The background of the cover is a detailed microscopic image of a mineral specimen. It features a complex, multi-colored pattern with shades of blue, yellow, orange, and black. The textures are irregular and crystalline, with some areas showing more uniform colors and others showing intricate, vein-like or cellular structures. The overall appearance is that of a natural mineral formation viewed under a microscope.

Univerzita Palackého v Olomouci
Pedagogická fakulta

ZÁKLADY MINERALOGIE A PETROGRAFIE

Jiří Zimák

KATALOGIZACE V KNIZE - NÁRODNÍ KNIHOVNA ČR

Zimák, Jiří, 1956-

Základy mineralogie a petrografie / Jiří Zimák. -- 1. vydání. -- Olomouc : Univerzita Palackého v Olomouci, [2025], ©2025. -- 1 online zdroj : ilustrace (převážně barevné)

Nad názvem: Univerzita Palackého v Olomouci, Pedagogická fakulta. -- Obsahuje bibliografie a bibliografické odkazy

ISBN 978-80-244-6688-0 (online ; pdf)

* 549 * 552 * (075.8) * (0.034.2:08)

– mineralogie

– petrologie

– učebnice vysokých škol

– elektronické knihy

552 - Petrologie [7]

37.016 - Učební osnovy. Vyučovací předměty. Učebnice [22]

Úvod

Mineralogie a petrografie jsou dva samostatné vědní obory, které svým zaměřením náleží do geologických věd, a ty jsou součástí věd o Zemi. Mineralogie je vědou o minerálech (nerostech), petrografie se zabývá horninami. Oba obory se navzájem prolínají, minerály jsou základními stavebními složkami naprosté většiny hornin.

Na základních školách je mineralogie a petrografie společně s dalšími geologickými obory začleněna do výuky přírodopisu. S poznatky z oborů mineralogie a petrografie se žáci základních škol setkávají nejen v přírodopisu, ale i ve vlastivědě, chemii, fyzice, zeměpisu a také dějepisu. Modely krystalů určené primárně pro výuku morfologické krystalografie mohou být vhodnou pomůckou při výuce geometrie.

Publikace „Základy mineralogie a petrografie“ je určena pro tři hlavní skupiny uživatelů. První cílovou skupinou jsou studenti přírodopisu na Pedagogické fakultě Univerzity Palackého v Olomouci, pro něž je tato publikace doplňkovým materiálem k výuce základů geologie. Druhou cílovou skupinou jsou stávající učitelé přírodopisu, jimž tato publikace může přispět k rozšíření znalostí z obou vědních oborů. Třetí cílovou skupinou jsou všichni zájemci o neživou přírodu, a to bez ohledu na věk, vzdělání a profesi.

Elektronická publikace „Základy mineralogie a petrografie“ je rozdělena do 12 souborů, jejichž názvy jednoznačně vyjadřují jejich náplň. Jde o tyto soubory:

01-úvod.pdf,

02-o-autorovi.pdf,

03-mineralogie-zaměření-a-rozdělení.pdf,

04-všeobecná-mineralogie.pdf,

05-systematická-mineralogie.pdf,

06-genetická-mineralogie.pdf,

07-petrografie-zaměření-a-rozdělení.pdf,

08-petrografie-magmatitů.pdf,

09-petrografie-sedimentů.pdf,

10-petrografie-metamorfitů.pdf,

11-zdroje-informací-o-minerálech-a-horninách.pdf,

12-metody-výzkumu-minerálů-a-hornin.pdf.

Připojen je nezbytný soubor 13-tiráž.pdf.

Text publikace „Základy mineralogie a petrografie“ je doplněn množstvím obrázků, a to zejména v souboru „05-systematická-mineralogie.pdf“, v němž čtenář určitě ocení krásné fotografie jednotlivých minerálů a jejich odrůd. Většinou jde o technicky dokonalé snímky nádherných a unikátních vzorků, které jsou ozdobou mineralogických sbírek nebo jsou nabízeny k prodeji. Tyto fotografie pocházejí převážně z databáze mindat.org (dostupné na www.mindat.org). V textu k fotografiím mineralogických vzorků je autor snímku téměř vždy uveden, v řadě případů je však z původní fotografie prezentován pouze výřez. Většina obrázků brusů zhotovených z drahých kamenů a také obrázků šperků, jejichž součástí jsou drahé kameny, byla získána z internetových stránek thajského obchodu se šperky „ThaiGems“ (oficiální název je Thai Gems Export Ltd), převážně v letech 2005–2010. V době vydání této publikace firma „ThaiGems“ své zboží nabízí na www.jtv.com a www.thaigems.com.

Poznámka

V textu se místy objevují rámečky s poznámkami. Někdy jde pouze o drobnou doplňující zajímavost, většinou je však jejich cílem přispět ke snazšímu pochopení probírané problematiky.

Výzkum minerálů a hornin přináší poznatky o geologickém vývoji Země a také například o procesech vedoucích ke vzniku akumulací nerostných surovin. Znalost těchto procesů má zásadní význam pro úspěšné vyhledávání mnoha různých typů ložisek nerostných surovin. Na základě mineralogicko-petrografického hodnocení těžených nerostných surovin jsou voleny vhodné postupy jejich úpravy a také způsoby jejich využití. Význam mineralogie a petrografie je proto pro celou naši civilizaci zcela zásadní.

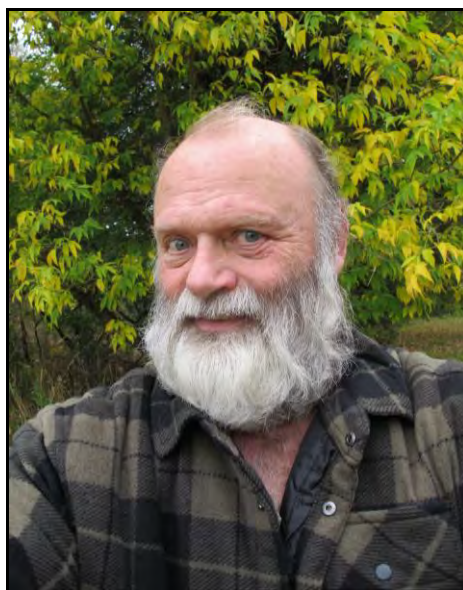
Za všechny připomínky a náměty ve finálním stádiu práce na učebním textu „Základy mineralogie a petrografie“ autor děkuje Mgr. Jitce Kopecké, Ph.D. (Pedagogická fakulta Univerzity Palackého, Olomouc) a RNDr. Pavle Hršelové, Ph.D. (Moravské zemské muzeum, Brno).

O autorovi

doc. RNDr. Jiří Zimák, CSc.

Narodil se 12. června 1956. V roce 1980 ukončil studium geologie na Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity (tehdy UJEP) v Brně. V letech 1980–1983 působil jako mineralog v Krajském vlastivědném muzeu v Olomouci. V letech 1983–2021 pracoval na Přírodovědecké fakultě UP v Olomouci, kde přednášel mineralogii, petrografii, ložiskovou geologii a geochemii. Od roku 2021 působí na Pedagogické fakultě UP a podílí se na vzdělávání budoucích učitelů přírodopisu. Jeho vědeckovýzkumná činnost je zaměřena na mineralogii a petrografii severovýchodní části Českého masivu a též na přirozenou radioaktivitu hornin zejména ve výše uvedené oblasti. Je autorem 362 publikací.

e-mail: jiri.zimak@upol.cz



Přehled publikací charakteru učebnic a učebních textů se vztahem k „Základům mineralogie a petrografie“:

- Zimák J. (1993): Mineralogie a petrografie. UP Olomouc. 201 s.
- Zimák J. (1994): Úvod do genetické mineralogie. Olomouc. 49 s.
- Zimák J. (1995): Vznik a vývoj krystalu. UP Olomouc. 35 s.
- Zimák J. (1996): Mineralogie a petrografie (2. doplněné vydání). UP Olomouc. 213 s.
- Zimák J. (1998): Mineralogie a petrografie (3. doplněné vydání). UP Olomouc. 226 s.
- Zimák J. (1998): Základy mineralogie a petrografie pro zeměpisce. UP Olomouc 1998. 91 s.
- Janoška M., Zapletal J., Zimák J., Bábek O. (1999): Geologie pro učitele. Vydavatelství UP Olomouc. 196 s.
- Zimák J. (2001): Ložiska nerostných surovin. Vydavatelství UP Olomouc. 98 s.
- Zimák J. (2008): Drahé kameny. Vydavatelství UP Olomouc.
- Zimák J. (2008): Systematická mineralogie. Vydavatelství UP Olomouc.
- Zimák J. (2009): Rock-Forming Minerals of Igneous and Metamorphic Rocks under the Microscope. Vydavatelství UP Olomouc.
- Zimák J. (2009): Základy gemologie. Vydavatelství UP Olomouc.
- Zimák J. (2013): Ložiska nerostných surovin. Univerzita Palackého v Olomouci. 144 s.
- Zimák J. (2019): Rock-Forming Minerals of Igneous and Metamorphic Rocks in Thin Section. (dostupné on-line na <http://rockformingminerals.urga.com>)
- Zimák J. (2021): Ložiska nerostných surovin (on-line učební text), 217 s. (dostupné on-line na <http://www.urga.cz/files/3.pdf>)
- Zimák J. (2021): Mineralogický systém – hlavní zástupci (on-line učební text), 485 s. (dostupné on-line na <http://www.urga.cz/files/1.pdf>)
- Zimák J. (2021): Základy gemologie (drahé kameny) (on-line učební text), 1069 s. (dostupné on-line na <http://www.urga.cz/files/2.pdf>)
- Zimák J. (2023): Gemologický systém – přehled drahých kamenů. Univerzita Palackého v Olomouci. 1793 s.
- Zimák J. (2024): Mineralogický systém – přehled hlavních zástupců. Univerzita Palackého v Olomouci. 1996 s.

Zaměření a rozdělení mineralogie

Mineralogie patří k nejstarším odvětvím přírodních věd. Když byly počátkem novověku sepsány nejstarší spisy o hornictví a hutnictví (jde především o spisy Jiřího Agricoly), byla v nich tehdejší mineralogie sumou znalostí horníků a hutníků o vlastnostech rud a v menší míře i nerudných nerostných surovin. V té době byly do mineralogie řazeny i poznatky, které by z hlediska současného členění geologických věd náležely do petrografie, ložiskové geologie a všeobecné geologie. S bouřlivým rozvojem průmyslu od počátku 18. století souvisí mj. prudký rozvoj přírodních věd a vyčleňování jednotlivých vědních disciplín. Mineralogie se jako samostatná vědní disciplína formuje zhruba v polovině 18. století. Současná mineralogie je vědou o minerálech (nerostech), zabývající se hlavně jejich vlastnostmi, strukturou, chemickým složením, vznikem a přeměnami a také průmyslovým využitím nerostných surovin.

1. Definice minerálu

Obecně je za minerál (nerost) považován chemický prvek nebo chemická sloučenina, která je za normálních podmínek krystalická a vznikla jako produkt geologických procesů. Tato formulace zahrnuje drtivou většinu látek, které jsou všeobecně za minerály pokládány. Existují však látky, jejichž povaha uvedeně definici nevyhovuje, avšak které k minerálům řadíme. Jako příklad lze uvést rtuť (ta je za „normálních“ termodynamických podmínek kapalná), metamiktní minerály (které původně krystalovou strukturu měly, ale během metamiktní přeměny o ni přišly – viz soubor „04-všeobecná-mineralogie.pdf“, str. 128), některé amorfní látky, které splňují určitá kritéria (například opál), a také minerály mimozemského původu. V posledním případě jde například o minerály meteoritů nebo o minerály v horninách Měsíce či Marsu. **Minerál je přírodnina, která vzniká nezávisle na činnosti člověka.** Za minerály proto nelze považovat například uměle vyrobené drahé kameny. Má-li syntetický drahý kámen krystalovou strukturu odpovídající určitému minerálu, pak lze pro něj použít název tohoto minerálu (nebo jeho odrůdy), avšak s vyjádřením skutečnosti, že je syntetický (například syntetický diamant, syntetický rubín, syntetický smaragd).

Poznámka

Doplnění definice minerálu větou „Minerál je přírodnina, která vzniká nezávisle na činnosti člověka.“ má zásadní význam. Zdůrazňuje, že za minerály nelze považovat žádné antropogenní materiály, tj. materiály vytvořené člověkem, mezi něž například patří již výše zmíněné syntetické drahé kameny. Za minerály však nelze považovat ani látky, které vznikly působením geologických procesů na antropogenní materiály – příkladem může být rez na železném plotě nebo tzv. měděnka na měděném plechu (i když rez i měděnka jsou výsledkem zvětrávacích procesů).

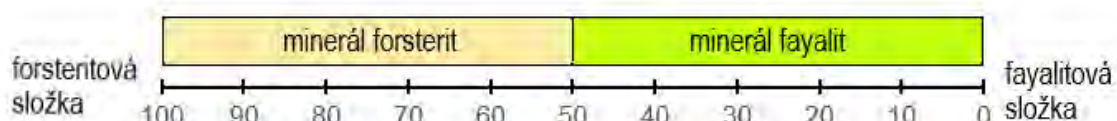
Jak je to s vodou? Voda v kapalném stavu minerálem není. Pokud je však v pevném skupenství (vodní led), pak je oficiálně řazena mezi minerály, avšak mnozí mineralogové k tomu mají výhrady. V této publikaci je uveden pouze výběr minerálů, do něhož led nebyl zařazen. Krystaly ledu (sněhové vločky) jsou zmíněny v souboru „04-všeobecná-mineralogie.pdf“ na straně 85.

2. Definice minerálního druhu

Definice minerálního druhu je poměrně komplikovaná. Proto lze v řadě konkrétních případů diskutovat o tom, zda jeden minerální druh ve stávajícím mineralogickém systému není vlastně souborem několika minerálních druhů. Jindy lze uvažovat o možnosti sloučení dvou nebo i více minerálních druhů do druhu jediného. Problémy tohoto typu řeší od roku 2006 IMA-CNMNC (The Commission on New Minerals, Nomenclature and Classification of the International Mineralogical Association – viz <https://mineralogy-ima.org>). Pro nás je nyní

důležité najít přijatelnou odpověď na otázku, čím se od sebe jednotlivé minerální druhy liší. Nabízí se tato formulace: Minerální druh se od ostatních minerálních druhů liší svým chemickým složením a krystalovou strukturou. Řečeno jinak, ta minerální individua, která mají shodné chemické složení a shodnou krystalovou strukturu, náleží k jednomu minerálnímu druhu. Nutno poznamenat, že pojmy „minerál“ a „minerální druh“ se v psaném textu nebo mluvě zpravidla nerozlišují, píše se nebo hovoří jednoduše o „minerálu“. Tedy informace, že se na lokalitě X vyskytuje 28 minerálů, znamená, že se na lokalitě X vyskytuje 28 minerálních druhů (nerostných druhů).

Protože v říši minerálů je zcela běžným jevem izomorfie (diadochie), mohou se minerální individua náležející k jednomu minerálu (minerálnímu druhu) lišit svým chemickým složením a do jisté míry i krystalovou strukturou! Izomorfie představuje v mineralogickém systému určitou komplikaci, a to například při existenci úplných izomorfních řad. V nejjednodušším případě jde o dvě složky, které se spolu mohou mísit ve zcela libovolných poměrech. Příkladem může být řada olivínu tvořená forsteritovou složkou $Mg_2[SiO_4]$ a fayalitovou složkou $Fe_2[SiO_4]$. Uvedené složky představují koncové (krajní) členy forsterit-fayalitové řady, běžně nazývané „řada olivínu“ nebo jen „olivín“. Při pojmenování členů této řady současná mineralogická nomenklatura vychází z „pravidla dominantní složky“ (označovaného častěji jako „50% pravidlo“ nebo „pravidlo 50“). Členy olivínové řady s převahou forsteritové složky (tedy s $Mg > Fe$, tj. více než 50 % forsteritové složky) se označují jako forsterit, členy olivínové řady s převahou fayalitové složky (tedy $Mg < Fe$, tj. více než 50 % fayalitové složky) se označují jako fayalit. Tedy forsterit a fayalit jsou dva různé minerály. Hranice mezi forsteritem a fayalitem je na 50 % forsteritové složky a 50 % fayalitové složky (obr. 1). Nutno zdůraznit, že jde o molekulární %.



Obr. 1. Úplná izomorfní řada forsterit-fayalit, v níž se neomezeně mísí forsteritová složka s fayalitovou složkou. Čísla pod vodorovnou osou udávají obsah forsteritové složky v molekulárních procentech (suma obou složek je vždy 100 mol. %).

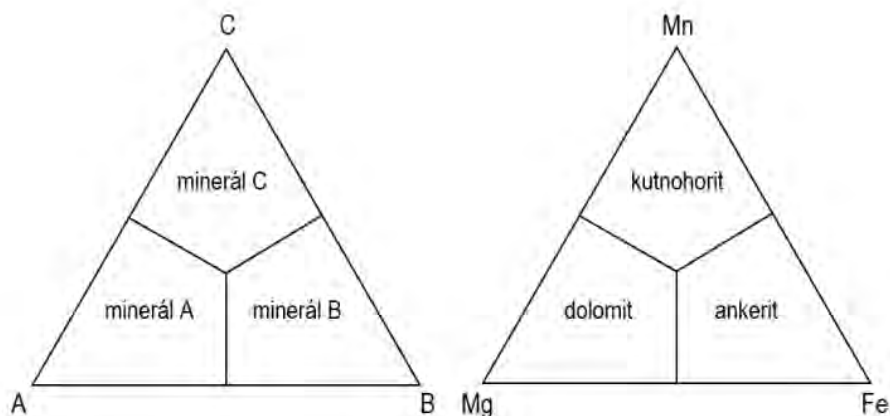
Poznámka

Členy olivínové řady jsou směsí dvou složek. Tuto směs mineralogové označují jednoduše jako olivín. Zcela obecně lze takovou směs dvou nebo více složek označit termínem „pevný roztok“ nebo „směsný krystal“. Lze tedy říci, že „olivín je pevným roztokem forsteritové a fayalitové složky“ nebo nepřesně (avšak zcela běžně) „olivín je pevným roztokem forsteritu a fayalitu“. Protože izomorfní zastupování prvků v minerálech je obvyklým jevem („může-li k němu dojít, tak k němu dojde“), jsou chemicky čisté krajní členy izomorfních řad zcela výjimečné, pokud vůbec existují. Například forsterit vždy obsahuje alespoň nepatrnou příměs železa, tj. forsterit tvořený jedine forsteritovou složkou se v přírodě nevyskytuje.

Olivín patří mezi minerály probírané v učivu základní školy. Je však olivín minerál ve smyslu minerálního druhu? Odpověď je jednoznačná: Není minerálním druhem. Olivín je souborné označení pro dva minerály, a to forsterit a fayalit. Zcela obdobně není minerálním druhem slída, živec, granát, amfibol nebo pyroxen. Ve všech pěti uvedených případech jde o názvy skupin minerálů, z nichž každá zahrnuje značný počet minerálních druhů.

Izomorfní řada se dvěma složkami, které se mohou zcela neomezeně mísit (tzv. úplná izomorfní řada), je tím nejjednodušším příkladem aplikace „pravidla 50“. Toto pravidlo je však využíváno i v případech, kdy se vzájemně mísí tři, čtyři nebo i více složek. Název

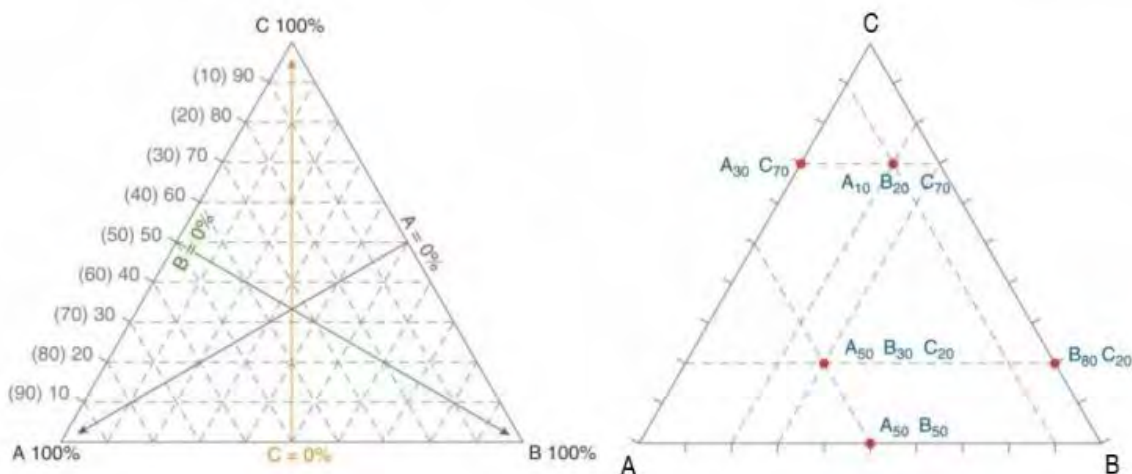
„pravidlo 50“ pak není příliš vhodný, běžně se však užívá, i když v literatuře se lze setkat i s obecně použitelným termínem „pravidlo 100/n“, kde n je počet složek, které se vzájemně mísí. Na obrázku 2 je znázorněn klasifikační trojúhelník (ternární klasifikační diagram) pro izomorfní řadu se třemi koncovými členy, kdy zastupující se ionty mají shodné mocenství – jako příklad je uvedena izomorfní řada dolomit – ankerit – kutnohorit, v níž dochází k zastupování Mg^{2+} , Fe^{2+} a Mn^{2+} ve zcela libovolných poměrech. Složení koncových členů je následující: dolomit $CaMg(CO_3)_2$, ankerit $CaFe(CO_3)_2$, kutnohorit $CaMn(CO_3)_2$.



Obr. 2. „Pravidlo 50“ v izomorfní řadě se třemi koncovými členy (izomorfie je izovalentní) v obecné podobě (vlevo) a aplikované na řadu dolomit – ankerit – kutnohorit (vpravo, ve vrcholech klasifikačního trojúhelníka jsou zastupující se kationty).

Poznámka

Trojúhelníkové diagramy jsou v mineralogii a také v petrografii velmi často užívány. Jsou ideální pro tříložkové systémy, obecně systémy A – B – C. Vždy musí platit, že $A + B + C = 100\%$. V trojúhelníkovém diagramu ABC je ve vrcholu A vždy 100 % složky A, s rostoucí vzdáleností od vrcholu A se množství složky A snižuje až na nulovou hodnotu (na straně BC). Schematicky to znázorňuje levý obrázek, síť vytvořená přerušovanými liniemi vyznačuje obsahy 10 %, 20 %, 30 %, 40 %, 50 %, 60 %, 70 %, 80 % a 90 % pro každou ze tří složek (jde o atomární procenta). Postup vynášení do trojúhelníkového diagramu je zřejmý z pěti příkladů na obrázku vpravo. Tento obrázek současně dokumentuje častý způsob uvádění složení „směsí“ dvou nebo více složek. Například zápis $A_{10}B_{20}C_{70}$ znamená, že „směs“ obsahuje 10 % složky A, 20 % složky B a 70 % složky C, zápis $A_{50}B_{50}$ vyjadřuje 50 % A + 50 % B (a tedy 0 % C). V zápisech uvedených v obrázku jsou údaje o obsahu jednotlivých složek odděleny mezerami, je to ale nestandardní forma, zpravidla je používán zápis bez mezer, tak jako například v tomto textu.



Zdroj obrázků: Klein a Philpotts (2017) – upraveno.

V systémech s vysokým počtem koncových členů není aplikace „pravidla 50 %“ možná (například ve skupině amfibolů nebo slíd).

Z výše uvedeného textu je zřejmé, že chemické složení konkrétního nerostného druhu nemusí být konstantní, hlavně vlivem izomorfního zastupování prvků. Ani krystal konkrétního minerálu nemusí mít v jednotlivých úsecích (zónách) identické složení. V učebnici mineralogie lze někdy najít definici minerálu, která začíná slovy: „Minerál je homogenní anorganická přírodní látka, jejíž složení lze vyjádřit chemickým vzorcem...“. Již bylo zmíněno, že některé minerály nejsou homogenní. Lze složení všech minerálů vyjádřit chemickým vzorcem? Odpověď je negativní, neboť: i) mezi minerály je řazen jantar, jenž je fosilní pryskyřičí, a ta je směsí několika organických látek (složení takové směsi nelze vyjádřit chemickým vzorcem), ii) významnou součástí mineralogického systému je třída prvků (například síra, zlato, stříbro a dvě strukturně rozdílné formy uhlíku – grafit a diamant), jejichž chemické složení se nevyjadřuje vzorcem, ale chemickou značkou. S chemickými vzorci se čtenáři tohoto textu setkali již na základní škole, a možná se jim vybaví i vzorce některých minerálů – například SiO_2 = křemen, ZnS = sfalerit, CaCO_3 = kalcit, NaCl = halit, FeS_2 = pyrit, $\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ = modrá skalice, mineralogy označovaná jako chalkantit.

Každý minerál (a neuvážujme nyní o výjimkách) má definované chemické složení, které lze v případě sloučenin zapsat chemickým vzorcem, který vyjadřuje stechiometrický poměr chemických prvků ve struktuře minerálu. Například ze vzorce křemene SiO_2 je zřejmé, že křemík a kyslík jsou v jeho struktuře přítomny v poměru 1 : 2, tedy na jeden atom křemíku připadají dva atomy kyslíku. Křemen neobsahuje žádné příměsi (řečeno přesně, množství případných příměsí ve struktuře křemene je zcela minimální), a proto lze křemen považovat za čistou látku, jejíž složení vyjadřuje vzorec SiO_2 .

Sfalerit, jehož chemické složení je v učebnicích mineralogie udáváno jako ZnS , čistou látkou zpravidla není, protože kromě zinku a síry obsahuje řadu příměsí, konkrétně prvků zastupujících zinek. Zinek je ve struktuře sfaleritu často nahrazován železem, manganem, kadmíem, indiem, případně i jinými kovy. Vyhodnocením dostatečně velkého souboru údajů o chemickém složení sfaleritu pocházejícího z různých lokalit a také různých typů mineralizace lze zjistit, že převažující příměsí je železo. To je ve sfaleritu obvykle přítomno v obsazích řádově v jednotkách hmotnostních procent. Obsahy ostatních příměsí jsou zpravidla výrazně nižší než obsahy železa. Proto je vzorec ZnS idealizovaným vzorcem sfaleritu, k němuž lze například v učebnici nebo encyklopedii připojit komentář, že sfalerit ve formě příměsí obsahuje hlavně Fe, méně Mn, Cd a In. Na příkladu sfaleritu lze ukázat, že složení minerálu lze vyjádřit třemi typy vzorců:

- a) idealizovaný vzorec sfaleritu: ZnS
- b) idealizovaný vzorec sfaleritu s vyjádřením izomorfie: $(\text{Zn,Fe,Mn,Cd,In})\text{S}$
(v tomto vzorci jsou značky zastupujících se prvků uvedeny v závorce, značky v závorce musí být odděleny čárkami, mezera za čárkou se nedělá!)
- c) krystalochemický (empirický) vzorec sfaleritu: například $(\text{Zn}_{0,86}\text{Fe}_{0,12}\text{Mn}_{0,02})_{1,00}\text{S}_{1,00}$
(tento vzorec je vypočten z výsledků chemické analýzy konkrétního sfaleritu, čísla v dolním indexu udávají počty atomů jednotlivých prvků, vzájemně se zastupující prvky jsou uzavřeny v závorce, za níž musí být uvedena suma zastupujících se prvků – způsob výpočtu vzorce je uveden v souboru „04-všeobecná-mineralogie.pdf“ na stranách 52 až 55.

Výše byla zmíněna izomorfní řada olivínu tvořená forsteritovou složkou $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$ a fayalitovou složkou $\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$. Při respektování „pravidla 50“ má tato řada dva minerály: forsterit a fayalit. Složení forsteritu je $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$ s příměsí Fe, přičemž $\text{Mg} > \text{Fe}$. Vzorec forsteritu proto můžeme zapsat jako $(\text{Mg,Fe})_2[\text{SiO}_4]$. Složení fayalitu je $\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$ s příměsí Mg, přičemž $\text{Fe} > \text{Mg}$. Vzorec fayalitu můžeme zapsat jako $(\text{Fe,Mg})_2[\text{SiO}_4]$. Studenti se často ptají, jaký je rozdíl mezi „forsteritovou složkou“ a „forsteritem“. Z výše uvedeného textu by to

mělo být jasné, ale raději ještě jednou, trochu jinak: Forsteritová složka je koncovým (krajním) členem izomorfní řady. Složení forsteritové složky vyjadřuje vzorec $Mg_2[SiO_4]$, forsteritová složka neobsahuje žádné železo. Minerál s názvem forsterit je členem forsterit-fayalitové řady s převahou forsteritové složky nad fayalitovou.

V případě izomorfních řad je chemické složení koncových členů přesně definováno a vyjádřeno idealizovaným vzorcem. Chemické složení minerálu (minerálního druhu), který je vymezen v izomorfní řadě, vykazuje variabilitu, jejíž rozsah je určen klasifikací používanou pro danou izomorfní řadu.

Poznámka

Mnohý čtenář již klade otázku „A kolik těch minerálů vlastně je?“, „Kolik nerostných druhů je v mineralogickém systému?“. Nabízí se tato odpověď: V současnosti je známo kolem 6000 minerálů (tj. „minerálních druhů“ či „nerostných druhů“), přičemž slovo „kolem“ je v tomto tvrzení uvedeno ze dvou příčin: i) počet minerálních druhů kolísá v závislosti na tom, co pod pojmem „minerální druh“ rozumíme; ii) počet minerálních druhů se neustále zvětšuje o nově popsané minerály, jichž je ročně kolem 40 až 50 (a občas je i některý minerál diskreditován a ze systému vyřazen). Přesný počet minerálů k aktuálnímu datu lze zjistit na <https://www.mindat.org>. K 11. červenci 2025 je v mineralogickém systému 6151 minerálů, které jsou evidovány a schváleny IMA (= International Mineralogical Association).

3. Název minerálu

Každý minerál (= minerální druh) má svůj vlastní jednoslovný mezinárodně platný triviální název. Běžné minerály mají svůj vlastní název i v národních jazycích. V české mineralogické terminologii jde o názvy jako například křemen, mastek, sádrovec, ale i o názvy skupin některých horninotvorných minerálů jako například živce a slídy. Většina názvů minerálů v české mineralogické terminologii vychází z mezinárodně platných triviálních názvů a jsou nejčastěji zakončeny -it (například grafit, kalcit, halit, apatit, dolomit). Ve starších česky psaných mineralogických publikacích lze najít dnes již neužívané ryze české jednoslovné nebo dvouslovné názvy minerálů, které patří do historie naší mineralogie a jejichž uvádění na přednáškách někdy vyvolává úsměv na tvářích posluchačů – například kazivec (=fluorit), těživec (=baryt), sůl kamenná (=halit), leštěnc olověný (=galenit), blejno zinkové (=sfalerit), ocelek (=siderit) nebo krevel (=hematit). Mezinárodně platné názvy minerálů mají různý původ. Většinu názvů lze zařadit do některé z následujících sedmi skupin:

i) staré názvy minerálů přejaté z jiných jazyků, například sanskrtských a semitských jazyků nebo ze staré řečtiny, přičemž původní význam názvu je v mnoha případech nejasný – například korund, zirkon, malachit a turmalín (často existuje několik, značně rozdílných vysvětlení původu a významu názvu),

ii) názvy odvozené z fyzikálních vlastností – například albit (z latinského *albus* = bílý), hematit (z řeckého *haima* = krev, protože má červenou barvu), ortoklas (z řeckých slov *ortos* = pravoúhlý a *klasis* = štípatelný, tj. podle úhlu, který svírají roviny štěpnosti), spodumen (z řeckého *spódios* = popelavý, podle zbarvení), grossular (podle latinského názvu angreštu *Ribes grossularia*, grossular má někdy barvu jeho plodů), baryt (z řeckého *barys* = těžký, protože má vysokou specifickou hmotnost),

iii) názvy založené na morfologii krystalů nebo jejich agregátů – například tetraedrit (krystaly mají tvar tetraedru, tj. čtyřstěnu), staurolit (z řeckých slov *stauros* = kříž a *lithos* = kámen, neboť dvojčata staurolitu mohou mít podobu kříže), aktinolit (z řeckých slov *aktis* = paprsek a *lithos* = kámen, protože agregáty mají často paprscitou stavbu),

- iv) názvy inspirované chemickým složením minerálu – například magnezit (obsahuje Mg), fluorit (obsahuje F),
- v) názvy odvozené od způsobu použití minerálu – například grafit (z řeckého *graphein* = psát),
- vi) názvy odvozené od geografických názvů, zpravidla podle místa, odkud byl tento minerál poprvé popsán – například elbait (podle italského ostrova Elba), vesuvian (podle italské sopky Vesuv), kutnohorit (podle Kutné Hory),
- vii) názvy odvozené od jmen významných osob (osobností), nejčastěji mineralogů, petrografů, chemiků a významných přírodovědců z jiných oborů, ale též státníků, spisovatelů, kosmonautů... – například goethit (Johann Wolfgang Goethe) a scheelit (Carl Wilhelm Scheele).

Poznámka

Johann Wolfgang Goethe (1749–1832), od roku 1782 von Goethe – německý spisovatel, přírodovědec a filozof. Jeho nejznámějším dílem je *Faust*, dramatická báseň o úsilí poznat smysl života a pravdu. Je autorem románu v dopisech *Utrpení mladého Werthera* a dramatu *Egmont, Ifigenie v Tauridě* a *Torquato Tasso*. V oblasti přírodních věd se zajímal hlavně o biologii, ale také o fyziku (optika), meteorologii a geologii. Byl vášnivým sběratelem minerálů (Goethova sbírka minerálů měla v době jeho smrti 17 800 položek!).

Carl Wilhelm Scheele (1742–1786) – švédský chemik německého původu, objevitel mnoha chemických látek. Objevil kyslík (v roce 1772), dusík, baryum, chlor a mangan (všechny čtyři v roce 1774), molybden (1778) a wolfram (1781) a také několik chemických sloučenin – kyselinu citronovou, glycerol, kyanovodík, fluorovodík a sirovodík. Zemřel předčasně (nedožitých 44 let), posmrtné symptomy byly podobné otravě rtutí – jedním z jeho (zlo)zvyků bylo ochutnávat objevené chemické látky.

Součástí názvu minerálu může být značka chemického prvku, uvedená za pomlčkou, a to buď uzavřená v okrouhlé závorce, nebo připojená bez závorky. Jako příklad lze uvést tyto názvy minerálů: monazit-(Ce), stilbit-Ca, klinoptilolit-K. Připojení značky chemického prvku za kmenový název řady se používá k odlišení jednotlivých členů této řady. Lze to snadno vysvětlit na dvou příkladech:

Prvním příkladem je izomorfní řada monazitu. Minerály této řady jsou běžně označovány jen jako „monazit“. Je to však nepřesné, neboť členy monazitové řady jsou čtyři minerály: monazit-(Ce), monazit-(La), monazit-(Nd) a monazit-(Sm). Složení minerálů řady monazitu je následující:

| | |
|--------------|----------------------|
| monazit-(Ce) | Ce[PO ₄] |
| monazit-(La) | La[PO ₄] |
| monazit-(Nd) | Nd[PO ₄] |
| monazit-(Sm) | Sm[PO ₄] |

Uvedené chemické vzorce vyjadřují složení koncových členů, míšivost mezi nimi je v libovolných poměrech. Ten nejhojnější prvek za čtveřice Ce, La, Nd, Sm určuje přesný název minerálu. Zpravidla převažuje cer, tedy monazit-(Ce) je nejběžnějším minerálem monazitové řady. Jakým způsobem číst názvy těchto minerálů? Jsou dvě možnosti: buď tak, jak se to píše (tedy například „monazit ce“, „monazit la“...), nebo jako „cerový monazit“ apod.

Poznámka

Chemické prvky se značkami Ce, La, Nd a Sm možná někteří uživatelé této publikace neznají, a pokud ano, tak i pro ně může být tato poznámka důležitá. Týká se relativně početné skupiny chemických prvků, pro kterou je v geologických vědách (včetně mineralogie) používán název „prvky skupiny vzácných zemin“ nebo jen krátce „vzácné zeminy“. Do skupiny vzácných zemin patří prvky s atomovými čísly 57 až 71, tedy lanthan, cer, praseodym, neodym, promethium, samarium, europium, gadolinium, terbium, dysprosium, holmium, erbium, thulium, ytterbium a lutecium, a také yttrium (atomové číslo 39), někteří geochemici do skupiny vzácných zemin řadí i skandium (atomové číslo 21) – viz připojený výsek Mendělejevovy tabulky (Hoatson et al. 2011). Prvky vzácných zemin následující v Mendělejevově tabulce za lanthanem se dříve označovaly jako lanthanoidy (at. čísla 58 až 71), v současnosti jsou v chemii za lanthanoidy považovány prvky La až Lu (at. čísla 57 až 71) a chemici dokonce pro ně užívají značku Ln.

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|----|---------------------|--------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| Na | Mg | Rare-Earth Elements | | | | | | | | | | Al | Si | P | S | Cl | Ar | |
| 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 | 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 | 31 | 32 | 33 | 34 | 35 | 36 | |
| K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr | |
| 37 | 38 | 39 | 40 | 41 | 42 | 43 | 44 | 45 | 46 | 47 | 48 | 49 | 50 | 51 | 52 | 53 | 54 | |
| Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe | |
| 55 | 56 | 57-71 | 72 | 73 | 74 | 75 | 76 | 77 | 78 | 79 | 80 | 81 | 82 | 83 | 84 | 85 | 86 | |
| Cs | Ba | * | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn | |
| 87 | 88 | ** | 89-103 | 104 | 105 | 106 | 107 | 108 | 109 | 110 | 111 | 112 | 113 | 114 | 115 | 116 | 117 | 118 |
| Fr | Ra | | Rf | Db | Sg | Bh | Hs | Mt | Ds | Rg | Cn | Uut | Uuq | Uup | Uuh | Uus | Uuo | |

| | | | | | | | | | | | | | | |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-----|-----|-----|
| 57 | 58 | 59 | 60 | 61 | 62 | 63 | 64 | 65 | 66 | 67 | 68 | 69 | 70 | 71 |
| La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu |
| 89 | 90 | 91 | 92 | 93 | 94 | 95 | 96 | 97 | 98 | 99 | 100 | 101 | 102 | 103 |
| Ac | Th | Pa | U | Np | Pu | Am | Cm | Bk | Cf | Es | Fm | Md | No | Lr |

V mineralogii, petrografii a geochemii se v chemických vzorcích minerálů i v psaném textu běžně používá značka REE (z anglického označení vzácných zemin „rare earth elements“). Pokud je zkratka REE ve vzorci minerálu, pak vyjadřuje přítomnost lanthanoidů (tedy prvků s atomovými čísly 57 až 71), pokud je zkratka REE použita v textu, pak jde o lanthanoidy + yttrium (někdy se používá zkratka REY). Prvky skupiny REE mají podobné geochemické vlastnosti, a proto se často vyskytují společně, a to nejen v horninách, ale i ve strukturách minerálů.

Ve výše uvedených minerálech monazitové řady jsou REE podstatnou složkou. Pokud není v konkrétním případě známo, který prvek ze skupiny REE v minerálu monazitové řady převažuje, pak jej můžeme označit jako monazit, i když víme, že to není v souladu s mineralogickou nomenklaturou. V petrografii se s touto terminologickou nepřesností setkáváme zcela běžně.

Druhým příkladem jsou minerály náležející do skupiny zeolitů. Tato skupina patří mezi silikáty, do oddělení tektosilikátů. Charakteristickým znakem zeolitů je krystalová struktura s relativně velkými kanálky a dutinkami. V nich je přítomna nepevně vázaná voda (tzv. zeolitová voda, kterou lze ze zeolitu snadno odstranit například zahřátím, dehydratovaný zeolit opět snadno hydratuje), a jsou v nich nepřilíš pevně vázány kationty alkalických kovů (hlavně Na^+ a K^+) a alkalických zemin (hlavně Ca^{2+} , Sr^{2+} a Ba^{2+}). Ve skupině zeolitů je značný počet nerostných řad, například řada stilbitu nebo řada klinoptilolitu.

V současné klasifikaci zeolitů je složení zeolitů stilbitové řady vyjadřováno vzorcem $(\text{Ca}_{0,5}\text{Na,K})_9[\text{Al}_9\text{Si}_{27}\text{O}_{72}] \cdot 28\text{H}_2\text{O}$. V této řadě existují dva minerály: stilbit-Ca a stilbit-Na.

Z uvedeného příkladu je zřejmé, že v názvech zeolitů nejsou značky chemických prvků uzavírány v závorce. I v případě zeolitů se mineralogové a petrografové běžně dopouštějí terminologické nepřesnosti, když například názvem stilbit označují všechny členy stilbitové řady.

V mineralogické nebo petrografické literatuře jsou často minerály označovány zkratkami – viz soubor „05-systematická-mineralogie.pdf“, strana 655 až 657.

4. Odrůdy minerálu

V rámci jednoho minerálu může být vyčleňováno několik odrůd (variet), zpravidla na základě barvy, morfologie krystalů nebo povahy agregátů, kritériem však může být i chemické složení nebo místo (oblast) výskytu. V češtině jsou názvy odrůd obvykle jednoslovné, mohou být i dvojslovné.

Na základě barvy jsou rozlišovány například odrůdy křemene, korundu a berylu. Odrůdy křemene: křišťál (bezbarvý), růženín (růžový), ametyst (fialový), citrín (žlutý), záhněda (kouřově hnědá) a další. Odrůdy korundu: rubín (červený), safír (například modrý, ale i jinak zbarvený, jenom ne červený). Odrůdy berylu: smaragd (ostře zelený nebo modrozelený), akvamarin (modrozelený) a další. Dalšími příklady odrůd založených na barvě jsou hesonit (červeně zbarvený grossular) a amazonit (zeleně zbarvený mikroklin).

Příkladem odrůd vyčleněných na základě morfologie krystalů nebo povahy agregátů jsou žezlový křemen (obr. 5), smolinec (kolomorfní agregáty uraninitu), hrachovec (pisolitické, tj. „kuličkovité“ agregáty aragonitu), železný květ (keříčkovité agregáty aragonitu), železná růže (tenké tabulkovité krystaly hematitu uspořádané do růžicovitých agregátů) a alabastr (kompaktní jemnozrnný agregát sádrovce, zpravidla bílé barvy).



Obr. 5. Žezlový křemen; šířka snímku cca 20 mm. Důl San Pedro, New Placers District, Santa Fe County, New Mexico, USA. Foto: John R. Montgomery.

Poznámka: Základem žezlového křemene je štíhlý prizmatický krystal křemene (šestiboký sloupec), na nějž orientovaně narůstá širší krystal křemene. Někomu tato morfologická varieta křemene připomíná žezlo, jinému spíše holubník. Označení „holubníkový křemen“ se v české terminologii občas objevuje, ve slovenské je termín „holubníkový kremeň“ zcela dominantní.

Příklady odrůd, které jsou vymezovány na základě chemického složení (kritériem je obsah určité příměsi): titanaugit (augit s příměsí Ti), chromdiopsid (diopsid s příměsí Cr), kongsbergit (stříbro s vysokým obsahem Hg).

Příklady odrůd nazvaných podle místa výskytu: pouštní růže (shluky velkých krystalů sádrovce vznikajících krystalizací z kapilárních vod v píscích pouštních oblastí – obr. 6), sibiřský smaragd (smaragdově zelený chromdiopsid ze Sibíře).



Obr. 6. Sádrovec – pouštní růže; šířka snímku cca 30 mm. Rissani, Er-Rissani Cercle, Errachidian Province, Drâa-Tafilalet Region, Maroko. Foto: Peter Neschen.

5. Rozdělení mineralogie

Mineralogie se v současnosti zpravidla dělí na mineralogii všeobecnou, genetickou, systematickou, topografickou, experimentální a aplikovanou.

Všeobecná mineralogie se zabývá vnějším tvarem (morfologií) a vnitřní stavbou (strukturou) minerálů a 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 minerálů na jednotlivých nalezištích.

Experimentální mineralogie modeluje přírodní procesy vzniku minerálů 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.

Všeobecná mineralogie

Všeobecná mineralogie se hlavně zabývá vnějším tvarem (morfologií), vnitřní stavbou (strukturou) a fyzikálními vlastnostmi minerálů. Až na několik výjimek minerály patří mezi krystalické látky. Proto je nejvýznamnější součástí všeobecné mineralogie nauka o krystalech, tj. krystalografie.

V obecné rovině je za minerál pokládán prvek nebo chemická sloučenina, která je krystalická a která vznikla jako produkt geologických procesů. Jako krystalická látka se označuje libovolná pevná látka s vnitřní stavbou charakteristickou pro krystal, přičemž je lhostejno, zda jednotlivé objekty této látky jsou nebo nejsou omezeny svými krystalovými plochami. Krystalická látka tedy může být tvořena individuálně víceméně dokonale omezenými krystalovými plochami (tj. víceméně dokonale vyvinutými krystaly, alespoň pokud jde o jejich morfologii) nebo zrny, která jsou omezena vlastními krystalovými plochami jen zčásti nebo vůbec.

1. Definice krystalu

Jako krystal je velmi často označována pevná látka (tj. látka v pevném skupenství), která je omezena přirozenými rovinnými plochami, tzv. krystalovými plochami. Jedna ze starších definic praví, že **krystal je geometrický mnohostěn se stěnami rovnými, hladkými a víceméně lesklými**. Tato definice odpovídá tomu, co si pod pojmem krystal představuje většina lidí (obr. 7). Tato definice je srozumitelná, snadno zapamatovatelná, bohužel však již více než sto let zcela neakceptovatelná, neboť ignoruje pravidelnou vnitřní stavbu (strukturu) krystalu, a ta je pro krystalické látky zcela zásadní.



Obr. 7. Tyto krystaly jsou skutečně geometrické mnohostěny se stěnami rovnými, hladkými a víceméně lesklými: vlevo spessartin (foto: Fabre Minerals), uprostřed bixbit (foto: Kewin Ward), vpravo fluorit (foto: Fabre Minerals). Jejich morfologie je dána krystalovou strukturou a také podmínkami, za nichž krystalizace probíhala.

Vnější tvar krystalu je odrazem pravidelného uspořádání jeho základních stavebních částic (atomů, molekul), které nemají možnost translačního ani rotačního pohybu a jejichž atomové oscilace se uskutečňují kolem rovnovážných poloh. Pravidelné uspořádání stavebních částic v krystalové struktuře se projevuje anizotropií, čímž rozumíme závislost některých fyzikálních vlastností (například tvrdosti, některých optických vlastností, tepelné a elektrické vodivosti) na směru, v němž je zjišťujeme. Například při určování tvrdosti rýpáním do krystalové plochy lze zjistit, že v různých směrech je tvrdost rozdílná. S ohledem na strukturu krystalu a na výše zmíněnou anizotropii lze formulovat následující definici krystalu, která je považována za klasickou: **Krystal je homogenní (stejnorodé) anizotropní diskontinuum se zákonitou, jednotnou a periodicky se opakující vnitřní stavbou**. Termínem diskontinuum

rozumíme souhrn hmotných částic (atomů, iontů, molekul), které jen diskontinuitně (tj. nespojitě, tedy „s mezerami“) vyplňují prostor zaují-maný krystalem.

Až na několik výjimek minerály patří mezi krystalické látky. S minerály ve formě relativně velkých krystalů, které by byly víceméně dokonale omezeny krystalovými plochami, se v přírodě setkáváme spíše výjimečně. Některé minerály se v určitých typech hornin běžně vyskytují v podobě téměř dokonale vyvinutých krystalů, avšak jejich rozměry jsou obvykle mikroskopické (například sloupečkovité krystaly apatitu v granitu).

Poznámka

Mezi minerály se však vyskytují i pevné látky, které krystalické nejsou. Tyto minerály lze rozdělit do dvou skupin: i) amorfní minerály, ii) metamiktní minerály. Amorfní (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 (viz též poznámka v rámečku na straně 128). K metamiktní přeměně dochází například 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. Voda (v kapalně formě) není pokládána za minerál. Její pevnou formu (led) někteří mineralogové za minerál považují, jiní však ne.

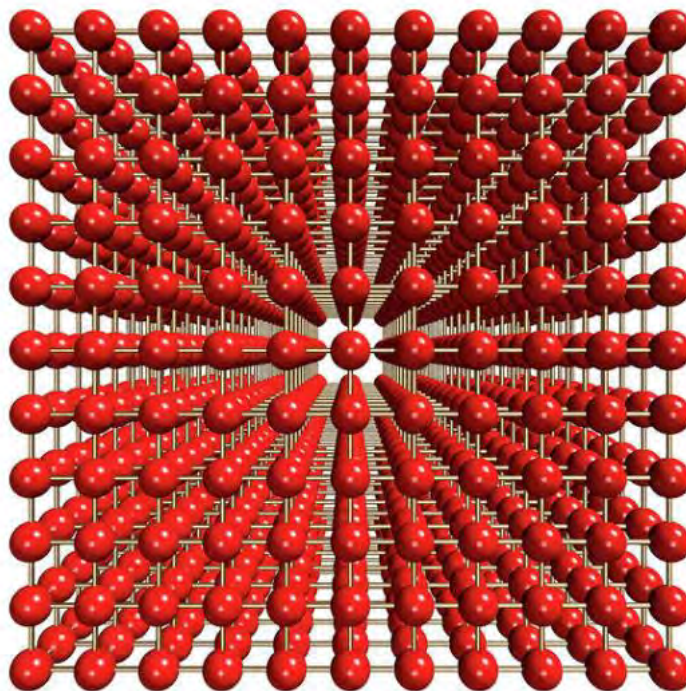
2. Rozdělení krystalografie

Krystalografie se 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 této publikaci sloučeny do jedné kapitoly s názvem strukturní a chemická krystalografie. **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.

3. Strukturní a chemická krystalografie

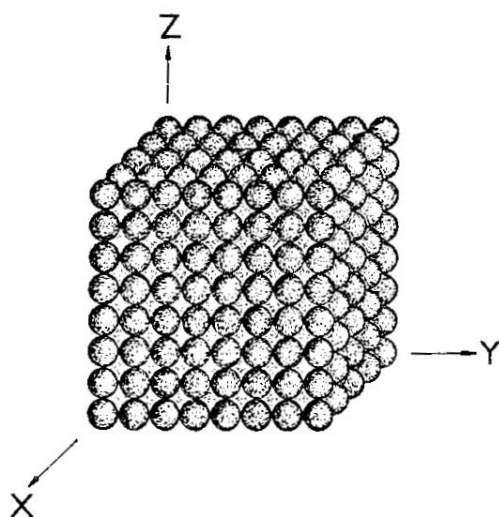
3.1. Struktura krystalu a prostorová mřížka

Na obrázcích 8 a 9 je znázorněna krystalová struktura α -polonia, jehož jednotlivé atomy jsou zobrazeny jako kuličky. Tato modifikace polonia je jediným známým příkladem jednoduché kubické krystalové struktury, která vzniká pravidelným opakováním jediného atomu ve třech na sebe kolmých směrech. Libovolně zvolený atom polonia se v této krystalové struktuře pravidelně opakuje ve třech směrech X, Y a Z, přičemž dva sousední atomy jsou od sebe vzdáleny vždy o konstantní vzdálenost. V této struktuře atom polonia představuje **základní motiv**, jehož pravidelným opakováním se vytváří trojrozměrná **krystalová struktura**.



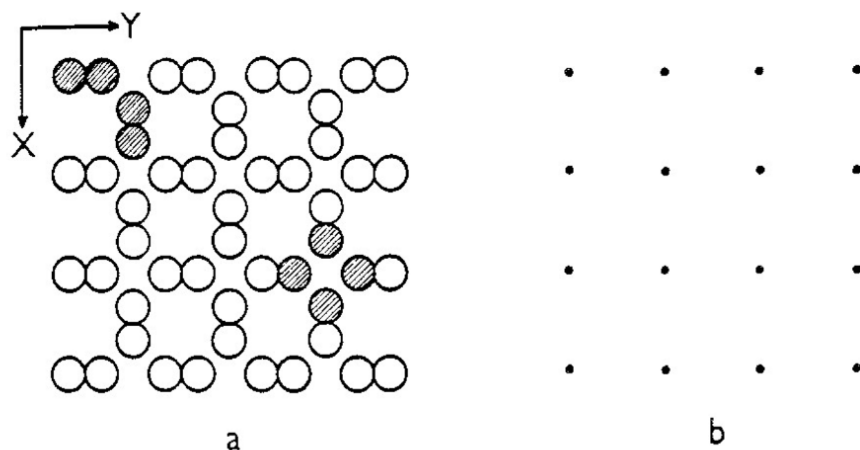
Obr. 8. Pohled do krystalové struktury α -polonia. Zdroj:

https://www.google.cz/search?sca_esv=8d08fdb92d3dc4d4&sca_upv=1&q=polonium+crystal+structure&udm=2&fbs=AEQNm0Dg3jL7_nUV4_inb0jRKZuKZx2IIA0zQj2nIoYPgN35RKa7LgPYdXmO-7w1OLTfaHuOk-551kcFzigmFTmy1xkRZ6rI3hXo48QpiLgKi0CVRRHJ3vO_DdGqbepfh0zcDN9lIr9le9CngRtWvvggi7gIkC4OA7wuduXM2jiqgpSbW7AhaqBs&sa=X&ved=2ahUKEwjXj8H9wtuIAxVm0gIHHbRfDCAQtKgLegQIDhAB&biw=1411&bih=1009&dpr=1#imgre=nP7vzuba7ht78M&imgdii=pg655iF7V_ZoZM



Obr. 9. Krystalová struktura α -polonia. Jednotlivé atomy polonia jsou zde znázorněny vzájemně se dotýkajícími kuličkami. Geometrie struktury je stejná jako na obrázku 8.

Výběr základního motivu není vždy tak jednoduchý a jednoznačný jako u krystalové struktury α -polonia, kde jej tvoří pouze jediný atom. Na obrázku 10a je znázorněna složitější struktura (pro přehlednost pouze dvojrozměrně – jde o řez v rovině XY). Základní motiv této fiktivní struktury musí obsahovat již čtyři atomy. Lze jej zvolit několika způsoby. Dva z nich jsou znázorněny na obrázku 10a – pravidelným opakováním prvního nebo druhého základního motivu ve směru os X a Y lze postupně vytvořit zobrazení struktury v řezu XY.

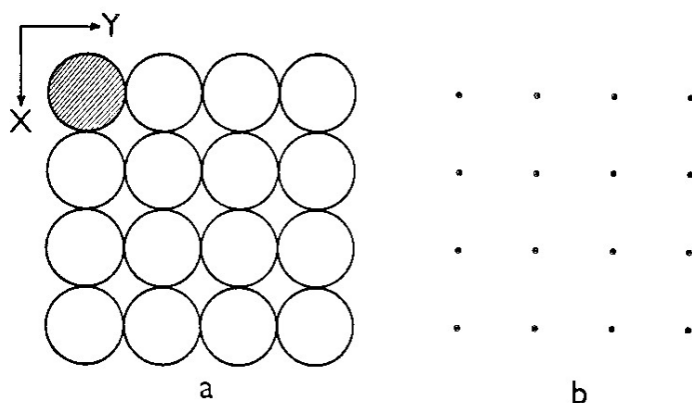


Obr. 10. Řez XY fiktivní krystalovou strukturou a dvojí výběr základního motivu (a) a rozmístění mřížkových bodů odpovídající této krystalové struktuře (b).

Obecně lze v libovolné krystalové struktuře vymežit základní motiv, což je 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 zjednodušeně jen jako **mřížka**. Je zřejmé, že takto odvozená mřížka zachovává původní geometrické vztahy v krystalové struktuře. Každý bod mřížky, zvaný též **mřížkový bod** nebo **uzel**, má stejné a stejně orientované okolí, a vůbec nezáleží na tom, jaká je pozice mřížkového bodu vůči základnímu motivu (je však nezbytné, aby tato pozice byla u všech mřížkových bodů stejná).

Poznámka

Mřížka je imaginárním souborem mřížkových bodů (uzlů), v němž je okolí každého mřížkového bodu stejné jako okolí jiného libovolného mřížkového bodu v tomto souboru. Žádný mřížkový bod nelze jednoznačně označit za počátek mřížky. Pokud chceme některý z mřížkových bodů považovat za počátek mřížky, pak si můžeme zvolit libovolný (počátkem mřížky může být každý z mřížkových bodů).

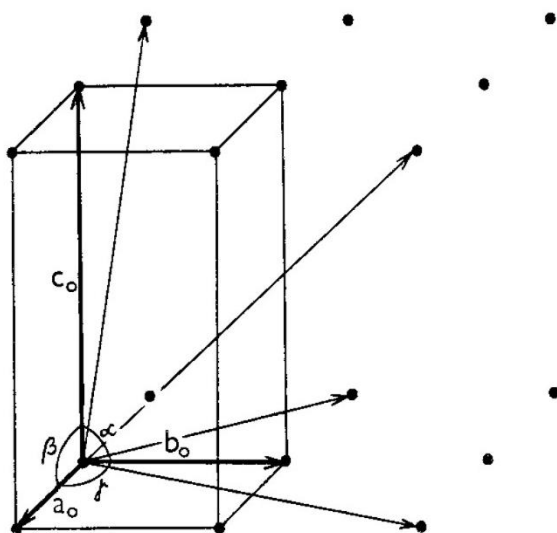


Obr. 11. Řez strukturou α -polonia v rovině XY, procházející středy atomů (a) a odpovídající rozmístění mřížkových bodů (b). Mřížkové body jsou umístěny ve středech atomů polonia.

Vraťme se zpět ke krystalové struktuře α -polonia znázorněné na obrázku 9. Na obrázku 11a je řez touto strukturou v rovině XY. Rozmístění jednotlivých atomů polonia v tomto řezu lze vyjádřit seskupením mřížkových bodů, kdy každý mřížkový bod reprezentuje jeden atom polonia a je umístěn ve středu tohoto atomu (obrázek 11b). Geometrii o něco komplikovanější krystalové struktury na obrázku 10a lze vyjádřit rozmístěním mřížkových bodů na obrázku 10b. Porovnáním obrázků 10b a 11b, které vyjadřují geometrii dvou zcela odlišných krystalových struktur, zjišťujeme, že v daném řezu jsou obě mřížky velmi podobné, liší se pouze vzdáleností mezi sousedními uzly. Pokud tato geometrická podobnost dvou odlišných krystalových struktur bude platit i v trojrozměrném prostoru (tedy v 3D), pak tyto struktury budou mít mřížku stejného 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 pomyslně vytvořit krystalovou strukturu).

3.2. Základní buňka

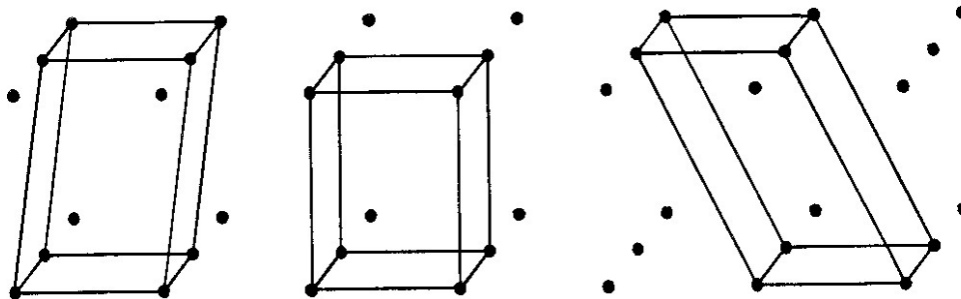
V každé mřížce se uzly pravidelně opakují, a proto lze celou mřížku odvodit z libovolného uzlu, který si zvolíme za počátek mřížky. Mřížku získáme postupným posunováním (translací) tohoto uzlu ve třech nekomplanárních směrech (tj. ve třech směrech neležících v jedné rovině) pomocí trojice translačních vektorů. Na obrázku 12 je znázorněna mřížka, z jejíhož libovolného uzlu můžeme vést řadu translačních vektorů – na obrázku je vyznačeno sedm translačních vektorů, 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 – obr. 12. Hodnoty a_0 , b_0 , c_0 , α , β a γ se označují jako **mřížkové parametry** (případně jako parametry základní buňky).



Obr. 12. Několik vybraných translačních vektorů v mřížce a její základní buňka.

Obrázek 13 naznačuje, že zobrazenou mřížku by snad bylo možno popsat pomocí různě zvolených základních buněk. Není tomu tak, neboť při výběru základní buňky vhodné pro konkrétní mřížku (a tedy krystalovou strukturu) je nutno respektovat tato pravidla:

1. Základní buňka musí mít stejnou souměrnost jako celá krystalová struktura, resp. stejnou souměrnost jako je nejvyšší možná souměrnost v té krystalové soustavě, do níž daná krystalová struktura náleží (tedy musí mít stejnou souměrnost jako krystaly holodrického oddělení dané soustavy – viz podkapitola 4.4).
 2. Počet stejných hran a také stejných úhlů mezi hranami základní buňky musí být maximální.
 3. Počet pravých úhlů v základní buňce musí být maximální.
 4. Při splnění předcházejících požadavků musí být objem základní buňky co nejmenší.
- Ze tří základních buněk znázorněných na obrázku 13 proto zvolíme tu prostřední.

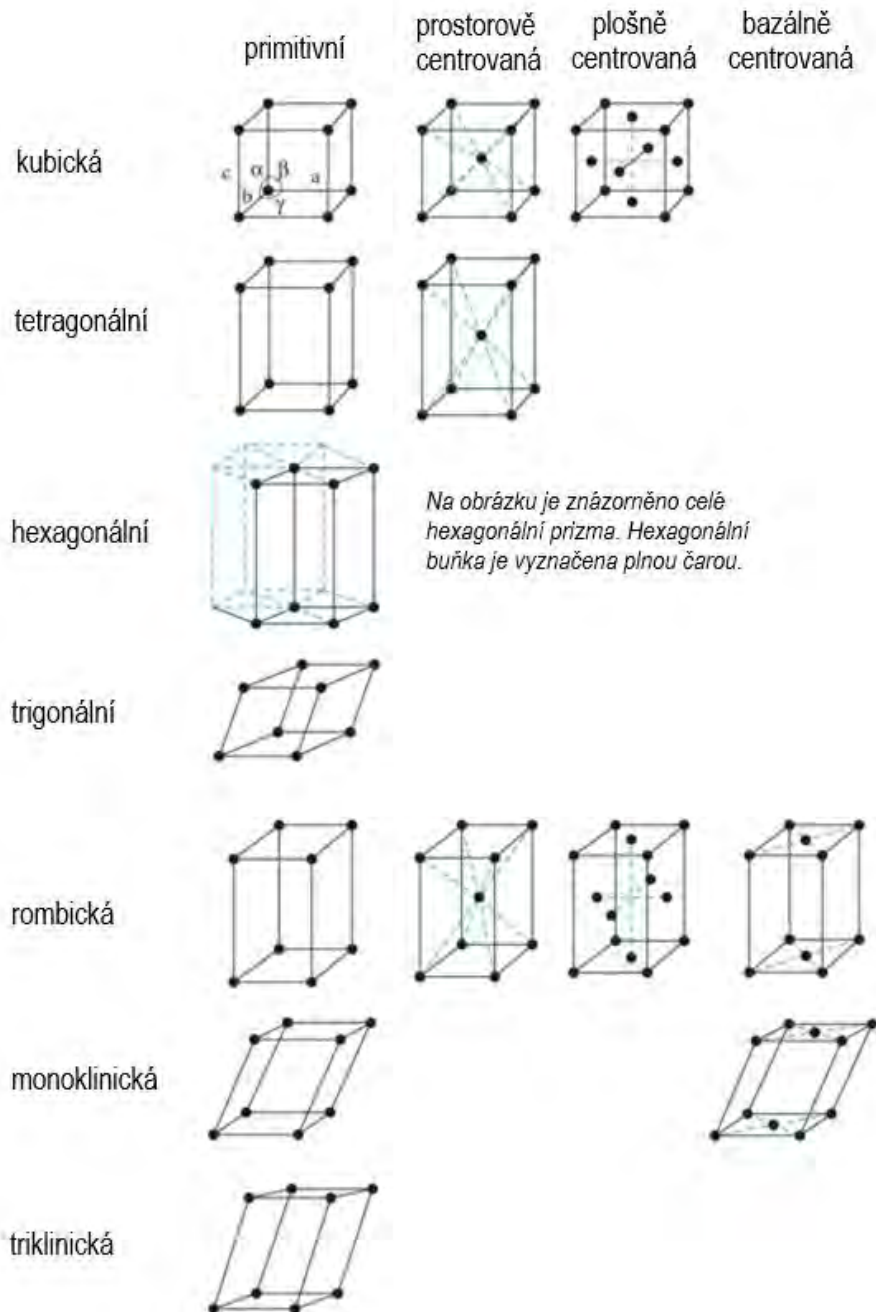


Obr. 13. Volba základní buňky v mřížce.

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. **Prostorově (tělesově) centrovaná buňka** obsahuje kromě osmi uzlů ve vrcholech ještě jeden uzel v průsečíku tělesových úhlopříček – na objem tělesně centrované buňky tedy připadají 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. **Bazálně (bočně) 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 2 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**, případně jako **Bravaisovy mřížky**. Na obrázku 14 je znázorněno všech čtrnáct Bravaisových buněk, které jsou na základě souměrnosti rozděleny do sedmi krystalových soustav. Z obrázku je zřejmé, že sedm krystalových soustav odpovídá sedmi primitivním Bravaisovým buňkám (a naopak).

Poznámka

Při označování Bravaisových buněk jsou používána písmena P, R, I, F a C. Primitivní buňky jsou označeny písmenem R (trigonální neboli romboedrická buňka) nebo P (primitivní buňky všech soustav kromě trigonální), prostorově centrované buňky jsou označeny písmenem I, plošně centrované písmenem F a bazálně centrované písmenem C.



Obr. 14. Čtrnáct Bravaisových buněk.

Poznámka

Struktura krystalu je tvořena atomy, ionty nebo molekulami. Krystalovou strukturu si můžeme představit jako nekonečnou trojrozměrnou mřížku, která je sestavena ze stejných, navzájem se dotýkajících rovnoběžnostěnů (Bravaisových buněk). Uzly této mřížky jsou body, kolem nichž stavební částice struktury (tj. atomy, ionty nebo jejich skupiny) vykonávají kmitavý pohyb.

Výše již bylo uvedeno, že každá Bravaisova buňka je popsána šesti základními mřížkovými parametry, a to délkami hran základní buňky a_0 , b_0 a c_0 (jde o základní periody mřížky) a úhly α , β a γ (jde o úhly svírané hranami základní buňky). 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 (trojklonná) soustava: $a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$, $\alpha \neq 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$, $\gamma \neq 90^\circ$,

monoklinická (jednoklonná) soustava: $a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$, $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta \neq 90^\circ$,

rombická (kosočtverečná) soustava: $a_0 \neq b_0 \neq c_0 \neq a_0$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$,

tetragonální (čtverečná) soustava: $a_0 = b_0 \neq c_0$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$,

trigonální (klencová) soustava: $a_0 = b_0 \neq c_0$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$,

hexagonální (šesterečná) soustava: $a_0 = b_0 \neq c_0$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$,

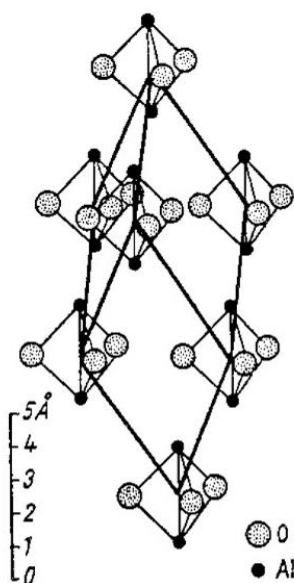
kubická (krychlová) soustava: $a_0 = b_0 = c_0$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

K vyjádření geometrie triklinické buňky je tedy nutno uvést hodnoty všech mřížkových parametrů. Například chalkantit (modrá skalice) má $a_0 = 6,12$, $b_0 = 10,69$, $c_0 = 5,96$ (tyto hodnoty jsou uvedeny v Å, přičemž $1\text{Å} = 1 \times 10^{-10}\text{ m}$), $\alpha = 97^\circ 35'$, $\beta = 107^\circ 10'$ a $\gamma = 77^\circ 33'$. U látek krystalujících v rombické soustavě stačí uvést hodnoty a_0 , b_0 a c_0 , neboť hodnoty úhlů α , β a γ jsou dány rombickou soustavou (v rombické soustavě tyto úhly musí být pravé). Například rombická modifikace síry (označovaná jako α -S, tedy síra-alfa) 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 . Například u diamantu $a_0 = 3,57$.

Poznámka

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

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 (na povaze a množství izomorfních příměsí).

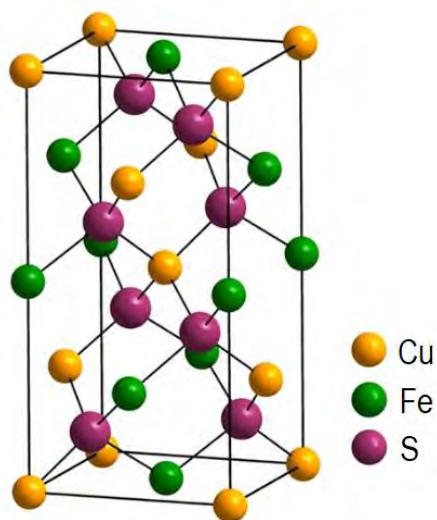


Obr. 15. Krystalová struktura korundu.

Na obrázku 15 je schematicky znázorněna krystalová struktura korundu. Složení korundu vyjadřuje vzorec Al_2O_3 , korund krystaluje v trigonální soustavě. Základní motiv krystalové

struktury 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 obrázku 16 je schematicky znázorněna základní buňka chalkopyritu (CuFeS_2). 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. 16. Základní buňka chalkopyritu (podle Hongyao Xie et al. 2021, upraveno). Jde o tetragonální buňku s rozměry $a_0 = 5,24 \text{ \AA}$, $c_0 = 10,32 \text{ \AA}$.

3.3. Atomy, atomové ionty a jejich mocenství

Minerály jsou složeny z chemických prvků. Atomy jednoho a téhož chemického prvku mají v jádru shodný počet protonů, mohou se však lišit počtem neutronů.

Poznámka

Protony a neutrony se společně označují jako nukleony. Součet počtu protonů a neutronů v jádru udává nukleonové číslo. Počet protonů v jádru udává protonové číslo, často označované jako atomové číslo. Všechna jádra, která mají shodné protonové (atomové) číslo, náleží k jednomu a témuž prvku. Atomy jednoho a téhož prvku (tj. se shodným atomovým číslem), avšak s rozdílným počtem neutronů (tj. s rozdílným nukleonovým číslem) se označují jako izotopy. Každý prvek v přírodě je směsí izotopů. Například kyslík má v přírodě tři izotopy. Všechny izotopy kyslíku mají v jádru 8 protonů, liší se počtem neutronů, jichž může být 8, 9 nebo 10. V případě 8 neutronů v jádru kyslíku je celkový počet nukleonů 16, jde o izotop označovaný jako ^{16}O (nukleonové číslo je vždy uváděno arabskou číslicí v horním indexu před chemickou značkou prvku). Zbývající dva izotopy kyslíku jsou ^{17}O a ^{18}O .

Okolo atomového jádra je relativně velká oblast (velká vzhledem k rozměrům jádra), v níž se pohybují elektrony. Je-li atom elektroneutrální, pak je počet elektronů totožný s počtem protonů v jeho jádru (proton je nositelem kladného náboje, elektron záporného). Elektrony jsou uspořádány do vrstev kolem jádra. Počet vrstev závisí na počtu elektronů. Vrstvy jsou označovány písmeny K, L, M, N, O, P, Q, přičemž takto na sebe navazují ve směru od jádra k okraji elektronového obalu (tj. nejbliže jádru je vrstva K). Maximální počet elektronů přítomných v jednotlivých vrstvách je zákonitý. Ve vrstvě K mohou být 2 elektrony, ve vrstvě

L může být 8 elektronů, ve vrstvě M může být 18 elektronů, ve vrstvě N může být 32 elektronů... Způsob zaplnění elektronových vrstev u jednotlivých prvků se označuje jako elektronová konfigurace. Například kyslík, jenž má v jádru 8 protonů, má celkem 8 elektronů, z toho 2 ve vrstvě K, zbývajících 6 ve vrstvě L (to znamená, že do vrstvy L by se ještě mohly „vejít“ dva elektrony). Budování elektronového obalu si lze představit tak, že elektrony obsazují nejprve vrstvu nejbližší k jádru, až po jejím zaplnění další bezprostředně následující vrstvu, po jejím zaplnění další... Tato představa platí pro prvky s atomovými čísly 1 až 18 (tj. vodík až argon), pak to může být o něco složitější. Například draslík (atomové číslo 19) má ve vrstvě K dva elektrony, ve vrstvě L má osm elektronů (zatím je vše O. K.), ve vrstvě M má však pouze osm elektronů (do ní by se „mohlo vejít“ až 18 elektronů), ve vrstvě N má jeden elektron.

Elektrony, které jsou ve vnější (tj. poslední) elektronové vrstvě, patří mezi tzv. valenční elektrony. Valenční elektrony jsou jádrem poutány slaběji než elektrony jádru bližší, a proto mohou být valenční elektrony od jádra poměrně snadno odštěpeny. Z hlediska struktur minerálů je podstatné, že valenční elektrony mají zcela zásadní význam pro vytváření chemických vazeb (viz podkapitola 3.4).

Uživatelé této publikace určitě vědí, že chemické prvky jsou na základě počtu protonů uspořádány do tabulky periodického systému prvků, zjednodušeně označované jako „mendělejevka“. Každý řádek této tabulky je zakončen vzácným plynem (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn – jde o prvky grupy VIII.A). Atomy vzácných plynů mají velmi stabilní uspořádání vnější elektronové vrstvy (vrstvy valenčních elektronů). V případě helia jde o dva elektrony (ve vrstvě K), všechny ostatní vzácné plyny mají ve vnější elektronové vrstvě osm elektronů (tzv. elektronový oktet). Atomy jiných chemických prvků se v průběhu chemických reakcí snaží dosáhnout elektronové konfigurace, charakteristické pro vzácné plyny, tj. chtějí se dostat do stabilního stavu, chudého na energii. K tomu může dojít buď přijetím dalších valenčních elektronů od atomů jiných prvků, nebo naopak odevzdáním vlastních valenčních elektronů, nebo vytvořením kovalentní vazby.

Přijetím nebo předáním valenčních elektronů se atom stává atomovým iontem. Termínem kationt se označuje atom, který předal valenční elektrony, aby dosáhl elektronové konfigurace vzácného plynu, který jej v „mendělejevce“ předchází (například vápník předáním dvou valenčních elektronů získá elektronovou konfiguraci argonu, sodík předáním jednoho valenčního elektronu získá elektronovou konfiguraci neonu). Kationt takto získá kladný náboj. Termínem aniont se označuje atom, který přijme valenční elektrony, aby dosáhl elektronové konfigurace vzácného plynu, který jej v „mendělejevce“ následuje (například chlor přijetím jednoho valenčního elektronu získá elektronovou konfiguraci argonu), a stane se tak záporně nabitým iontem.

Důležitou vlastností každého iontu (aniontu nebo kationtu) je jeho mocenství neboli valence. Mocenství (valence) iontu jsou definovány různě: i) Například jako maximální počet jednomocných (jednovalečních) iontů, které se mohou kombinovat s daným iontem nebo kterými může být daný iont nahrazen. Tato definice původně operovala s jednomocnými ionty chloru a vodíku. Lze to dokumentovat na sloučenině NaCl (minerál halit), z níž je zřejmé, že sodík je v ní jednomocný. Ze složení metanu CH₄ je zřejmé, že uhlík je v této sloučenině čtyřmocný. ii) Nebo mocenství odpovídá počtu atomů vodíku, které se s daným iontem mohou kombinovat v binárním hydridu, nebo je mocenství dvojnásobkem počtu atomů kyslíku, které v kombinaci s tímto iontem tvoří oxid. Tato definice mocenství vychází z toho, že vodík v hydridu je vždy jednomocný, kyslík v oxidu je vždy dvojmocný. Příkladem zde může být BH₃ (hydrid boritý neboli boran), z něhož je zřejmé, že bor je trojmocný. Druhým příkladem, tentokrát z říše minerálů, je TiO₂ (tři modifikace – rutil, anatas a brookit), svědčící o tom, že titan je čtyřmocný.

Mocenství iontů lze vyjádřit například arabskou číslicí v horním indexu za chemickou značkou prvku, přičemž za touto číslicí je znaménkem plus nebo minus vyjádřen kladný nebo záporný náboj iontu (kladný náboj mají kationty, záporný anionty). Nutno poznamenat, že v minerálech se mnohé prvky vyskytují ve více mocenstvích (tj. v různých oxidačních stupních). Jako příklad běžných kationtů v minerálech lze uvést Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Al^{3+} nebo Si^{4+} . Příkladem v minerálech běžných aniontů jsou F^- , Cl^- , O^{2-} , $(\text{OH})^-$, $(\text{CO}_3)^{2-}$, $(\text{SO}_4)^{2-}$, $(\text{PO}_4)^{3-}$, $(\text{SiO}_4)^{4-}$ a další silikátové anionty.

V chemických vzorcích minerálů je nutno vyjádřit mocenství iontů, pokud je (nebo může být) některý z prvků ve struktuře minerálu přítomen v různých mocenstvích nebo pokud mocenství není ze vzorce rozpoznatelné. Uvádět ve vzorci mocenství iontů, které je zcela zřejmé z jejich povahy, je nejen zbytečné, ale dokonce chybné. Následuje několik příkladů:

i) Vzorec hematitu je Fe_2O_3 . Výše již bylo zmíněno, že kationty železa ve strukturách minerálů mohou být dvojmocné nebo trojmocné (Fe^{2+} nebo Fe^{3+}). Vzorec Fe_2O_3 je vzorcem oxidu. V aniontové části vzorce jsou „tři kyslíky“, tedy tři dvojmocné anionty kyslíku (O^{2-}). Tyto „tři kyslíky“ mají náboj celkem „šest mínus“. Aby struktura byla jako celek elektroneutrální, musí mít kationtová část vzorce náboj „šest plus“. Rozdělením oněch „šest plus“ mezi dva kationty železa zjistíme, že jde o trojmocné kationty, tedy Fe^{3+} . Zápis vzorce hematitu $\text{Fe}^{3+}_2\text{O}_3$ není v principu špatný, ale mocenství železa je v něm vyjádřeno zbytečně.

ii) Chemické složení magnetitu lze zapsat vzorcem Fe_3O_4 . V tomto oxidu je železo přítomno jako dvojmocné i trojmocné. Tuto skutečnost nejlépe vyjadřuje vzorec $\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}_2\text{O}_4$.

ii) Vzorec albitu je $\text{Na}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$. Vyjadřovat mocenství iontů je zbytečné. Ve strukturách minerálů je sodík vždy jednomocný (Na^+), hliník je trojmocný (Al^{3+}), křemík je čtyřmocný (Si^{4+}), kyslík je dvojmocný (O^{2-}). Snadno lze spočítat, že celá struktura je elektroneutrální („šestnáct plus“ a „šestnáct mínus“). Význam hranaté závorky ve vzorci albitu bude vysvětlen později (podkapitola 3.11, strana 50), na tomto místě to není nutné.

iv) Posledním příkladem je vzorec chloritoidu ($\text{Fe}^{2+}, \text{Mg}, \text{Mn}^{2+}$) $\text{Al}_2[\text{O}(\text{OH})_2[\text{SiO}_4]]$, v jehož struktuře jsou přítomny dva prvky, které se mohou vyskytovat v různých mocenstvích, konkrétně železo a mangan. Uvedení mocenství železa a manganu je v tomto případě nutné. Význam hranaté závorky a svislých čar ve vzorci chloritoidu je objasněn v podkapitole 3.11.

3.4. Chemické vazby ve struktuře minerálů

Krystalová struktura je dána pravidelným uspořádáním stavebních částic, jež jsou nuceny setrvávat v určité rovnovážné poloze díky silám, které mezi těmito stavebními částicemi působí. Tyto síly se obecně označují jako chemické vazby. Ve strukturách krystalů se uplatňuje pět různých typů chemické vazby: i) iontová, ii) kovalentní, iii) kovová, iv) van der Waalsova (molekulová), v) vodíková.

Iontová vazba je způsobena elektrostatickým přitahováním opačně nabitých částic, tedy kationtů a aniontů. Příkladem minerálu s typickou iontovou vazbou je halit, jehož struktura je tvořena ionty Na^+ a Cl^- (obr. 17).

Pro kovalentní vazbu je charakteristické sdílení dvojic elektronů dvěma atomy, jímž je dosaženo elektronové konfigurace, charakteristické pro vzácné plyny (elektronový oktet). Při tomto společném sdílení elektronů nevznikají ionty, atomy zůstávají elektroneutrální. Příkladem je diamant, tedy modifikace uhlíku, v jejíž struktuře každý atom uhlíku vytváří kovalentní vazbu se čtyřmi sousedy. Volný atom uhlíku má ve valenční sféře čtyři elektrony, každý atom uhlíku ve struktuře diamantu získává další čtyři elektrony jejich sdílením se sousedy, a tím se jeho elektronová konfigurace změní na elektronovou konfiguraci neonu

(elektronový oktet). Kovalentní vazba je obecně velmi pevná, proto například krystalické látky s touto vazbou mohou mít vysokou tvrdost.

Kovová vazba je typická pro kovy, které nemají dostatek elektronů k tomu, aby bylo dosaženo elektronové konfigurace inertního plynu. Proto se mezi atomy kovů vytvoří vazba, při níž valenční elektrony „patří celému krystalu“. Valenční elektrony se mohou poměrně volně pohybovat mezi zbytky atomů (kladnými ionty) a vytváří tak tzv. elektronový plyn. Existence elektronového plynu a pohyblivost elektronů způsobují, že krystalické látky s kovovou vazbou mají dobrou elektrickou i tepelnou vodivost, jsou kujné, často relativně měkké a mají kovový lesk.

Van der Waalsova vazba je slabou vazebnou interakcí. Její síla je ve srovnání s iontovou, kovalentní nebo kovovou vazbou výrazně nižší (o dva až tři řády). Van der Waalsova vazba se uplatňuje především mezi molekulami kapalin nebo v krystalech organických látek. V případě minerálů je van der Waalsova vazba významná například ve struktuře grafitu, souvisí s ní jeho dokonalá štěpnost a nízká tvrdost (viz poznámka v následujícím rámečku).

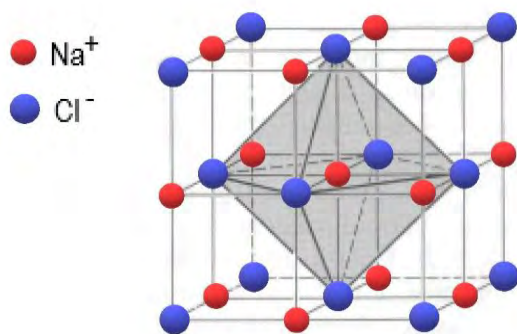
Vodíková vazba je slabou vazebnou interakcí, která se uplatňuje ve strukturách hydroxidů a také v mnoha fylosilikátech, které mají ve své struktuře skupiny $(OH)^-$ – jde například o slídy, chlority a kaolinit, u nichž tato vazba umožňuje dokonalou bazální štěpnost (tj. štěpnost podle jednoho systému štěpných ploch, umožňující štípání minerálu na lupínky).

Poznámka

V krystalové struktuře je existence jediného typu vazby (nebo výrazná dominance jednoho z typů) zcela výjimečným jevem. Lze dokonce tvrdit, že tři výše uvedené silné vazebné interakce (iontová, kovalentní a kovová vazba) se v čisté formě prakticky nevyskytují. Pokud jde o tyto tři silné vazebné interakce, velmi často se ve strukturách minerálů uplatňuje kombinace iontové a kovalentní vazby. Na úrovni základní školy lze kombinaci různých typů chemické vazby v krystalové struktuře doložit na příkladu grafitu. Grafit má vrstevnatou strukturu. Ta je složena z vrstev (sítí), v nichž jsou atomy uhlíku pevně vázány kovalentní vazbou. Tyto vrstvy (sítě) jsou navzájem spojeny slabou van der Waalsovou vazbou.

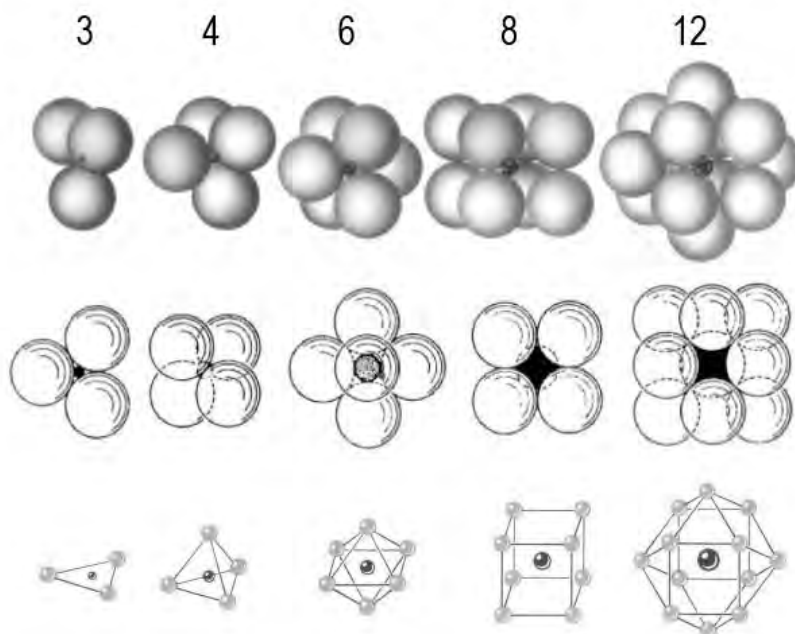
3.5. Koordinační číslo, atomové a iontové poloměry

V krystalové struktuře tvořené kationty a anionty je každý z iontů obklopen (koordinován) tolika opačně nabitými ionty, kolik se jich směstná do jeho bezprostředního okolí. Pokud jsou kationty a anionty v takové struktuře spojeny silami, které mají převážně elektrostatický charakter, můžeme tvar iontů považovat za víceméně kulovitý. Geometrie takového seskupení opačně nabitých iontů je pak relativně jednoduchá. Koordinující ionty jsou seskupeny okolo centrálního koordinovaného iontu. Obecně má toto seskupení geometrii polyedru (mnohostěnu), v jehož centru je koordinovaný iont, vrcholy polyedru tvoří středy koordinujících iontů (obr. 17). V krystalové struktuře se každý kationt nachází přibližně ve středu pomyslného koordinačního polyedru, jehož vrcholy jsou tvořeny anionty. Počet aniontů v koordinačním polyedru (= počet vrcholů koordinačního polyedru) se označuje jako koordinační číslo. Koordinační číslo tedy udává počet aniontů obklopujících kationt v koordinačním polyedru.



Obr. 17. Schematické znázornění krystalové struktury halitu NaCl. Ion Na^+ je obklopen (koordinován) šesti ionty Cl^- . Vyznačen je koordinační polyedr, jehož geometrie odpovídá oktaedru (osmistěnu). Sodík je tedy ve struktuře halitu v oktaedrické koordinaci. Koordinací číslo sodíku ve struktuře halitu je 6.

Hodnota koordinačního čísla (tj. počet vrcholů koordinačního polyedru) závisí na poměru mezi velikostí aniontu a velikostí kationtu. Kationt je v těchto strukturách menší než aniont. Čím je rozdíl ve velikosti kationtu a aniontu menší, tím větší může být počet koordinujících aniontů. Na obrázku 18 jsou graficky znázorněny třemi různými způsoby nejběžnější typy koordinací ve strukturách minerálů, postupně zleva doprava: i) trojúhelníková koordinace (trojnásobná planární koordinace, koordinační číslo 3, anionty jsou ve vrcholech rovnoramenného trojúhelníka), ii) tetraedrická koordinace (čtyřnásobná koordinace, koordinační číslo 4, anionty jsou ve vrcholech tetraedru, tj. čtyřstěnu), iii) oktaedrická koordinace (šestinásobná koordinace, koordinační číslo 6, anionty jsou ve vrcholech oktaedru, tj. osmistěnu), iv) hexaedrická koordinace (osminásobná koordinace, koordinační číslo 8, anionty jsou ve vrcholech hexaedru, tj. krychle), v) kubo-oktaedrická koordinace (dvanásobná koordinace, koordinační číslo 12, anionty jsou ve vrcholech kubo-oktaedru, tj. čtrnáctistěnu, jenž je v morfologické krystalografii spojkou hexaedru a oktaedru, tedy krychle a osmistěnu).

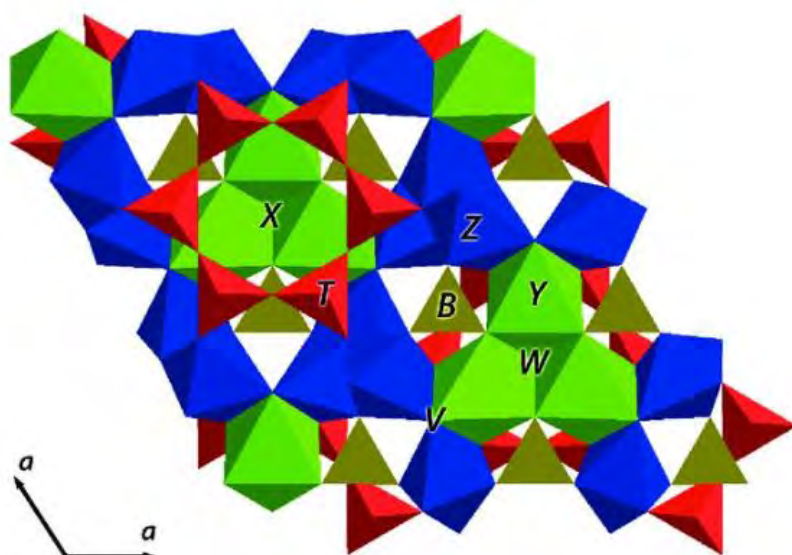


Obr. 18. Schematicky znázorněné uspořádání kationtu a koordinujících aniontů v pěti nejčastějších případech, jimž odpovídají koordinační čísla 3, 4, 6, 8 a 12. Sestaveno na základě obrázků v publikacích Klein (2006) a Chvátal (1999). Vysvětlení v textu.

Koordinační číslo iontu lze vyjádřit dvěma různými způsoby: i) římskou číslicí v horním indexu za značkou chemického prvku (například Si^{IV} , což je atom křemíku v tetraedrické

koordinaci), ii) arabskou číslicí v hranaté závorce v horním indexu za značkou prvku (například $\text{Fe}^{[6]}$, což je atom železa v oktaedrické koordinaci). Mineralogové preferují druhý způsob. Je přehlednější, což je zřejmé z následujícího příkladu: $\text{Fe}^{3+ [6]}$ (to je trojmocný kationt železa v oktaedrické koordinaci).

V případě potřeby může být koordinační číslo vyjádřeno i ve vzorci minerálu. Jako příklad lze uvést vzorec euklasu $\text{Al}^{[6]}\text{Be}^{[4]}[\text{OH}|\text{SiO}_4]$. Nutno poznamenat, že i bez koordinačních čísel je vzorec v podobě $\text{AlBe}[\text{OH}|\text{SiO}_4]$ bezchybným vzorcem euklasu. Zcela obdobně lze vyjádřit koordinaci hliníku ve třech modifikacích $\text{Al}_2[\text{O}|\text{SiO}_4]$, a to v andalusitu, sillimanitu a kyanitu. Vzorec této trojice minerálů se velmi často zjednodušuje do podoby Al_2SiO_5 . Zejména v petrografii a metamorfní petrologii se pro tuto trojici minerálů používá označení „minerály skupiny Al_2SiO_5 “. Ve struktuře andalusitu je polovina atomů hliníku koordinována oktaedricky, druhá polovina je v pětinasobné koordinaci (tato koordinace není v krystalových strukturách minerálů příliš častá). Ve struktuře sillimanitu je jedna polovina atomů hliníku koordinována oktaedricky, druhá polovina tetraedricky. Ve struktuře kyanitu jsou všechny atomy hliníku v oktaedrické koordinaci. Vzorce minerálů skupiny Al_2SiO_5 lze proto zapsat takto: andalusit $\text{Al}^{[6]}\text{Al}^{[5]}\text{SiO}_5$, sillimanit $\text{Al}^{[6]}\text{Al}^{[4]}\text{SiO}_5$, kyanit $\text{Al}^{[6]}\text{Al}^{[6]}\text{SiO}_5$.



Obr. 19. Grafické znázornění struktury minerálů turmalínové superskupiny pomocí koordinačních polyedrů (Bačík 2018).

Ne ve skutečnosti, ale pouze v představě lze strukturu krystalu rozložit na koordinační polyedry. Nebo naopak, krystalovou strukturu lze sestavit z vhodně vybraných koordinačních polyedrů. Koordinační polyedry jsou často využívány při grafickém znázornění krystalových struktur, a to zejména v případech, kdy jsou tyto struktury natolik komplikované, že zobrazení atomů formou „kuliček“ by bylo nepřehledné. Na obrázku 19 je jako příklad znázornění struktury pomocí koordinačních polyedrů prezentována struktura minerálů turmalínové skupiny – v souboru „05-systematická-mineralogie.pdf“ lze najít charakteristiku hlavních zástupců této skupiny, na straně 497 je objasněn význam písmen X, Y, Z, V, W a T (jde o obecné označení strukturních pozic), B = bor.

Na schematických vyobrazeních krystalových struktur i v jejich 3D modelech bývají ionty znázorňovány jako koule. Vlivem přitažlivých a odpuzivých elektrostatických sil mezi ionty dochází k deformaci jejich elektronových obalů, a proto se jejich tvar ve skutečnosti kouli někdy pouze podobá, jindy je natolik komplikovaný, že kouli již ani nepřipomíná. I to je jeden z důvodů, proč je složité vyjádřit velikost iontu v konkrétní krystalové struktuře.

Jak velké jsou atomy a atomové ionty? Nejpřesnější odpověď na tuto otázku je, že jsou malé. Vraťme se zpět k představě, že krystalová struktura je tvořena pravidelně uspořádanými kulovitými stavebními částicemi (atomy nebo ionty), které se vzájemně dotýkají (viz například horní a prostřední řada nákrešů na obrázku 18). Pokud je tvar částic kulovitý, pak jejich velikost můžeme vyjádřit atomovým či iontovým poloměrem. Atomy a ionty jsou opravdu velmi malé. Jejich poloměr je $0,1 \times 10^{-10}$ m až 1×10^{-10} m. Pro lepší přehlednost se ve strukturní krystalografii tradičně užívá jednotka ångström (čti „onstrém“), ve zkratce Å, přičemž $1 \text{ Å} = 1 \times 10^{-10}$ m (viz poznámka v rámečku na straně 20). Atomové a iontové poloměry jsou tedy řádově v ångströmech nebo desetinách ångströmů.

Velikost atomu je dána složením jeho jádra a jemu odpovídající elektronovou konfigurací (velikost elektronového obalu = velikost atomu). Řečeno zjednodušeně, velikost atomu závisí na počtu protonů v jeho jádru, tedy na pozici prvku v periodické tabulce prvků. Ve vztahu mezi velikostí atomu a jeho umístěním v „mendělejevce“ lze vysledovat dva významné trendy:

i) V jednotlivých skupinách prvků (tj. v jednotlivých sloupcích „mendělejevky“) roste atomový poloměr s rostoucím atomovým číslem (tj. ve sloupci shora dolů). Tato skutečnost souvisí s výstavbou elektronového obalu, kdy posun v „mendělejevce“ o jeden řádek níže znamená přidání další vrstvy obsazované elektrony. Lze to dokumentovat na příkladu alkalických kovů, tj. atomů grupy I.A (levý sloupec tabulky): v elektronovém obalu lithia jsou vrstvy K a L, v elektronovém obalu sodíku jsou vrstvy K, L a M, v elektronovém obalu draslíku jsou vrstvy K, L, M a N atd. To nutně vede ke zvětšování atomového poloměru s rostoucím protonovým číslem.

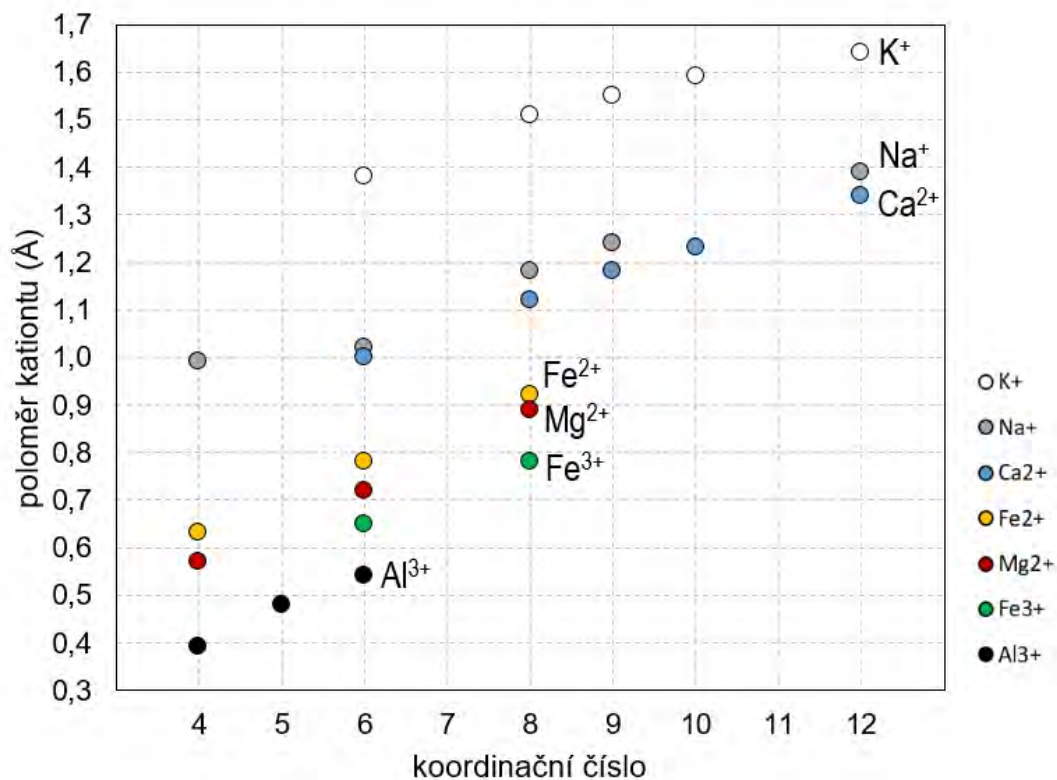
ii) Největší poloměry v každé periodě („vodorovném řádku mendělejevky“) mají atomy alkalických kovů. Dále (tj. ve směru doprava v dané periodě) atomové rozměry klesají, ke konci periody se však velikost atomů mírně zvětšuje (vnější elektrony se navzájem odpuzují). Výjimkou z tohoto pravidla jsou lanthanoidy (tj. prvky s atomovými čísly 57 až 71, tedy La až Lu), jejichž velikost se s růstem atomového čísla rovnoměrně zmenšuje (tzv. lanthanoidová kontrakce).

Velikost iontů je silně ovlivněna jejich nábojem. Obecně se zvětšuje s přibývajícím negativním nábojem, tj. s přibývajícím počtem elektronů v elektronovém obalu jednoho a téhož prvku. Lze to dokumentovat například na iontových poloměrech kationtů olova: Pb^{4+} 0,65 Å, Pb^{2+} 0,98 Å. Extrémním příkladem jsou následující ionty síry a chloru, kde jde o rozdíl ve výši osmi jednotkových nábojů: S^{6+} 0,29 Å, S^{2-} 1,84 Å, Cl^{7+} 0,27 Å, Cl^{-} 1,81 Å. Formulováno jinak, odstraněním jednoho nebo několika vnějších elektronů se rozměr atomu zmenšuje (zbylé elektrony jsou k jádru vázány silněji). Po uvolnění všech valenčních elektronů vznikne iont, jehož rozměr je dokonce menší než rozměr atomu inertního plynu v předchozí periodě – například Na^{+} (elektronová struktura $1s^2 2s^2 2p^6$) je menší než Ne (rovněž $1s^2 2s^2 2p^6$).

Velikost atomů a iontů v krystalových strukturách výrazně závisí na jejich koordinaci (hodnotě koordinačního čísla). To dokumentují následující příklady (iontové poloměry jsou uvedeny v Å, sestaveno na základě dat Shannona 1976):

| | Li^{+} | Na^{+} | K^{+} | Ca^{2+} | Mg^{2+} | Fe^{2+} | Al^{3+} | Si^{4+} |
|---------------------|-----------------|-----------------|----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| Koordinační číslo 4 | 0,59 | 0,99 | | | 0,57 | 0,63 | 0,39 | 0,26 |
| Koordinační číslo 6 | 0,74 | 1,02 | 1,38 | 1,00 | 0,72 | 0,78 | 0,54 | 0,40 |
| Koordinační číslo 8 | 0,92 | 1,18 | 1,51 | 1,12 | 0,89 | 0,92 | | |

Růst velikosti kationtů v závislosti na zvyšující se hodnotě koordinačního čísla dokládá i obrázek 20.



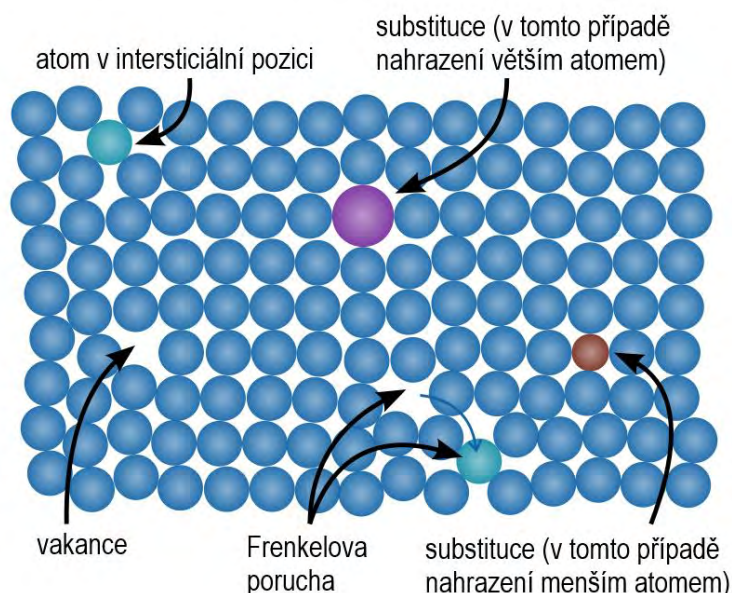
Obr. 20. Závislost iontového poloměru na koordinaci na příkladu kationtů K^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Fe^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{3+} a Al^{3+} na základě dat Shannona (1976).

3.6. Struktura reálného krystalu

Na straně 13 je v definici krystalu uvedeno, že krystal má zákonitou, jednotnou a periodicky se opakující vnitřní stavbu. V libovolné krystalové struktuře lze vymezit tzv. základní motiv. Takto je označováno seskupení co nejmenšího počtu stavebních jednotek (atomů, iontů, molekul), jehož pravidelným (periodickým) opakováním ve třech směrech lze pomyslně vytvořit krystalovou strukturu. Pokud krystalovou strukturu odvodíme pravidelným opakováním určitého základního motivu, pak tato struktura bude ideálně periodická, řečeno zcela jednoduše, bude to ideální krystalová struktura. Takovou strukturu by měl pouze ideální, nekonečně velký krystal, který ve skutečnosti neexistuje (například krystalová plocha je zcela zásadním porušením periodicity!).

Reálná krystalová struktura je ve srovnání se svým ideálním vzorem vždy určitým způsobem více či méně porušena. Za poruchu krystalové struktury považujeme každou (i zcela nepatrnou) odchylku od dokonalé periodicity.

Ideální krystalová struktura je pouze fikcí, existuje jen v naší představě. Pro popis reálných struktur jednotlivých minerálů jsou však jejich ideální modely zcela nezbytné. Reálné struktury se od svých ideálních vzorů liší různými typy poruch, z nichž nejběžnější jsou bodové poruchy a dislokace. Z hlediska chemického složení krystalů (a tedy minerálů) mají zásadní význam bodové poruchy.



Obr. 21. Schematické znázornění různých typů bodových poruch v krystalové struktuře (https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Point_defects_in_crystal_structures.svg, upraveno). Pokud by krystalová struktura na tomto obrázku byla ideální, pak by byla znázorněna pravidelně uspořádanými (periodicky se opakujícími) modrými kuličkami. Z obrázku je zřejmé, že všechny typy v něm znázorněných bodových poruch vedou k výraznému porušení pravidelnosti (periodicity) v jejich okolí.

Bodové poruchy různých typů jsou schematicky znázorněny na obrázku 21. V reálné krystalové struktuře je vždy určitý počet cizích atomů (nevyjádřených v idealizovaném chemickém vzorci minerálu), které zaujímají polohy, jež jsou v ideální krystalové struktuře vyhrazeny jiným atomům. Uvedené nahrazování či zastupování se označuje jako **substituce**. Na obrázku 21 jsou znázorněny dva případy, a to substituce větším atomem (fialová kulička) a menším atomem (hnědá kulička). Substituce je z hlediska mineralogie velmi významná, a proto bude detailně vyložena v následujících odstavcích. Ideální krystalová struktura je narušována i přítomností atomů v tzv. intersticiálních (vmezeřených) polohách (obr. 21) nebo vakancemi, tj. neobsazenými atomovými polohami v krystalové struktuře (obr. 21). 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. 21). Obdobně vzniká Schottkyho porucha, při níž však atom vystoupí až na povrch krystalu. Bodové poruchy se ve svém okolí projevují vždy určitou deformací krystalové struktury (v porovnání s ideální strukturou).

Vlivem substituce má mnoho minerálů proměnlivé chemické složení. Zastupování jednoho chemického prvku druhým je ve struktuře minerálů spíše pravidlem než výjimkou. Krystalické látky, v jejichž struktuře k tomuto zastupování dochází, jsou někdy označovány jako **pevné roztoky** nebo **směsné krystaly**. Tyto termíny odpovídají původním představám, podle nichž proměnlivé chemické složení minerálů souvisí s přítomností molekul dvou nebo více sloučenin v jediném homogenním krystalu. Například olivín může být považován za směs dvou hlavních složek: forsteritové složky $Mg_2[SiO_4]$ a fayalitové složky $Fe_2[SiO_4]$. Složení v přírodě rozšířených olivínů lze vyjádřit vzorcem $(Mg,Fe)_2[SiO_4]$. Ze vzorce $(Mg,Fe)_2[SiO_4]$ je zřejmé, že ve struktuře dochází k zastupování Mg a Fe, přičemž z takto uvedeného vzorce není jasný kvantitativní poměr mezi Mg a Fe. Pokud přesně známe chemické složení určitého olivínu, lze k vyjádření jeho chemismu použít krystalochemický vzorec, z něhož již bude kvantitativní poměr mezi Mg a Fe zcela zřejmý (způsob výpočtu krystalochemických vzorců je prezentován na stranách 52 až 55).

Termíny „pevný roztok“ a „směsný krystal“ jsou v mineralogii stále používány, i když víme, že 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, rozhodujícím o možnosti či nemožnosti vzájemného zastupování dvou prvků nebo iontů ve struktuře minerálu, je jejich velikost. Obecně platí, že zastupování iontů, atomů nebo iontových skupin je možné, mají-li podobnou velikost. Substitutece ve velkém rozsahu je reálná, pokud je rozdíl poloměrů zastupujících se iontů (atomů) menší než cca 15 % poloměru menšího iontu (atomu). Liší-li se poloměry o cca 15 až 30 %, pak je substitutece velmi omezená nebo vzácná. V případě rozdílu o více než cca 30 % je substitutece nepravděpodobná. Výjimky mohou nastat v případě komplikovaných krystalových struktur.

Důležitým faktorem umožňujících nebo znemožňujících substituci je mocenství (náboj). Pokud jsou náboje zastupujících se iontů stejné, jde o izovalentní izomorfii. Jsou-li rozdílné, jde o heterovalentní izomorfii.

Ve strukturách minerálů je izovalentní izomorfie častější než heterovalentní. Příkladem izovalentní izomorfie je zastupování Mg^{2+} a Fe^{2+} ve strukturách silikátů (např. olivín, pyroxeny, amfiboly, slídy, chlority) nebo karbonátů (dolomit-ankeritová řada). Ve strukturách sulfidů a arzenidů běžně dochází k substituci Fe^{2+} , Ni^{2+} a Co^{2+} .

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 je kationt Na^+ 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 lze schematicky vyjádřit zápisem $Mg^{2+}Si^{4+} \rightleftharpoons 2Al^{3+}$).

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 – například kationt Na^+ nemůže být substituován kationtem U^{4+} , přestože jejich iontové poloměry jsou prakticky shodné.

Poznámka

Na zastupování prvků v krystalové struktuře má značný vliv teplota vzniku této struktury – za jinak stejných podmínek se rozsah zastupování často zvětšuje s rostoucí teplotou.

Jestliže při vysoké teplotě se mohou například prvky „A“ a „B“ v určité strukturní pozici zastupovat ve zcela libovolných poměrech, může být při nižších teplotách možnost jejich vzájemného zastupování omezena. Pevný roztok tvořený prvky „A“ a „B“ se proto za nižších teplot může stát nestabilním. Takový pevný roztok se může rozpadnout na dvě samostatné fáze, z nichž jedna je bohatší na prvek „A“, druhá na prvek „B“. Tento proces se označuje jako rozpad pevného roztoku. Při rozpadu pevného roztoku vznikají z původně homogenní pevné fáze dva různé minerály.

K rozpadu pevných roztoků dochází například u alkalických živců. Při vysokých teplotách se v alkalických živcích neomezeně zastupuje sodík a draslík, a proto existuje souvislá řada homogenních fází od „čistého“ draselného živce o složení $K[AlSi_3O_8]$ přes sodno-draselný 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.

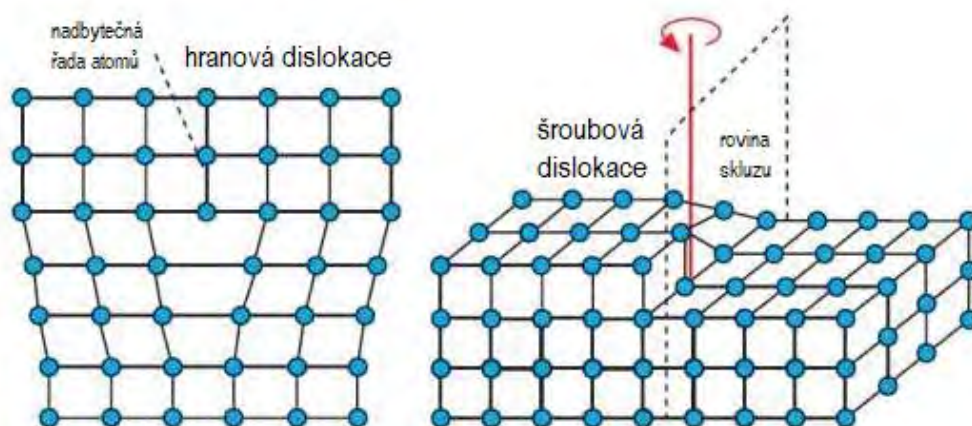
Zastupování různých prvků v ekvivalentních strukturních pozicích se často označuje jako **izomorfní zastupování** (případně diadoční zastupování) a „pevné roztoky“ jsou považovány za součást tzv. izomorfních řad (jde například o izomorfní řadu forsterit-fayalit). Jako **izomorfní příměsi** se označují prvky, které nejsou uvedeny v idealizovaném chemickém vzorci minerálu, ale které se díky izomorfnímu zastupování v minerálu vyskytují v obvykle malém množství, tj. jako příměs (jde například o Fe, Mn, Cd a In ve sfaleritu, Ni a Co v pyritu, Sr v barytu, Mn a Ni v olivínu).

Poznámka

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 pod pojmem izomorfie rozumíme vzájemné zastupování chemických prvků v krystalové struktuře.

Kromě bodových poruch jsou reálné krystalové struktury porušeny dislokacemi. Lze rozlišit dva základní typy dislokací: hranové dislokace a šroubové dislokace. Schematicky jsou oba typy dislokací znázorněny na obrázku 22. **Hranová dislokace** je defektem vznikajícím přítomností nadbytečné poloroviny atomů nebo nepřítomností určité části roviny atomů (to je totéž, ale jinak formulováno – v levé polovině obrázku 22 je nadbytečná polorovina atomů znázorněna trojicí atomů, které jsou v řezu strukturou uspořádány do rovné linie). Část krystalové struktury porušené hranovou dislokací je trojrozměrně znázorněna na obrázku 23. Z tohoto obrázku je zřejmé, že hranová dislokace vede k porušení periodičnosti ve velkém objemu krystalové struktury.

Šroubová dislokace může vzniknout působením smykového napětí na víceméně dokonalou krystalovou strukturu, kdy je tato struktura porušena smykovou plochou. Na povrchu krystalu se šroubová dislokace projeví zakřivenou plochou, která se spirálovitě stáčí kolem linie dislokace (na obrázku 22 znázorněné červeně). Šroubové dislokace významně ovlivňují procesy růstu krystalů (podrobněji na straně 39).

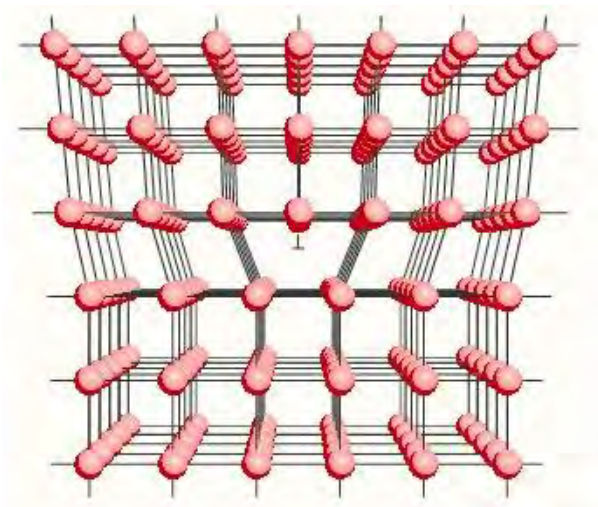


Obr. 22. Hranová dislokace (vlevo) a šroubová dislokace (vpravo). Zdroj: https://engineeringstuff.co.in/line-defects-imperfections-in-crystals/#google_vignette.

Upraveno.

Dislokace 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. Někdy lze mozaikovou (blokovou) stavbu krystalů pozorovat i makroskopicky (obr. 24). Defekty v krystalové struktuře se mohou projevit například i přítomností „štěrbín“, tj. prázdných dutin obvykle ploše čočkovitého tvaru, které sahají od povrchu krystalu do určité hloubky.



Obr. 23. Trojrozměrné zobrazení hranové dislokace v krystalové struktuře.

Zdroj:

https://www.researchgate.net/publication/236087059_Techniques_3D_imaging_of_crystal_defects



Obr. 24. Krystal pyritu, jehož členitý povrch svědčí o blokové stavbě; šířka snímku cca 8 mm. Ross County, Ohio, USA. Foto: John Rakovan.

3.7. Vznik a růst krystalu

Ke vzniku krystalu dochází dvojestupňovým procesem, který se skládá: i) z nukleace, tj. ze vzniku zárodku krystalu, ii) z růstu krystalu připojováním atomů a jejich skupin k tomuto zárodku.

Nukleace je z hlediska termodynamiky nejkomplicovanější etapou vzniku krystalu. Termínem nukleace jsou označovány procesy vzniku a růstu nuklea, tj. zárodku krystalu. Tento zárodek je jen nepatrným seskupením atomů, jejichž uspořádání odpovídá struktuře budoucího krystalu. Jde o velmi nestabilní seskupení atomů, které se může snadno rozpadnout. Ke vzniku zárodků může docházet různým způsobem.

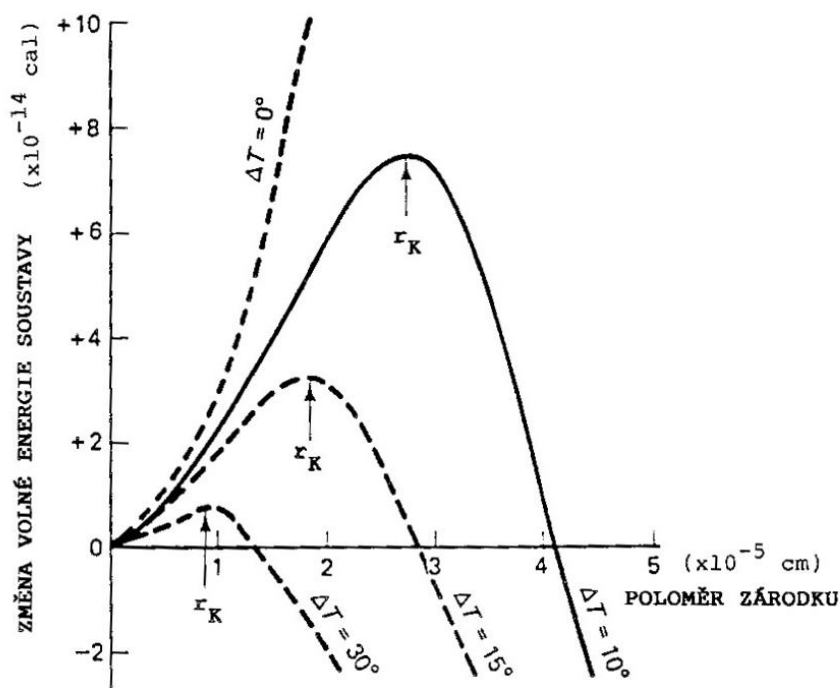
Spontánní (samovolná) nukleace je proces, při němž se vytvářejí zárodky krystalů v určitých oblastech nestabilní mateřské fáze, která může být kapalného, plynného nebo pevného skupenství. Hybnou silou spontánní nukleace je porušení rovnovážného stavu v dané soustavě, které je vyvoláno změnou fyzikálně chemických podmínek (např. poklesem teploty). Toto porušení rovnováhy může být vyjádřeno mírou přesycení, při němž se atomy, ionty nebo molekuly mohou vzájemně spojovat za vzniku zárodků. Při studiu spontánní nukleace probíhající v taveninách je často výhodnější vyjadřovat odchylku od rovnovážného stavu velikostí podchlazení. Velikostí podchlazení zde rozumíme rozdíl mezi rovnovážnou teplotou, při níž by se určitá pevná fáze mohla v soustavě poprvé objevit (při postupném ochlazování soustavy), a teplotou soustavy v daném okamžiku. Například při ochlazování magmatické taveniny bychom mohli očekávat vznik určitého minerálu při poklesu teploty na teplotu likvidu (viz soubor „06-genetická-mineralogie.pdf“, str. 663). Jeho krystalizace však při teplotě likvidu rozhodně nezačne. Bude-li teplota taveniny dále postupně klesat, dojde k podchlazení taveniny a až při určité velikosti podchlazení začne z taveniny krystalizovat očekávaný minerál.

Přítomnost zárodků v dané termodynamické soustavě zvyšuje volnou energii této soustavy, a proto jsou zárodky krystalů nestabilní a dochází snadno k jejich rozpadu. Za určitých podmínek se zárodky mohou zvětšovat a jejich velikost může překročit kritickou hodnotu, která se označuje jako **kritický poloměr zárodku**. Absolutní hodnota kritického poloměru závisí na látkovém složení zárodku, jeho struktuře, povaze okolního prostředí a na celé řadě vnějších faktorů.

Dosažení a překročení kritického poloměru má pro vznik krystalické látky zásadní význam. Připojování atomů k rostoucímu zárodku o poloměru menším než kritický poloměr vede ke zvyšování volné energie soustavy, a proto je rostoucí zárodek nestabilní a snadno dochází k jeho destrukci. Pokud však zárodek dosáhne velikosti odpovídající kritickému poloměru, stane se stabilním, protože připojování dalších atomů k jeho povrchu povede ke snižování volné energie soustavy. Dosažením kritického poloměru končí zárodečné stadium vzniku krystalu. Jinak řečeno, překročením kritického poloměru zárodek přestává být zárodkem a stává se krystalem, který může dále růst připojováním dalších stavebních částic k jeho povrchu (za současného snižování volné energie soustavy).

Absolutní velikost kritického poloměru zárodku závisí na mnoha faktorech. Na obrázku 25 je znázorněn vztah mezi velikostí kritického poloměru zárodku forsteritu $Mg_2[SiO_4]$ a velikostí podchlazení taveniny složením odpovídající forsteritu. Z obrázku 25 je zřejmé, že kritický poloměr zárodku klesá s rostoucím podchlazením, což mj. znamená, že čím větší je podchlazení taveniny, tím větší je pravděpodobnost, že zárodek připojováním dalších stavebních částic dosáhne rozměrů odpovídajících jeho kritickému poloměru za daných podmínek. I za podmínek vhodných pro nukleaci je však pravděpodobnost dosažení kritického poloměru zárodku jen velmi malá.

Spontánní nukleace má význam především při vzniku nerostů krystalizací z magmatu nebo lávy. Spontánní nukleaci z hydrotermálních roztoků se tvoří zárodky řady minerálů, které se podílejí na složení hydrotermálních žil (jde například o kalcit, dolomit, ankerit, fluorit, pyrit a chalkopyrit). Spontánní nukleací vytvořené zárodky mohou po dosažení určité velikosti klesat hydrotermálním roztokem a ukládat se na plochách dříve vytvořených krystalů – takto dochází například k pokrytí krystalů křemene tenkým povlakem složeným ze šupinek chloritu nebo k pokrytí krystalových ploch kalcitu jemným „popraškem“ pyritu nebo chalkopyritu.

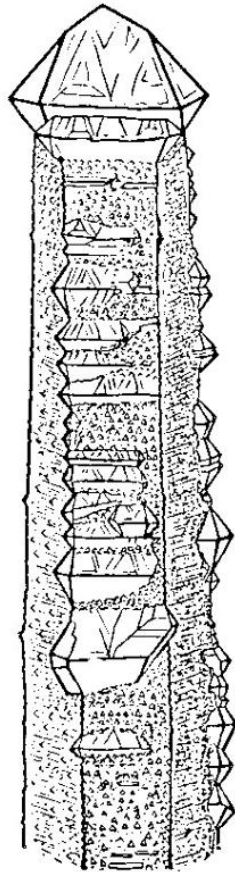


Obr. 25. Změna volné energie soustavy při nukleaci a následném růstu krystalu forsteritu z taveniny složením odpovídající forsteritu v závislosti na velikosti nuklea a krystalu při různém podchlazení taveniny (ΔT). Velikost kritického poloměru zárodku (r_K) při třech různých hodnotách podchlazení taveniny lze snadno odečíst. Křivky na obrázku byly sestaveny na základě výpočtů.

Často se zárodky krystalů tvoří na rozhraní dvou různých fází. Příkladem je **nukleace na povrchu kapaliny**, k níž dochází na hladině solných jezer a mořských zálivů. Odpařováním vody vzroste salinita povrchové vrstvy až na hodnotu, při níž je solanka přesycena například chloridem sodným. Na hladině solanky se tvoří zárodky krystalů halitu, jejichž dalším růstem vznikají větší individua a agregáty tohoto minerálu. Jiná příčina způsobuje nukleaci kalcitu na hladině jeskynních jezírek, jejichž voda obsahuje rozpuštěný $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$. Na hladině jeskynních jezírek dochází k úniku CO_2 , což vede k lokálnímu přesycení uhličitánem vápenatým a k nukleaci kalcitu. Následným růstem kalcitových zárodků se formují větší individua tohoto minerálu a jejich agregáty, které v podobě tenkého povlaku mohou pokrýt hladinu jezírka. Vznik kalcitu na hladině jeskynního jezírka vyjadřuje rovnice:

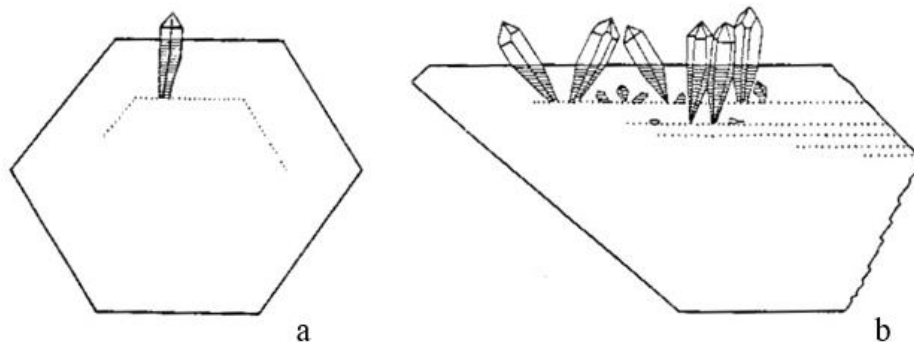


Spontánní vznik zárodků určitého minerálu je termodynamicky nevýhodný v soustavě, v níž již existují krystaly tohoto minerálu. V tomto případě dojde spíše k nukleaci na povrchu těchto krystalů, případně na jimi probíhajících trhlinách; centrem krystalizace se často stávají drobné úlomky téhož minerálu. K tomuto jevu běžně dochází například při vzniku hydrotermálních žil tvořených křemenem v horninách obsahujících křemen. Krystalizačními centry nezbytnými pro vznik relativně velkých zrn křemene v okrajových partiích žil jsou drobná křemenná zrna, která se nacházejí na okraji trhliny v hornině (později vyplněné žilnou mineralizací) a která jsou ve styku s hydrotermálním roztokem. Na obrázku 26 je znázorněn sloupcovitý krystal křemene, na jehož povrchu došlo k nukleaci a následnému vzniku mladších individuí křemene, která narůstají na podložní křemenný krystal v určité zákonité orientaci.



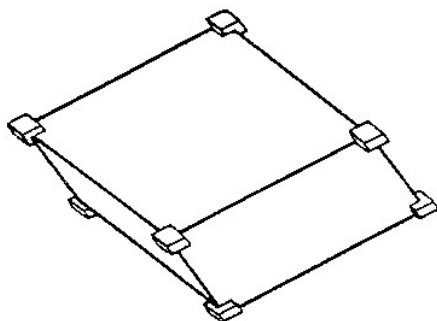
Obr. 26. Sloupcovitý krystal křemene, na nějž orientovaně narůstají mladší individua křemene (Grigorjev 1965).

Jak již bylo uvedeno, mohou se stát krystalizačním centrem nepatrné úlomky dříve vytvořených krystalů. V dutinách některých křemenných žil jsou relativně velké křemenné krystaly, na jejichž vrchních plochách narůstají drobné krystaly křemene mladší generace. Na obrázku 27a je znázorněn příčný řez velkým krystalem křemene, na jehož krystalovou plochu dopadl během jeho růstu nepatrný úlomek křemene, který se stal zárodkem pro růst krystalu mladší generace křemene. Pokud na povrch rostoucího krystalu křemene dopadne větší počet křemenných úlomků, může se vytvořit drúza krystalů křemene – takto vytvořená drúza je schematicky znázorněna na obrázku 27b, z něhož je zřejmé, že k dopadu úlomků křemene na plochu rostoucího křemenného krystalu došlo ve dvou různých obdobích.

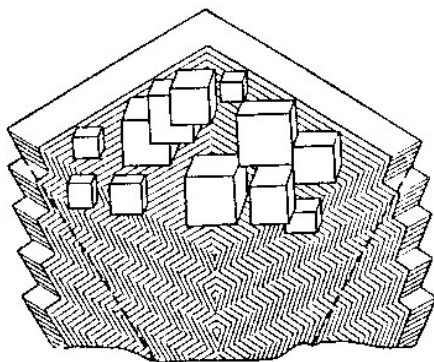


Obr. 27. Vznik krystalů křemene růstem drobných úlomků křemene, které dopadly na povrch rostoucího křemenného krystalu. Vysvětlení v textu.

Při vzniku krystalu určitého minerálu se může stát „zárodkem“ i krystal jiného nerostného druhu. V těchto případech dochází k narůstání jednoho minerálu na druhý, přičemž vzájemná orientace obou minerálů je zákonitá, určená jejich krystalovými strukturami. Zákonité narůstání jednoho minerálu na druhý se označuje jako **epitaxie** (případně **epitaxe**, **epitaktické narůstání**). Na obrázku 28 je znázorněn velký klencec rodochrozitu, na nějž v rozích epitakticky narůstají drobné klence dolomitu (rohy rodochrozitového krystalu se tedy staly krystalizačními centry dolomitu). Obrázek 29 znázorňuje epitaktické narůstání hexaedrů pyritu na krystal markazitu, obrázky 30 a 31 dokumentují epitaxii rutilu na hematitu, obrázek 32 epitaxii staurolitu na kyanitu. Ve všech uvedených případech jde o narůstání mladšího minerálu na krystaly staršího minerálu, jejichž růst byl již ukončen. Pokud růst obou minerálů v zákonité orientaci pokračuje, jde o **epitaktické prorůstání**, jehož příkladem je prorůstání křemene a ortoklasu na obrázku 33 – takto vzniká grafická (písmenková) struktura (obr. 34), charakteristická pro granitové pegmatity.



Obr. 28. Drobné krystaly (klence) dolomitu epitakticky narůstající na rozích velkého krystalu rodochrozitu.



Obr. 29. Drobné hexaedry pyritu epitakticky narůstající na krystalu markazitu.



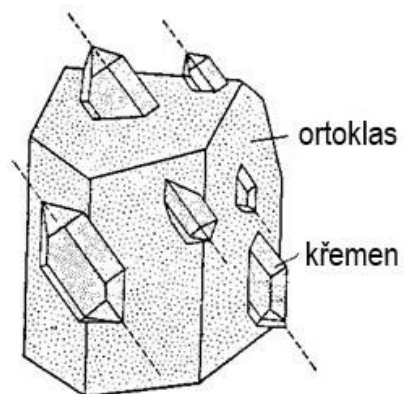
Obr. 30. Epitaktické narůstání rutilu (žlutý) na tabulku hematitu (černý); šířka snímku cca 45 mm. Novo Horizonte, Bahia, Brazílie. Foto: Fabre Minerals.



Obr. 31. Orientované narůstání (epitaxie) jehlic rutilu na hematit; šířka snímku cca 40 mm. Novo Horizonte, Bahia, Brazílie. Foto: John H. Betts.



Obr. 32. Orientované narůstání (epitaxie) staurolitu (hnědý) na kyanit (světle modrý); šířka snímku cca 10 mm. Údolí řeky Chironico, Ticino, Švýcarsko. Foto: Dominik Schläfli.



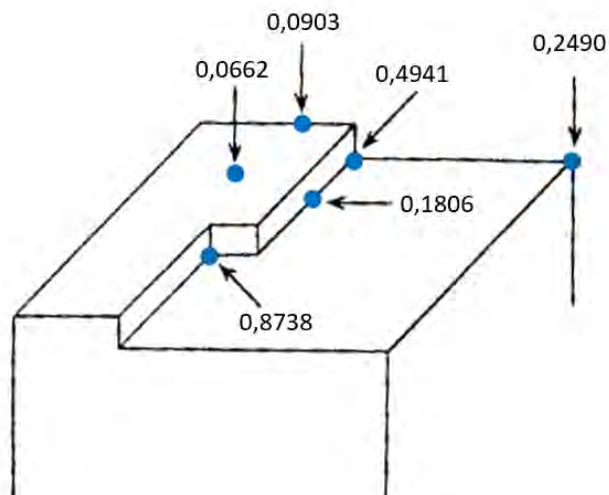
Obr. 33. Epitaktické prorůstání křemene a ortoklasu.



Obr. 34. Grafická (písmenková struktura) vznikající zákonitým prorůstáním křemene (na obrázku tmavě šedý – „záhnědovitý“) a draselného živce (ortoklasu) v pegmatitu; šířka snímku cca 150 mm (odhad). Brunswick, Maine, USA.
Foto: James St. John.

K růstu krystalu dochází připojováním stavebních částic k jeho povrchu. Lze rozlišit dva hlavní způsoby růstu: i) růst postupným přikládáním stavebních částic do souvislých vrstev na ideálně vyvinutých krystalových plochách, ii) spirálový růst krystalu.

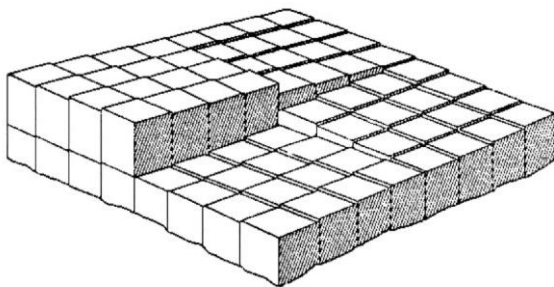
Teorie vysvětlující růst krystalu postupným připojováním částic do souvislých vrstev na ideálních krystalových plochách se často označuje jako Kosselova teorie, příp. jako teorie Kossela a Stranškiho. Základem této teorie je poznatek, že během růstu krystalu z roztoku dochází nejen k připojování stavebních částic k jeho povrchu, ale vlivem tepelných pohybů též k odtrhávání částic již dříve připojených. Podle této teorie dochází ke vzniku nové vrstvy krystalu uložением stavebních částic na vhodném místě krystalové plochy. Připojení každé částice k povrchu krystalu je provázeno uvolněním určitého množství energie. Na obrázku 35 je znázorněn krystal halitu, na jehož vrchní ploše se formuje nová vrstva. Množství energie, které se uvolní připojením iontů do jedné ze šesti znázorněných pozic, je vyjádřeno relativními hodnotami. Předpokládejme nyní, že se k rostoucímu krystalu připojí další iont. Energeticky nejvýhodnějším místem pro jeho připojení je bod, v němž se uvolní největší množství energie. V našem případě jde o bod, v němž má množství uvolněné energie hodnotu 0,8738. Pro připojení iontu je energeticky nejméně výhodný bod s nejmenším množstvím uvolněné energie. Je to bod na povrchu rovné krystalové plochy (hodnota uvolněné energie je 0,0662). Pokud se iont připojí v tomto bodě, případně v analogickém bodě na povrchu krystalu, je velmi pravděpodobné, že vlivem tepelných kmitů dojde k jeho opětovnému odtržení.



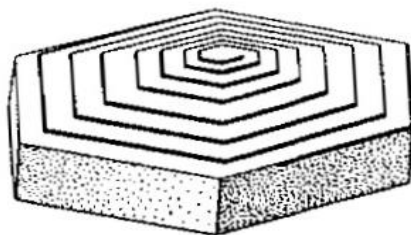
Obr. 35. Množství energie (v relativních hodnotách) uvolněné při připojení iontu na různá místa rostoucího krystalu halitu.

Představme si nyní, že máme ideálně vyvinutý krystal halitu se zcela „dokončenými“ krystalovými plochami (krystalové plochy jsou dokonale souvislé a nechybí v nich žádná stavební částice). K tomuto krystalu se má připojit stavební částice (tj. iont Na^+ nebo Cl^-). Existují tři typy bodů na povrchu krystalu, v nichž se tato částice může připojit: roh krystalu, krystalová hrana, krystalová plocha. Z obrázku 35 je zřejmé, že z energetického hlediska je nejvýhodnější připojení částice na roh, méně výhodné je připojení na hranu a ještě méně energeticky výhodné je připojení částice na plochu. Místo, v němž se na krystalovou plochu připojí první částice nové vrstvy, se označuje jako generativní bod (je jím zpravidla roh krystalu). V generativním bodě začíná formování nové vrstvy, neboť k částici připojené v tomto bodě se připojují další částice, protože takto dochází k uvolňování relativně velkého množství energie (srovnej hodnoty na obrázku 35). Dalším připojováním částic se postupně vytvoří zcela souvislá vrstva.

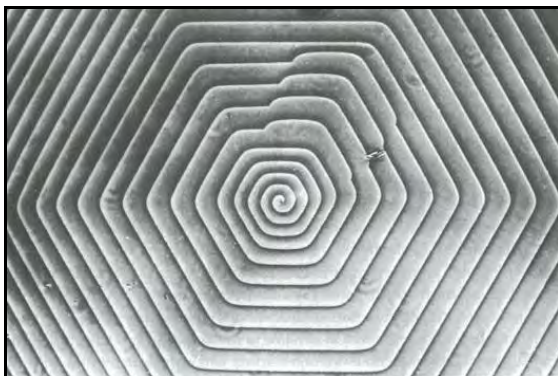
Spirálový růst krystalu vyžaduje přítomnost šroubových, příp. hranových dislokací v jeho struktuře (viz strana 31). Charakter plochy krystalu se šroubovou dislokací je schematicky znázorněn na obrázku 36. Připojováním stavebních částic do energeticky nejvýhodnějších pozic dochází k spirálovému růstu krystalové plochy (v případě krystalové plochy na obrázku 36 bude její růst neustále postupovat proti směru hodinových ručiček). Teorii spirálového růstu lze vysvětlit skutečností, že k růstu krystalu dochází i při minimálním přesycení roztoku, které je tak malé, že krystal nemůže růst v souladu s teorií Kossela (jen velmi malé přesycení roztoku neumožňuje založení nové vrstvy na ideálně vyvinuté krystalové ploše). Spirálový růst se projevuje tzv. růstovými spirálami na povrchu krystalových ploch (obr. 37 a 38).



Obr. 36. Schematické znázornění krystalové plochy se šroubovou dislokací.



Obr. 37. Růstová spirála na povrchu krystalu (idealizované schéma).



Obr. 38. Mikrofotografie růstové spirály na povrchu krystalu hexagonálního karbidu křemíku (syntetický SiC).

Zdroj:

www.phys.nthu.edu.tw/~spin/course/105F/Ch1-2-Tina.pdf

V průběhu růstu krystalu se k jeho povrchu postupně připojují stavební částice. To znamená, že centrální část krystalu je nejstarší, zatímco jeho povrchová vrstva je nejmladší. Částice, které se připojily k někdejšímu povrchu rostoucího krystalu v relativně krátkém časovém úseku, tvoří v krystalu určitou zónu.

Krystalizace nikdy neprobíhá za zcela konstantních podmínek. V průběhu krystalizace se mění řada fyzikálně chemických parametrů (teplota, tlak, chemické složení okolního prostředí atd.), a proto se jednotlivé zóny krystalu mohou od sebe lišit chemickým složením a strukturou (často jen zcela nepatrně).

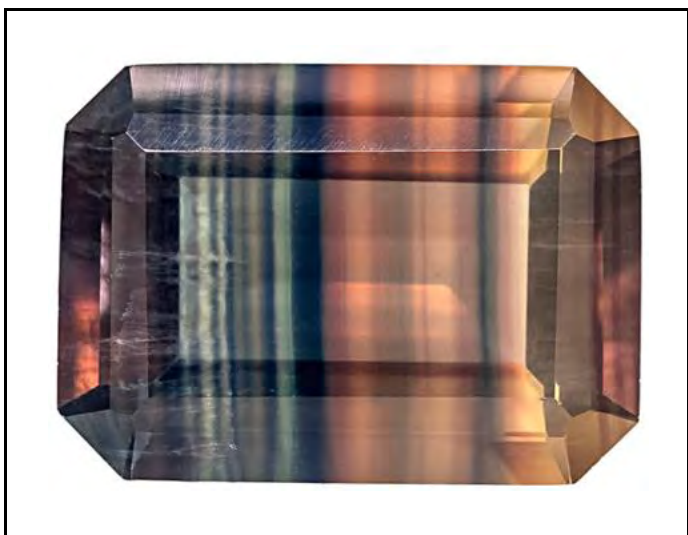
Zonální stavba krystalu může být pozorovatelná i makroskopicky, pokud se projevuje rozdílným zbarvením jednotlivých zón, tj. zonálním zbarvením. Velmi výrazné zonální zbarvení mívají například krystaly turmalínu, na nichž lze ve směru od centra krystalu k jeho okraji pozorovat sled například takto zbarvených zón: černá zóna (skoryl) – modrá zóna (indigolit) – zelená zóna (verdelit) – bezbarvá zóna (achroit) – růžová zóna (rubelit). Nutno poznamenat, že indigolit, verdelit, achroit a rubelit jsou různě zbarvené variety elbaitu (elbait je minerálem náležejícím do skupiny turmalínu). Výraznou barevnou zonálností krystalu elbaitu dokumentuje obrázek 39. Barevně zonální mohou být například také krystaly fluoritu (obrázky 40 a 41).



Obr. 39. Barevně zonální krystal elbaitu; šířka snímku cca 55 mm. Skardu Road, Gilgit District, Baltistan, Pákistán. Foto: John H. Betts.



Obr. 40. Barevně zonální krystaly fluoritu; šířka snímku 50 mm. Důl Minerva #1, Cave-in-Rock, Hardin County, Illinois, USA. Foto: John H. Betts.



Obr. 41. Osmiúhelníkový brus zhotovený z barevně zonálního fluoritu. Foto: www.gemstones.com.

Poznámka

Ve výbrusech studovaných pomocí mikroskopu se zonální stavba krystalů někdy zřetelně projevuje díky rozdílným optickým vlastnostem různých zón (např. rozdílným pleochroismem, indexem světelného lomu nebo dvojlomem – vysvětlení těchto termínů je souboru „12-metody-výzkumu-minerálů-a-hornin.pdf“ na stranách 896 až 906). Ve výbrusech magmatických hornin lze často pozorovat zonální stavbu některých hlavních horninotvorných minerálů – například amfibolů, pyroxenů, olivínu a zejména plagioklasů, jejichž zonálnost je dána různým poměrem složek Ab a An v jednotlivých zónách krystalu (obr. 1792 v souboru souboru „12-metody-výzkumu-minerálů-a-hornin.pdf“). Nejlépe lze zonálnost krystalů prokázat chemickou analýzou jednotlivých zón (např. pomocí elektronové mikrosondy). Někdy je však nutno k prokázání zonálnosti použít speciální metody, jejichž příkladem může být sledování izotopového složení olova v různých zónách krystalu galenitu nebo sledování luminiscence vyvolané RTG-zářením například při studiu zonální stavby krystalů diamantu.

Zonální stavba krystalu může být makroskopicky pozorovatelná i díky heterogenním příměsem. Jde například o šupinky chloritu nebo hematitu v určitých zónách krystalů křemene. Krystaly křemene nebo jejich určité zóny mohou být těmito uzavřeninami výrazně zbarveny – přítomnost chloritu se obvykle projevuje zeleným zbarvením (obr. 42), jemné šupinky hematitu způsobují oranžové nebo červené zbarvení (obr. 43). V případě minerálů

hydrotermálního původu je jejich zonálnost často zvýrazněna zvýšenou koncentrací plynokapalných uzavření (tzv. fluidních inkluzí) v některých zónách krystalů. Například v krystalech křemene se přítomnost většího množství plynokapalných uzavření v určitých zónách projevuje jejich zakalením až mléčně bílým zbarvením, zatímco zóny s nepatrným množstvím těchto uzavření mohou být bezbarvé.



Obr. 42. Křemen zeleně zbarvený uzavřeními chloritu; šířka snímku 75 mm. Seriphos, Řecko.
Foto: Albert Russ.



Obr. 43. Křemen oranžově zbarvený uzavřeními hematitu; šířka snímku cca 140 mm. Dalnegorsk, Rusko.
Foto: Kevin Ward.

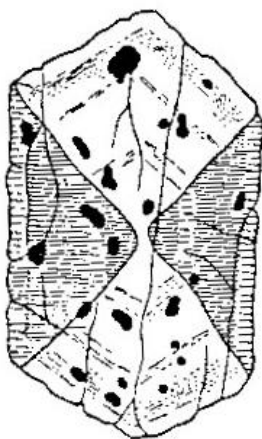
Při růstu krystalu dochází k připojování stavebních částic na plochách, hranách a rozích krystalu. Protože různé plochy, rohy a hrany mají různé vlastnosti, není složení určité zóny krystalu zcela totožné. Tímto způsobem vzniká při růstu krystalu sektorová stavba. Jednotlivé sektory se od sebe mohou lišit charakterem a množstvím izomorfních (diadochních) příměsí nebo mechanických (heterogenních) příměsí, povahou a množstvím dislokací apod. Růstem libovolné plochy krystalu postupně vzniká tzv. pyramida růstu (růstová pyramida). Počet pyramid růstu je totožný s počtem právě rostoucích krystalových ploch.

Ve výjimečných případech je sektorová stavba krystalů nápadná již makroskopicky. Příkladem jsou krystaly sádrovce s příměsí jílových částic, které byly při růstu krystalu přednostně zachycovány určitými plochami. Tím se v krystalech vytvořily pyramidy růstu (sektory) obohacené jílovými částicemi – tyto sektory svou morfologií často připomínají přesýpací hodiny, a proto se struktura takových krystalů označuje jako „struktura přesýpacích

hodin“. Tato struktura je nejlépe pozorovatelná na řezech proložených osou protilehlých růstových pyramid. Na obrázku 44 je krystal sádrovce se strukturou přesýpacích hodin, velikost uzavřenin v tomto případě odpovídá jílovým částicím až velmi drobným zrnům písku. Struktury přesýpacích hodin jsou poměrně časté v krystalech některých pyroxenů (například v krystalech augitu – viz schematický obrázek 45 a též obrázek 1791 v souboru „12-metody-výzkumu-minerálů-a-hornin.pdf“).

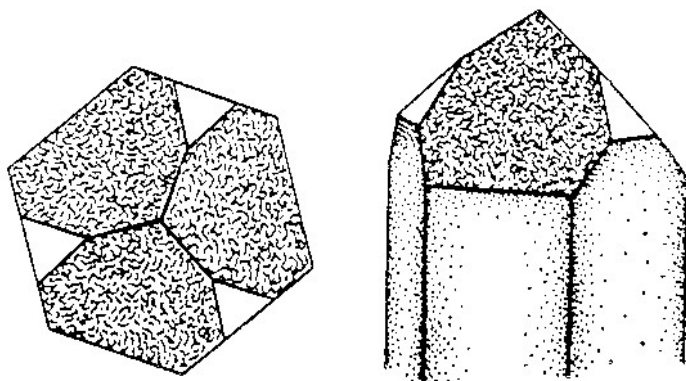


Obr. 44. Sektorová stavba krystalu sádrovce (struktura přesýpacích hodin); šířka snímku cca 28 mm. Great Salt Plains, Jet, Alfalfa County, Oklahoma, USA. Foto: Maggie Wilson.



Obr. 45. Sektorová stavba krystalu pyroxenu (augitu).

Rozdílnou absorpční schopností různých krystalových ploch křemene vzniká sektorová stavba ametystu. Fialové zbarvení této odrůdy křemene je způsobeno (alespoň v některých případech) heterogenní příměsí hematitu. Při růstu krystalu křemene (ametystu) se hematit přednostně ukládá na plochách tzv. pozitivního klence, na hranách mezi plochami prizmatu a také na hranách mezi prizmatickými plochami a plochami klence (obr. 46).



Obr. 46. Schematické znázornění vzniku sektorové stavby krystalu ametystu. Hematit (znázorněný černě) se během růstu krystalu ukládá jen na některých krystalových plochách.

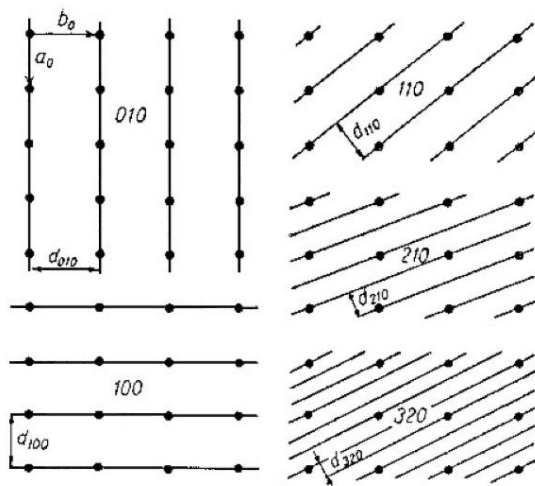
Výraznou sektorovou stavbu, která se projevuje různým zbarvením sektorů, mají některé krystaly topazu. Makroskopicky pozorovatelná sektorová stavba krystalů topazu je způsobena připojováním rozdílných izomorfních příměsí na různých plochách rostoucího krystalu. Izomorfní příměsí Fe^{3+} jsou některé růstové pyramidy (sektory) zbarveny růžově až růžově hnědě, zatímco jiné sektory jsou izomorfní příměsí Fe^{2+} zbarveny modře.

3.8. Rychlost růstu krystalu

Krystaly, které rostou volně například v kapalném prostředí nebo v plynu, samovolně přijímají tvar mnohostěnu, jehož plochy jsou vždy rovnoběžné s mřížkovými rovinami a jehož hrany jsou rovnoběžné s uzlovými přímkami. Avšak jen některé mřížkové roviny se projeví na vnějším tvaru krystalu jako krystalové plochy. Krystaly jsou zpravidla omezeny plochami, které odpovídají mřížkovým rovinám s vysokou retikulární hustotou (retikulární hustota je dána počtem uzlů mřížkové roviny na jednotku plochy – viz poznámka v rámečku). Vysoká retikulární hustota znamená krátké a pevné vazby se sousedními částicemi v mřížkové rovině. Částice na krystalových plochách s vysokou retikulární hustotou mají jen relativně malou volnou povrchovou energii. Rostoucí krystal má tendenci obklopit se plochami s nejnižší volnou povrchovou energií.

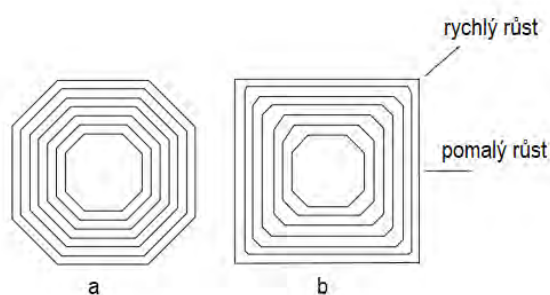
Poznámka

Mřížkové roviny s vysokou retikulární hustotou jsou obvykle roviny s nízkými indexy, jako například 100, 010, 001, 110 atd. Proto jsou plochy s nízkými indexy obvykle největšími plochami na krystalu. Plochy odpovídající mřížkovým rovinám s vyššími indexy a současně s nízkou retikulární hustotou (např. 210, 211, 321, 114 atd.) se na krystalech vyskytují jen zřídka jako hlavní plochy – pokud jsou tyto plochy na krystalech přítomny, jde v mnoha případech jen o relativně velmi malé plošky, které utínají rohy nebo hrany krystalu.



Retikulární hustota je přímo úměrná mezirovinné vzdálenosti d . Nejvyšší retikulární hustoty mají mřížkové roviny s nízkými indexy. (Nepřesně lze říci, že nízké indexy jsou ty, v nichž jsou dvě nuly a jednička nebo jedna nula a dvě nízké číslice.) Na připojeném obrázku je vyznačeno pět různých mřížkových rovin. Nejvyšší retikulární hustotu zde mají mřížkové roviny 010 a 100, nejnižší retikulární hustota je v případě mřížkové roviny 320.

Rychlost růstu krystalu lze charakterizovat rychlostí růstu jeho ploch, pod níž rozumíme velikost přírůstku na určité ploše ve směru k ní kolmém za jednotku času (rychlost růstu plochy je tedy dána mocností zóny přirostlé k dané ploše za jednotku času). Rychlost růstu krystalových ploch různých tvarů v určitém časovém intervalu je obecně různá (lze hovořit o anizotropii rychlosti růstu). Plochy s relativně velkou volnou povrchovou energií rostou relativně rychle. Proto jsou tyto plochy při růstu krystalu postupně zatlačovány plochami s relativně malou volnou povrchovou energií, tj. plochami s nižšími rychlostmi růstu. Zatlačování rychle rostoucích ploch na krystalu způsobuje, že se v průběhu růstu krystalu často snižuje počet ploch, které jej omezují (obr. 47).



Obr. 47. Schematické znázornění vlivu rozdílné rychlosti růstu krystalových ploch na morfologii krystalu. Na obrázcích jsou v řezu dvěma různými krystaly (a, b) vyznačena rozhraní jednotlivých růstových zón. V počátečním stadiu růstu má řez oběma krystaly charakter osmiúhelníka. Je-li rychlost růstu všech ploch stejná (a), geometrie krystalu se během růstu nemění (krystal se pouze zvětšuje). Při různé rychlosti růstu (b) rychleji rostoucí plochy postupně zanikají.

3.9. Polymorfie a polytypie

Na úrovni základní školy lze polymorfii označit za jev, kdy určitá chemická látka tvoří krystaly, které náleží do dvou nebo více soustav. Formulováno jinak: polymorfie je schopnost látky krystalizovat ve dvou nebo více soustavách. Krásným příkladem polymorfie pro žáky základní školy je dvojice grafit a diamant. Oba minerály mají shodné složení – jde o strukturně odlišné formy uhlíku, tedy chemické složení grafitu i diamantu lze vyjádřit značkou C. Řečeno jinak, grafit a diamant jsou dvě modifikace uhlíku. Obecně platí, že modifikace mají stejné chemické složení, ale odlišnou krystalovou strukturu. Tvoří-li látka dvě nebo více modifikací, pak je tato látka polymorfní. Jde-li právě o dvě modifikace, lze tuto látku označit jako dimorfní, jde-li o více než dvě modifikace, užíváme jedině termín polymorfní (tedy termín „trimorfní“ apod. neexistuje).

Postupme nyní z úrovně základní školy na vyšší „level“ a definujme polymorfii přesněji. Polymorfie je jev, kdy jedna chemická sloučenina tvoří krystaly ve dvou nebo více prostorových grupách. Není cílem tohoto textu definovat prostorovou grupu. Nutno je však uvést, že existuje obrovské množství krystalických látek, které se liší svou krystalovou strukturou. Existuje však „pouze“ 230 typů symetrie krystalových struktur, které jsou ve strukturní krystalografii označovány jako prostorové grupy. Každá krystalická látka (nejen minerál) má pro ni charakteristickou krystalovou strukturu, která náleží k jedné z oněch 230 prostorových grup. Prostorové grupy se na základě určitých společných znaků seskupují do 32 bodových grup, označovaných v morfologické krystalografii jako krystalová oddělení. Tato krystalová oddělení vytvářejí 7 krystalových soustav. Z uvedeného plyne například to, že dvě modifikace jedné a téže látky mohou náležet do stejné krystalové soustavy nebo dokonce do stejného krystalového oddělení.

Termín polymorfie se týká sloučenin, tedy dvojice grafit a diamant není dobrým příkladem. Chceme-li být terminologicky zcela přesní, pak v případě sloučenin musíme termín „modifikace“ nahradit termínem „polymorfní modifikace“. Příkladem polymorfie jsou dvě polymorfní modifikace CaCO_3 (trigonální kalcit a rombický aragonit), dvě polymorfní modifikace FeS_2 (kubický pyrit a rombický markazit) a také tři polymorfní modifikace Al_2SiO_5 (rombický andaluzit, rombický sillimanit a triklinický kyanit).

Termín polymorfie by v souvislosti s modifikacemi prvků neměl být užíván. Analogický jev u prvků je označován jako **alotropie**. Modifikace v případě prvků by měly být terminologicky přesně označovány jako alotropické modifikace. Příkladem alotropie může být již výše zmíněná dvojice grafit a diamant. Zatímco diamant krystaluje v kubické soustavě, grafit je hexagonální nebo trigonální (v závislosti na polytypu – viz níže).

Poznámka

Je zcela běžné, že mineralogové termíny „polymorfni modifikace“ a „alotropická modifikace“ nepoužívají a nahrazují je obecným termínem „modifikace“. Tedy grafit a diamant jsou dvě modifikace uhlíku. Kalcit a aragonit jsou dvě modifikace uhličitanu vápenatého. U chemiků tato terminologická nepřesnost zpravidla vzbuzuje nelibost.

Polytypie je speciálním případem polymorfie. K polytypii může docházet ve vrstevnatých strukturách. Tyto vrstevnaté struktury jednotlivých minerálů jsou sestaveny ze shodných vrstev, které mohou být na sebe „naskládány“ různým způsobem. Obvykle se ve struktuře pravidelně opakují sekvence složené z určitého počtu vrstev. U jednoho a téhož minerálu tyto sekvence mohou mít různý charakter, tento minerál tedy může tvořit několik polytypů, které se určitým způsobem liší svou strukturou a které mohou náležet do různých krystalových soustav.

Polytypy se označují symboly, které jsou složeny z čísla udávajícího počet vrstev v sekvenci, velkého písmene vyjadřujícího krystalovou soustavu, do níž tento polytyp patří, a případně z čísla v dolním indexu, které slouží k odlišení dvou polytypů s drobnými odchylkami ve struktuře. Symboly polytypů mají obecně tvar nX , kde n udává počet vrstev tvořících jednu sekvenci (která se ve struktuře opakuje), X vyjadřuje krystalovou soustavu příslušným symbolem: A nebo TC = triklinická soustava, M = monoklinická soustava, OR nebo O = rombická soustava, Q nebo TT = tetragonální soustava, H = hexagonální soustava, T nebo R = trigonální soustava, C = kubická soustava.

Příkladem polytypie je grafit, u něž existují polytypy grafit- $2H$ (hexagonální polytyp grafitu) a grafit- $3R$ (trigonální polytyp grafitu). Polytypie je typická pro silikáty s vrstevnatými strukturami (tzv. fylosilikáty), jejichž reprezentantem jsou slídy, například muskovit. U muskovitu jde o dva polytypy, označované jako muskovit- $2M_1$ a muskovit- $2M_2$ (tedy jde o dva monoklinické polytypy s nepatrným rozdílem ve struktuře). Uvedené příklady ukazují, že v symbolu polytypu by zkratka vyjadřující soustavu měla být psána kurzívou, často se to však nedodrží.

3.10. Fázové pravidlo a fázové diagramy

Fáze je homogenní část heterogenní termodynamické soustavy, která je od ostatních částí této soustavy oddělena rozhraním, v němž se vlastnosti soustavy mění nespojitě, tedy skokem. Fáze je část soustavy, která se od ostatních fází odlišuje fyzikálně a případně i chemicky. Různá skupenství vody jsou různé fáze i při stejném chemickém složení. Chemicky rozdílné látky pevného skupenství jsou považovány za různé fáze. Také vzájemně nemísitelné kapaliny jsou různé fáze (například soustava éter + voda má dvě fáze, neboť promícháme-li tyto dvě kapaliny v kádince, rychle se obě od sebe oddělí a vytvoří dvě samostatné vrstvy). Každá směs plynů je díky jejich povrchové neohraňovanosti jen jednou fází. Za různé fáze je nutno považovat i různé polymorfni modifikace téže sloučeniny (např. aragonit a kalcit jsou dvě různé fáze o složení CaCO_3) a také různé alotropické modifikace téhož prvku (například grafit a diamant, nebo různé modifikace síry). Pevné fáze téhož chemického složení se

zpravidla označují řeckými písmeny α , β , γ atd., a to postupně od nejvyšeteplotních fází k těm nížeteplotním (toto pravidlo má však řadu výjimek – například vysokoteplotní křemen se označuje jako β -křemen, nízkoteplotní křemen jako α -křemen).

Podle počtu fází v soustavě rozlišujeme **homogenní soustavy**, které jsou tvořeny jen jednou fází, a **heterogenní soustavy**, které se skládají nejméně ze dvou fází. Homogenní soustavy se často označují jako jednofázové soustavy. Heterogenní soustavy jsou označovány jako vícefázové soustavy.

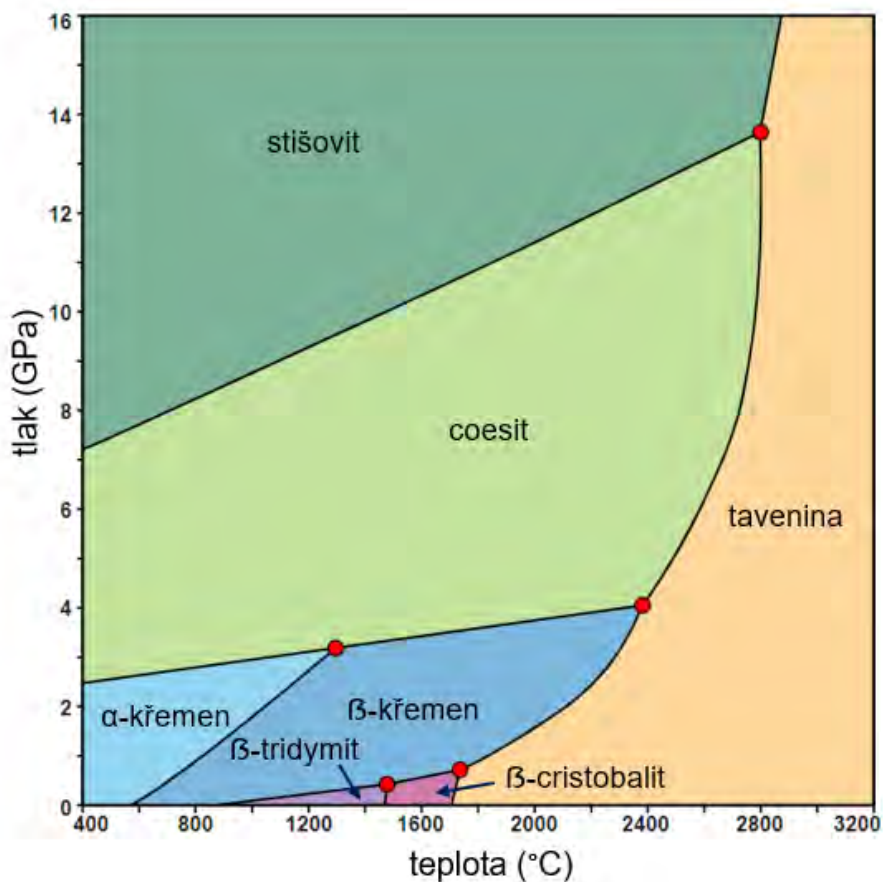
Chemické složení soustavy a všech fází v soustavě se vyjadřuje pomocí složek (komponent). **Složky** jsou jednotlivé chemické prvky, skupiny nebo sloučeniny, jejichž chemické vzorce jsou voleny tak, aby bylo možno vyjádřit složení všech fází v soustavě co nejmenším počtem složek. Pokud sledujeme jen určitou část soustavy, často dochází k situaci, že tato část soustavy obsahuje méně fází než celá soustava – v tomto případě lze k vyjádření chemického složení všech fází ve sledované části soustavy použít menšího počtu složek než k vyjádření chemického složení všech fází v celé soustavě (obvykle dochází i k tomu, že k popisu určité části soustavy volíme jiné složky než k popisu celé soustavy). Počet složek je jednou z hlavních charakteristik soustavy. Rozlišují se jednosložkové (unární), dvojsložkové (binární), trojsložkové (ternární) a vícesložkové (polykomponentní) soustavy, přičemž vícesložkové soustavy jsou tvořeny minimálně čtyřmi složkami. Příkladem jednosložkové soustavy je soustava znázorněná na obrázku 48, v níž dochází k polymorfním přeměnám SiO_2 , neboť složení všech fází ve vyobrazené části soustavy lze vyjádřit jedinou složkou s chemickým vzorcem SiO_2 . Podobně v části soustavy, v níž sledujeme vzájemné vztahy mezi kyanitem, sillimanitem a andalusitem (obr. 49), lze složení všech tří fází vyjádřit jen jedinou složkou s chemickým vzorcem Al_2SiO_5 – ve sledovaném úseku tedy jde opět o jednosložkovou soustavu a je zcela nevhodné vyjadřovat složení fází této soustavy jiným způsobem (například pomocí složek Al_2O_3 a SiO_2 nebo dokonce pomocí složek Al, Si a O). Příkladem dvojsložkové soustavy je systém tvořený složkami $\text{Na}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$ a $\text{Ca}[\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8]$, charakterizovaný v souboru „06-genetická-mineralogie.pdf“, na stranách 663 až 665.

Pod pojmem **počet volností fázové asociace** rozumíme počet intenzitních stavových veličin (například tlak a teplota), které je možno v určitém rozpětí spojitě a nezávisle měnit, aniž se změní počet a druh fází rovnovážně koexistujících v dané asociaci. Podle počtu volností rozlišujeme **invariantní fázové asociace** (počet volností = 0), **univariantní fázové asociace** (počet volností = 1), **divariantní fázové asociace** (počet volností = 2), **trivariantní fázové asociace** (počet volností = 3) atd.

Fázové pravidlo (podle svého autora často označované jako Gibbsovo fázové pravidlo) udává vztah mezi počtem fází a složek v rovnovážné soustavě. Fázové pravidlo je vyjádřeno rovnicí $F + V = S + 2$, kde F = počet koexistujících fází, V = počet volností a S = počet složek. Fázové pravidlo tedy říká, že v rovnovážné soustavě je suma fází a volností rovna počtu složek zvětšenému o dvě.

Fázové diagramy jsou n -rozměrné geometrické útvary, do nichž jsou vyneseny rovnovážné fázové asociace (převážně stabilní, výjimečně i metastabilní) jako funkce stavových veličin – zpravidla jde o intenzitní stavové veličiny jako je tlak, teplota, aktivita, fugacita a dále o proměnné vyjadřující chemické složení. Způsob konstrukce a prezentace fázových diagramů je různý. Fázové diagramy jednosložkových soustav jsou poměrně jednoduché, neboť všechny rovnovážné fázové asociace lze znázornit plošným diagramem (jsou zde jen dvě proměnné stavové veličiny, z nichž jedna se vynáší na vodorovnou osu diagramu, druhá na svislou osu diagramu). Pro znázornění dvojsložkové soustavy potřebujeme trojrozměrný (prostorový) diagram, do něž lze vynést již tři proměnné, tj. teplotu, tlak a poměrné zastoupení obou složek soustavy, které vyjádříme jediným molárním zlomkem. U trojsložkové soustavy může jít o čtyři proměnné (tlak, teplotu a dva molární zlomky).

Fázové diagramy složitých soustav se třemi a více proměnnými se vhodným způsobem redukuje nebo jsou rozděleny do několika grafů, které například vyjadřují příslušné závislosti při určité konstantní teplotě (jde o tzv. izotermální řezy) nebo při určitém konstantním tlaku (jde o tzv. izobarické řezy) apod.



Obr. 48. Fázový diagram SiO_2 s poli stability různých modifikací SiO_2 a polem taveniny. Trojné body jsou zvýrazněny červeně. Zdroj: <https://www.science.smith.edu/~jbrady/petrology/igrocks-diagrams/unary/SiO2.php>. Upraveno.

Jednosložkové soustavy reprezentují různé skupenské stavy jedné složky nebo různé modifikace určité látky spolu s různými skupenskými stavy. Úplné fázové diagramy jednosložkových soustav jsou dvojrozměrné, jejich proměnnými jsou tlak a teplota.

Příkladem fázového diagramu jednosložkové soustavy je na obrázku 48 znázorněný fázový diagram SiO_2 . Tento diagram byl sestaven na základě experimentů, během nichž se při postupně měnící teplotě a postupně měnícím tlaku sledovalo, jaké fáze jsou za daných podmínek v soustavě SiO_2 přítomny. Pokud byly zjištěny dvě nebo i tři koexistující fáze, byl do grafu vnesen bod o souřadnicích odpovídajících hodnotám obou intenzitních veličin, tj. teploty a tlaku. Experimentálně bylo takto získáno velké množství bodů, jejichž spojením vznikly tzv. **univariantní křivky**, které jsou znázorněny na obrázku 48. Tyto křivky oddělují pole stabilit jednotlivých fází, například pole α -křemene a β -křemene. Z diagramu na obrázku 48 je zřejmé, že za teplot a tlaků obvyklých na zemském povrchu je jedinou stabilní modifikací SiO_2 α -křemen. Předpokládejme nyní, že jsme v prostředí, kde teplota a tlak odpovídají zhruba centrální části pole α -křemene. Velikost tlaku můžeme nyní měnit v určitém intervalu hodnot a stejně tak můžeme měnit v určitém intervalu i teplotu, aniž by došlo k fázové změně. Za výše uvedených termodynamických podmínek je v této soustavě stabilní jen jedna fáze. Jinak řečeno, i když to zní podivně, stabilní fázová asociace je tvořena

jednou fází. Je to dáno platností fázového pravidla, neboť v tomto případě $V = 2$ (jde o divariantní fázovou asociaci, protože v určitém rozpětí se zde nezávisle na sobě mohou měnit dvě intenzitní stavové veličiny), $S = 1$ (jde o jednosložkovou soustavu) a tudíž počet koexistujících fází (F) musí být roven 1. Všimněme si nyní univariantní křivky, která na obrázku 48 odděluje pole α -křemene a pole coesitu. Pokud bude teplota a tlak odpovídat libovolnému bodu, jenž leží na této křivce, bude fázová asociace tvořena α -křemenem a coesitem (tj. fázemi, jejichž pole stability tato křivka odděluje). Uvažujme teď čistě teoreticky: Máme-li fázovou asociaci α -křemen + coesit a chceme-li ji uchovat při změně jedné intenzitní veličiny (např. teploty), pak musíme určitým způsobem změnit i druhou stavovou veličinu (v našem případě tlak). Fázová asociace α -křemen + coesit tedy představuje univariantní fázovou asociaci (změna jedné intenzitní stavové veličiny vyžaduje určitou změnu druhé intenzitní stavové veličiny). I v tomto případě se projevuje platnost fázového pravidla: jde o univariantní fázovou asociaci ($V = 1$) v jednosložkové soustavě ($S = 1$), a proto je fázová asociace tvořena dvojicí fází ($F = 2$).

Na obrázku 48 je červeně vyznačeno pět trojných bodů. Ve fázových diagramech je **trojný bod** bodem, v němž se sbíhají tři univariantní křivky. To znamená, že na digramu se v trojném bodě stýkají tři pole stability. Čistě teoreticky tedy platí, že v trojném bodě (tj. za termodynamických podmínek odpovídajících trojnému bodu) mohou vedle sebe existovat v rovnováze tři fáze, například α -křemen + β -křemen + coesit. Jakákoli změna teploty, tlaku nebo obou veličin způsobí vymizení nejméně jedné fáze. Počet koexistujících fází v trojném bodě ($F = 3$) je v souladu s fázovým pravidlem, neboť $V = 0$ (invariantní fázová asociace) a $S = 1$.

Zcela v souladu s fázovým pravidlem v soustavě SiO_2 platí:

- i) za termodynamických podmínek, kdy je soustava divariantní (teplota a tlak odpovídají libovolnému bodu ležícímu v některém z polí stability), je stabilní jen jedna fáze,
- ii) za termodynamických podmínek, kdy je soustava univariantní (tlak a teplota odpovídají libovolnému bodu ležícímu na některé univariantní křivce), má stabilní fázová asociace dvě fáze,
- iii) za termodynamických podmínek, kdy je soustava invariantní (tlak a teplota odpovídají některému z trojných bodů), je stabilní fázová asociace tvořena trojicí fází.

Poznámky

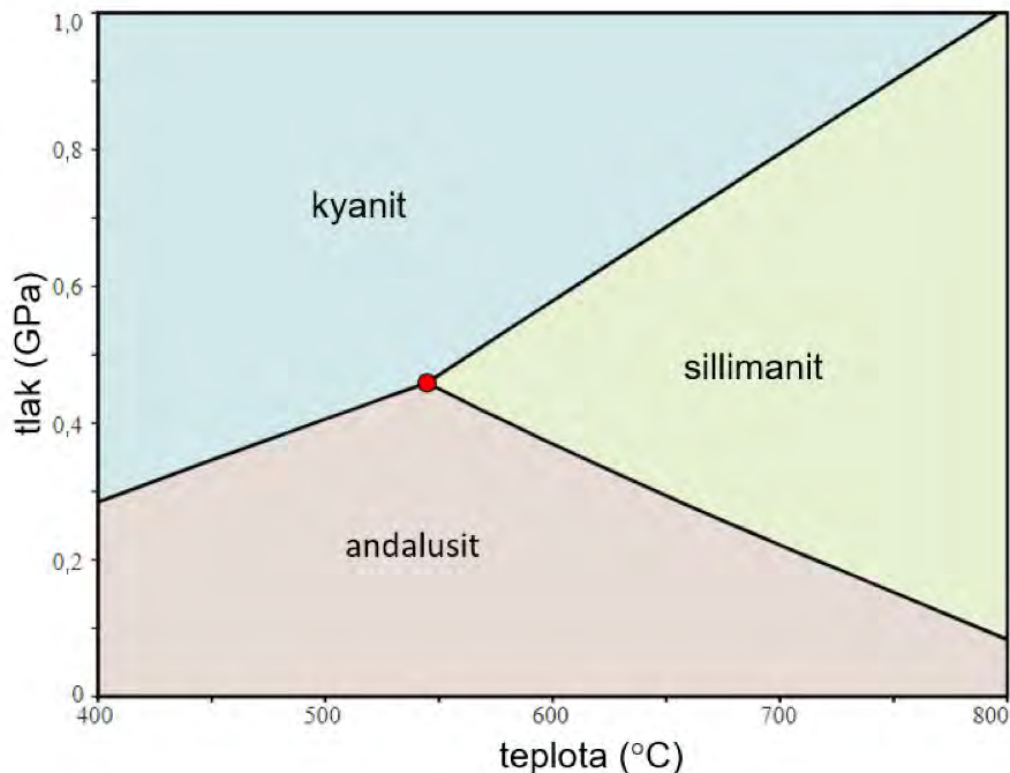
K fázovému diagramu soustavy SiO_2 je vhodné poznamenat, že při atmosférickém tlaku je α -křemen stabilní modifikací až do teploty $573\text{ }^\circ\text{C}$, β -křemen je stabilní v teplotním intervalu 573 až $867\text{ }^\circ\text{C}$, při vyšších teplotách je stabilní tridymit (existují modifikace α -tridymit a β -tridymit) a následně cristobalit (α -cristobalit a β -cristobalit). Při atmosférickém tlaku a při teplotě nad $1713\text{ }^\circ\text{C}$ je v soustavě SiO_2 stabilní tavenina.

V geologii se tlak uvádí v MPa, GPa nebo kbar. Platí, že $1\text{ bar} = 100\,000\text{ Pa} = 0,1\text{ MPa}$
 $1\text{ kbar} = 100\text{ MPa} = 0,1\text{ GPa}$

Velikost tlaku (přesně litostatického tlaku) v litosféře roste s hloubkou. Na bázi kontinentální kůry o obvyklé mocnosti 35 až 40 km je tlak cca 10 kbar , tj. cca 1 GPa . Z toho je zřejmé, že coesit a stišovit jsou stabilní za tlaků panujících v zemském plášti.

Na obrázku 49 je uveden výsek fázového diagramu Al_2SiO_5 , v němž jsou vyznačena pole stability kyanitu, andalusitu a sillimanitu, tj. tří strukturně odlišných modifikací Al_2SiO_5 . V metamorfitech se asociace kyanit+andalusit+sillimanit vyskytuje relativně často. Pokud jsme schopni prokázat, že tyto tři minerály vznikly současně a že v době vzniku byly

v rovnováze, můžeme tvrdit, že se hornina vytvořila za podmínek blízkých trojnému bodu. V termodynamickém modelu, z něhož byl odvozen diagram na obrázku 49, jsou parametry trojného bodu následující: teplota 545 °C, tlak 0,46 GPa.



Obr. 49. Fázový diagram Al₂SiO₅ s poli stability kyanitu, andalusitu a sillimanitu. Trojný bod je zvýrazněn červeně. Zdroj: <https://www.science.smith.edu/~jbrady/petrology/igrocks-diagrams/unary/Al2SiO5.php>. Upraveno.

3.11. Chemické vzorce minerálů

V literatuře se lze setkat s různými typy chemických vzorců minerálů, jimž je dobré porozumět. Existují tři hlavní typy chemických vzorců minerálů: i) idealizovaný vzorec, ii) idealizovaný vzorec s vyjádřením izomorfie, iii) krystalochemický (empirický) vzorec (to již bylo uvedeno v souboru „03-mineralogie-zaměření-a-rozdělení.pdf“, na straně 7, včetně základní charakteristiky těchto tří typů vzorců). V podkapitolách 3.3 a 3.5 je uveden způsob vyjadřování náboje (mocností) iontů (str. 23) a jejich koordinačního čísla (str. 25 a 26). Všechny podstatné informace k chemickým vzorcům minerálů jsou obsaženy v následujícím přehledu. Krystalochemickým vzorcům a metodám jejich výpočtu je věnována následující podkapitola 3.12. Základní informace k chemickým vzorcům minerálů:

1. Většina minerálů patří mezi anorganické sloučeniny. V levé části jejich chemického vzorce jsou uvedeny kationty (kationtová část vzorce), v pravé části jsou anionty (aniontová část vzorce).
2. Aniontová část vzorce může být uzavřena do hranaté závorky. V některých případech je tato hranatá závorka víceméně zbytečná, v jiných ale zpřehledňuje vzorec. Například vzorec kalcitu lze zapsat jako CaCO₃ nebo Ca[CO₃], vzorec zirkonu jako ZrSiO₄ nebo Zr[SiO₄].

Na příkladu zirkonu lze dobře dokumentovat význam hranaté závorky. Mineralog ví (nebo spíše „měl by vědět“), že zirkon patří mezi silikáty. „Nemineralog“ by se však na základě

vzorce $ZrSiO_4$ mohl domnívat, že zirkon je oxid zirkonia a křemíku. Vzorec $Zr[SiO_4]$ jasně vyjadřuje, že v aniontové části je silikátová skupina $[SiO_4]^{4-}$ a že tedy zirkon patří mezi silikáty. Z toho vzorce je zřejmé, že ve struktuře zirkonu jsou samostatné (nezávislé) křemíko-kyslíkové tetraedry, a proto zirkon patří mezi tzv. nesosilikáty.

Ve strukturách silikátů mohou být tetraedry $[SiO_4]^{4-}$ přítomny jako samostatné (navzájem jsou spojeny vnějšími kationty do krystalové struktury – případě výše uvedeného zirkonu jsou navzájem spojeny Zr^{4+}) nebo tyto tetraedry mohou být sdílením kyslíku ve vrcholech spojeny do dvojic (pak jde o tzv. sorosilikáty), různých cyklů (tzv. cyklosilikáty), řetězců (tzv. inosilikáty), vrstev (tzv. fylosilikáty) nebo trojrozměrných koster (tzv. tektosilikáty). V cyklech, řetězcích, vrstvách nebo trojrozměrných kostrách může být centrální atom křemíku v některých tetraedrech nahrazen atomem hliníku. Takové silikáty se označují přesněji jako alumosilikáty. V případě chemických vzorců silikátů (včetně alumosilikátů) je uzavírání aniontové části vzorce do hranaté závorky nezbytné u komplikovaných struktur, v nichž jsou kromě různých typů seskupení křemíko-kyslíkových (případně hliníko-kyslíkových) tetraedrů přítomny ještě tzv. doplňkové anionty, například O^{2-} , OH^- , Cl^- , CO_3^{2-} atd. Následuje pět příkladů, které dokumentují způsob řazení aniontů a aniontových skupin ve vzorcích. Nejprve jsou v hranaté závorce uvedeny jednoduché doplňkové anionty, nakonec typické silikátové skupiny, navzájem oddělované svislými čarami, které zpřehledňují vzorec:

i) vzorec epidotu $Ca_2(Fe^{3+}, Al)Al_2[O|OH|SiO_4|Si_2O_7]$ vyjadřuje, že jde o sorosilikát (pro nějž je typická dvojice tetraedrů $[Si_2O_7]^{6-}$), v jehož struktuře jsou i nezávislé tetraedry $[SiO_4]^{4-}$ a jako doplňkové anionty kyslík a hydroxylová skupina,

ii) vzorec cordieritu $(Mg, Fe^{2+})_2Al_2Si[Al_2Si_4O_{18}]$ vyjadřuje, že jde o alumosilikát, náležející strukturně mezi cyklosilikáty (s šestičetnými kruhy tetraedrů, dva tetraedry v šestičetném kruhu mají v centru hliník), v jehož krystalové struktuře jsou přítomny i atomy hliníku a křemíku, které však nejsou součástí tetraedrů vázaných do kruhu (cyklu),

iii) vzorec skorylu $(Na, Ca)(Fe^{2+}, Fe^{3+})_3Al_6[(OH, F)|(OH, O)_3|(BO_3)_3|Si_6O_{18}]$ vyjadřuje, že jde o borosilikát (jako doplňkový aniont je přítomna borátová skupina BO_3^{3-}), náležející strukturně mezi cyklosilikáty (s šestičetnými kruhy tetraedrů), doplňkovým aniontem je také hydroxylová skupina, substituovaná fluorem nebo kyslíkem,

iv) vzorec eastonitu $KMgAl_2[(OH)_2|Al_2Si_2O_{10}]$ vyjadřuje, že jde o alumosilikát, strukturně náležející mezi fylosilikáty, doplňkovým aniontem je hydroxylová skupina, hliník je ve struktuře minerálu přítomen jako součást vrstev tetraedrů (v centru jedné poloviny tetraedrů je křemík, v centru druhé poloviny tetraedrů je hliník) i jako kationt mezi vrstvami tetraedrů,

v) vzorec mejonitu $Ca_4[CO_3|Al_6Si_6O_{24}]$ vyjadřuje, že jde o alumosilikát, strukturně náležející mezi tektosilikáty, doplňkovým aniontem je karbonátová skupina.

Zcela analogickým způsobem se hranatá závorka uplaňuje v chemických vzorcích kyslíkatých nesilikátových sloučenin, v jejichž struktuře jsou aniontové skupiny (např. karbonátová, borátová, sulfátová, fosfátová apod.). Příkladem může být vzorec fluorapatitu $Ca_5[F|(PO_4)_3]$, z něhož je zřejmé, že jde o Ca-fosfát s doplňkovým fluorovým aniontem.

3. Náboj iontů (mocenství) mineralogové obvykle vyjadřují za chemickou značkou prvku arabskou číslicí v horním indexu, za níž je znaménkem plus nebo minus vyjádřen kladný nebo záporný náboj iontu (kladný náboj u kationtu, záporný u aniontu). Mocenství je v chemickém vzorcí minerálu uváděno jedině v případech, kdy je to opodstatněné. Často má význam vyjádřit mocenství železa. Příkladem mohou být výše uvedené vzorce epidotu, cordieritu nebo skorylu. S vyjadřováním mocenství v chemických vzorcích je spojen jeden formální problém, jenž může být prezentován na příkladu magnetitu. Složení magnetitu lze vyjádřit vzorcem Fe_3O_4 . Železo je ve struktuře magnetitu přítomno jako dvojmocné i trojmocné. Tuto skutečnost nejlépe vyjadřuje vzorec, který je někdy zapsán jako

$\text{Fe}^{2+}\text{Fe}^{3+}_2\text{O}_4$, jindy jako $\text{Fe}^{2+}\text{Fe}_2^{3+}\text{O}_4$. Autor této publikace preferuje první alternativu, druhá mu připadá poněkud nelogická.

4. Je-li to nutné nebo smysluplné, lze ve vzorci minerálu vyjádřit i koordinační číslo iontu, a to buď římskou číslicí v horním indexu za značkou chemického prvku, nebo arabskou číslicí v hranaté závorce v horním indexu za značkou prvku (viz strana 25 a 26). Příkladem je vzorec andalusitu $\text{Al}^{\text{VI}}\text{Al}^{\text{V}}\text{SiO}_5$ nebo $\text{Al}^{[6]}\text{Al}^{[5]}\text{SiO}_5$, případně zapsaný jako $\text{Al}^{\text{VI}}\text{Al}^{\text{V}}[\text{O}|\text{SiO}_4]$ nebo $\text{Al}^{[6]}\text{Al}^{[5]}[\text{O}|\text{SiO}_4]$. Je vhodné preferovat uvedení koordinačního čísla arabskou číslicí v hranaté závorce (zdůvodnění je na straně 26).

5. Izomorfní zastupování je v idealizovaných vzorcích minerálů vyjádřeno tak, že zastupující se prvky jsou uzavřeny okrouhlými závorkami, přičemž značky těchto prvků musí být odděleny čárkami, za nimiž se nedělají mezery. Příkladem mohou být již výše uvedené vzorce epidotu, cordieritu a skorylu. Izomorfní zastupování je zcela běžným jevem, určitý chemický prvek může být ve struktuře substituován i značným počtem jiných chemických prvků. Při tvorbě idealizovaných vzorců s naznačenou substitucí je proto vhodné držet se zásady, že „méně znamená více“. Jak tuto poznámku chápat? Není účelné uvádět všechny prvky, které se v minerálu mohou vyskytovat jako izomorfní příměs. Obzvláště v učebnici má smysl ve vzorci vyjádřit jen ty izomorfní příměsi, které jsou kvantitativně významné. Příkladem může být sfalerit, jehož idealizovaný vzorec je ZnS . Zinek ve struktuře sfaleritu může být substituován železem, manganem, kadmíem, indiem, galliem nebo rtutí (a případně i dalšími kovy), síra ve struktuře sfaleritu může být substituována selenem nebo kyslíkem. Pokud bychom uvedené substituce vyjádřili ve vzorci, pak by vzorec sfaleritu byl $(\text{Zn,Fe,Mn,Cd,In,Ga,Hg})(\text{S,Se,O})$. Tento vzorec není chybný, avšak je poněkud nepřehledný, a může být i matoucí. Z uvedených izomorfních příměsí je ve sfaleritu v relativně vysoké koncentraci obvykle přítomno pouze železo, obsahy ostatních příměsí jsou zpravidla řádově nižší (samozřejmě mohou existovat výjimky!). Proto se v učebnicích mineralogie vzorec sfaleritu uvádí jako ZnS nebo $(\text{Zn,Fe})\text{S}$, o příměsích, které mohou být někdy zajímavé i ekonomicky, je možno učinit zmínku v textu.

6. Ve vzorcích minerálů se můžeme setkat se značkou REE. Jde o zkratku z anglického „rare earth elements“, tj. česky „vzácné zemin“ nebo „prvky skupiny vzácných zemin“. V souboru „03-mineralogie-zaměření-a-rozdělení.pdf“ (v rámečku na straně 10) lze o této skupině prvků najít nejzákladnější informace, včetně upozornění na jisté rozdíly ve významu zkratky REE v textu a v chemickém vzorci. Ve vzorci minerálu zkratka REE vyjadřuje prvky skupiny vzácných zemin s atomovými čísly 57 až 71, tedy lanthan, cer, praseodym, neodým, promethium, samarium, europium, gadolinium, terbium, dysprosium, holmium, erbium, thulium, ytterbium a lutecium. Se značkou REE se můžeme setkat například v obecném vzorci minerálů monazitové řady $\text{REE}[\text{PO}_4]$. Příměs prvků skupiny vzácných zemin ve struktuře titanitu je vyjádřena ve vzorci $(\text{Ca,REE})(\text{Ti,Al,Fe}^{3+})[(\text{O,OH,F})|\text{SiO}_4]$.

7. Ve vzorci minerálu lze vyjádřit i neobsazenost strukturní pozice, tj. vakanci. V chemických vzorcích minerálů se vakance označuje prázdným čtverečkem (jde o „prázdné místo“ ve struktuře). Příkladem je vzorec kankrinitu $(\text{Na,Ca},\square)_8[(\text{CO}_3,\text{SO}_4)_2(\text{AlSiO}_4)_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

3.12. Krystalochemické vzorce a postup jejich výpočtu

Krystalochemické (empirické) vzorce udávají počet atomů jednotlivých prvků v určité (reprezentativní) části krystalové struktury. Izomorfní zastupování prvků vyjadřujeme v krystalochemickém vzorci jejich uzavřením v okrouhlé závorce, přičemž u každého prvku uvádíme počet jeho atomů, a to zpravidla na dvě desetinná místa. Za touto závorkou by měla být uvedena suma atomů zastupujících se prvků. Značky zastupujících se chemických prvků a k nim se vztahující číselné údaje nejsou v krystalochemických vzorcích oddělovány čárkami – viz krystalochemický vzorec granátu na posledním řádku strany 54.

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 nebo využijeme databázi IMA). 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. V následujících odstavcích jsou prezentovány postupy výpočtu atomových kvocientů a vytvoření krystalochemického vzorce pro dvě chemicky rozdílné skupiny minerálů: i) minerály třídy elementů, třídy sulfidů (a analogických sloučenin) a třídy halogenidů (v této skupině minerálů jsou tedy elementy a nekyslíkaté sloučeniny), ii) minerály náležející mezi kyslíkaté sloučeniny (například oxidy, karbonáty, fosfáty a silikáty).

V případě nekyslíkatých sloučenin jsou výsledky chemických analýz minerálů obvykle uvedeny v hmotnostních procentech jednotlivých prvků. Při výpočtu atomového kvocientu určitého prvku se obsah tohoto prvku zjištěný chemickou analýzou (v hmot. %) dělí jeho atomovou hmotností. Postup výpočtu atomových kvocientů a sestavení krystalochemického vzorce lze ukázat na příkladu sfaleritu. Na straně 52 již bylo uvedeno, že sfalerit s idealizovaným vzorcem ZnS obsahuje řadu izomorfních příměsí zastupujících zinek, z nichž nejběžnější je železo, avšak zinek může být substituován i manganem, kadmíem, indiem... – toto izomorfní zastupování zinku ve struktuře sfaleritu lze vyjádřit vzorcem (Zn,Fe,Mn,Cd,In)S.

Výsledek kvantitativní chemické analýzy sfaleritu je uveden v 1. sloupci tabulky 2. (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, tj. obsah prvku dělíme jeho atomovou hmotností (například u zinku jde o $63,77 : 65,37 = 0,9755$), výsledky jsou uvedeny v 2. sloupci tabulky 2. Nyní již známe počty atomů jednotlivých prvků v krystalochemickém vzorci, a bylo by již možno tento vzorec napsat. Vidíme však, že v idealizovaném vzorci ZnS je 1 atom síry, zatímco v našem krystalochemickém vzorci by bylo 1,0197 atomu S. Je proto vhodné provést přepočet zjištěných atomových kvocientů tak, aby jejich vzájemný poměr zůstal zachován, avšak aby v krystalochemickém vzorci byl přesně 1 atom síry. Tento přepočet lze provést tak, že hodnotu 1 (tj. požadovaný počet atomů síry) dělíme hodnotou 1,0197 (tj. vypočteným atomovým kvocienem síry). Tak 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. Výsledný krystalochemický vzorec analyzovaného sfaleritu je $(\text{Zn}_{0,957}\text{Fe}_{0,061}\text{Cd}_{0,005}\text{Mn}_{0,002})_{1,025}\text{S}_{1,000}$. Zaokrouhlení na tři desetinná místa bylo provedeno proto, že při obvyklém zaokrouhlení na dvě desetinná místa by v našem krystalochemickém vzorci nebylo možno vyjádřit obsah manganu.

Tab. 2. Postup výpočtu krystalochemického vzorce sfaleritu. Vysvětlení v textu.

| | 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 |

Vážení čtenáři, právě jste dočetli ukázkou z knihy ***Základy mineralogie a petrografie***.
Pokud se Vám ukázka líbila, na našem webu si můžete zakoupit celou knihu.