozeno z m , číslo k je odvozeno z n a číslo l je odvozeno z p Weissova symbolu. Pokud je odvozovací číslo ve Weissově symbolu rovno nekonečnu, objevuje se v Millerově symbolu na jemu odpovídajícím místě číslice nula. Zdánlivě složitý způsob převodu Weissova symbolu na Millerův symbol je zřejmý z následujících jedenácti příkladů:

	Weissův symbol plochy	reciproké hodnoty odvozovacích čísel	reciproké hodnoty odvozovacích čísel převedené na společného jmenovatele	Millerův symbol plochy
1.	$a : b : c$	1/1, 1/1, 1/1	1/1, 1/1, 1/1	(111)
2.	$2a : b : 3c$	1/2, 1/1, 1/3	3/6, 6/6, 2/6	(362)
3.	$a : b : 4c$	1/1, 1/1, 1/4	4/4, 4/4, 1/4	(441)
4.	$2a : 2b : c$	1/2, 1/2, 1/1	1/2, 1/2, 2/2	(112)
(Ve všech čtyřech uvedených příkladech jde o trojúsekové plochy utínající všechny tři osy osního kříže v jejich kladných částech. Symboly uvedených ploch čteme jako „jedna jedna jedna“, „tři šest dva“, „čtyři čtyři jedna“ a „jedna jedna dva“.)				
5.	$a : b : -2c$	1/1, 1/1, -1/2	2/2, 2/2, -1/2	(22 $\bar{1}$)
6.	$-3a : -2b : c$	-1/3, -1/2, 1/1	-2/6, -3/6, 6/6	($\bar{2}$ $\bar{3}$ 6)
(Způsob psaní záporného znaménka v Millerově symbolu je zřejmý z obou příkladů. Čteme: „dva dva mínus jedna“ a „mínus dva mínus tři šest“.)				
7.	$\infty a : b : c$	1/ ∞ , 1/1, 1/1	0, 1/1, 1/1	(011)
8.	$-2a : \infty b : 3c$	-1/2, 1/ ∞ , 1/3	-3/6, 0, 2/6	($\bar{3}$ 02)
(V těchto příkladech jde o dvojúsekové plochy, tj. plochy rovnoběžné s jednou ze tří os osního kříže - v 7. příkladě jde o plochu rovnoběžnou s x , v 8. příkladě o plochu rovnoběžnou s y . Čteme: „nula jedna jedna“ a „mínus tři nula dva“.)				
9.	$\infty a : \infty b : c$	1/ ∞ , 1/ ∞ , 1/1	0, 0, 1/1	(001)
10.	$\infty a : -b : \infty c$	1/ ∞ , -1/1, 1/ ∞	0, -1/1, 0	(0 $\bar{1}$ 0)
(V těchto příkladech jde o jednoúsekové plochy, tj. plochy, které v konečné délce utínají jen jednu ze tří os osního kříže. Čteme: „nula nula jedna“, „nula mínus jedna nula“.)				
11.	$4a : 3b : c$	1/4, 1/3, 1/1	3/12, 4/12, 12/12	(3.4.12)
(Pokud je některá z hodnot h , k a l Millerova symbolu dvojmístná, oddělujeme hodnoty h , k a l tečkami. Čteme: „tři čtyři dvanáct“.)				

Jak již bylo uvedeno, mají Millerovy symboly obecně formu hkl . Pokud Millerův symbol napíšeme v kulaté závorce, jde o symbol plochy - obecný Millerův symbol plochy tedy je (hkl) . V mineralogické literatuře se však Millerovy symboly ploch někdy uvádějí bez závorek; takřka vždy se takto zjednodušeně označují plochy na obrázcích krystalů. Millerův symbol ve složené závorce - tedy obecně $\{hkl\}$ - je symbolem tvaru, přičemž pod pojmem tvar v morfologické krystalografii rozumíme soubor stejnocenných ploch (všechny plochy náležející k jednomu tvaru lze pomocí prvků souměrnosti daného krystalu odvodit z jediné krystalové plochy). Krychle na obr. 19 má osy osního kříže totožné s tetragramy, což znamená, že plochy krychle jsou jednoúsekové a mají symboly (100), (010), (001), ($\bar{1}$ 00), (0 $\bar{1}$ 0) a (00 $\bar{1}$). Za symbol tvaru by bylo možno zvolit symbol libovolné z uvedených ploch,

ale nejvhodnější symbol krychle je $\{100\}$. Krystal omezený pouze plochami, které náležejí pouze k jednomu tvaru, se nazývá jednoduchý krystalový tvar. Krystal, na němž jsou přítomny plochy dvou nebo více tvarů, se označuje jako spojka (např. krystal modré skalice na obr. 16 je spojkou šesti tvarů, z nichž každý je představován dvojicí navzájem rovnoběžných ploch). Tvary se dělí na otevřené a uzavřené. Otevřený tvar nemůže sám omezit krystal, a proto se na krystalech může vyskytovat pouze ve spojkách - příkladem otevřeného tvaru je např. dvojice rovnoběžných ploch na krystalu modré skalice (obr. 16). Uzavřený tvar je schopen sám úplně omezit krystal - příkladem uzavřeného tvaru je krychle.

K vyjádření polohy ploch u látek krystalujících v soustavě hexagonální a trigonální se používá čtyřosý osní kříž. Symboly ploch nebo tvarů, které jsou obdobou Millerových symbolů, jsou v tomto případě čtyřmístné a nazývají se Bravaisovy symboly. Číslice v Bravaisových symbolech ploch se uvádějí v pořadí, které postupně odpovídá osám x , y , u a z . Obecně mají Bravaisovy symboly formu $hikl$, přičemž součet prvních tří hodnot se vždy musí rovnat nule (např. $10\bar{1}0$, $11\bar{2}0$, $10\bar{1}1$ nebo 0001).

Základní poměr úseků na osách osního kříže spolu s hodnotami meziosních úhlů tvoří tzv. krystalové osní elementy. Krystalové osní elementy jsou stálé pro všechny krystaly téhož nerostu - u minerálů s variabilním chemickým složením se mohou krystalové osní elementy nepatrně měnit v závislosti na krystalové struktuře nerostu (v závislosti na parametrech základní buňky).