Dr. Raucsik Béla: Ásványtan leckesorozat
5. lecke

A kristálytan alaptörvényei

<u>*Az olvasólecke célja:*</u> a kristálytan alaptörvényeinek a megismerése. <u>*Átlagos olvasási idő:*</u> 30 perc.

Az előző leckékben megismerkedtünk a kristályos anyagok külső és belső szimmetriájának alapjaival. Nézzük most meg azt, hogy milyen alaptörvényekben testesülnek meg ezek!

A szögállandóság törvénye

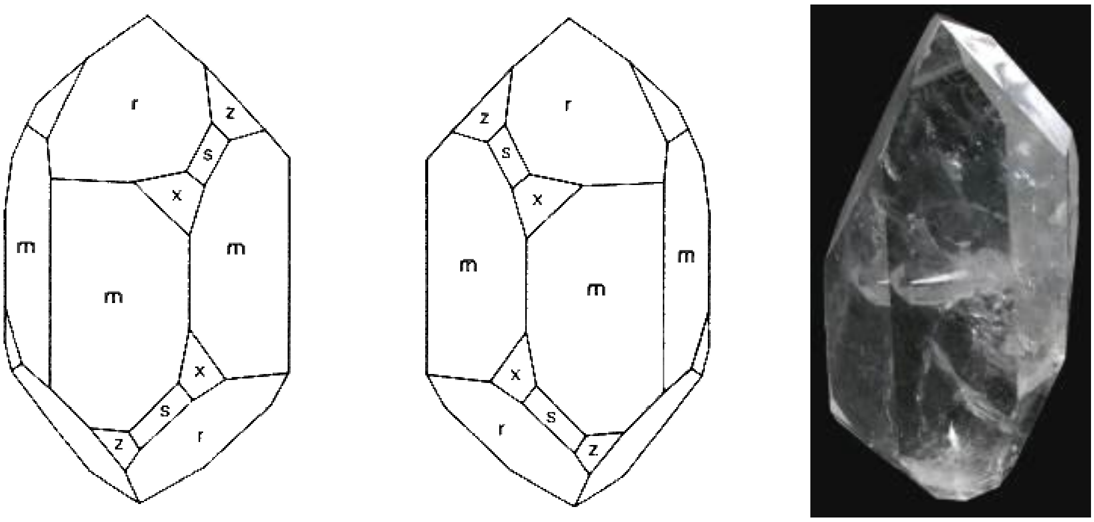
Egy bizonyos anyag kristályainak meghatározott lapjai és élei által bezárt szög az illető anyagra jellemző, állandó érték.

Ideálisan fejlett kristály esetén a kristály egyenértékű határoló elemeinek a kristály középpontjától való távolsága egyenlő. A valóságban (főleg a természetben) ez igen ritkán fordul elő. Azonban akármennyire is torzul a kristály, az anyagára és kristályformáira jellemző lapszögek értéke nem változik.

Az ideális kristály alakját lapjainak egymáshoz viszonyított arányai definiálják. Mivel a kristálylapok a kristályrács anyagi részecskék által sűrűn megterhelt síkjainak felelnek meg, ezért ideális esetben a kristályrács alakja ***csak*** a kristályrács sajátosságaitól függ és a kristály egyenértékű (azaz szimmetriaművelettel fedésbe hozható) lapjainak távolsága a kristály középpontjától egyenlő.

A reális kristályok alakját a képződés fizikokémiai körülményei befolyásolják. A körülmények függvényében a kristály egyenértékű lapjai nem szükségszerűen a középponttól egyenlő távolságban jelennek meg, azaz az „ideális” alak torzul. Akármennyire is torzul azonban a kristály, az anyagára és kristályformáira jellemző lapszögek értéke nem változik.

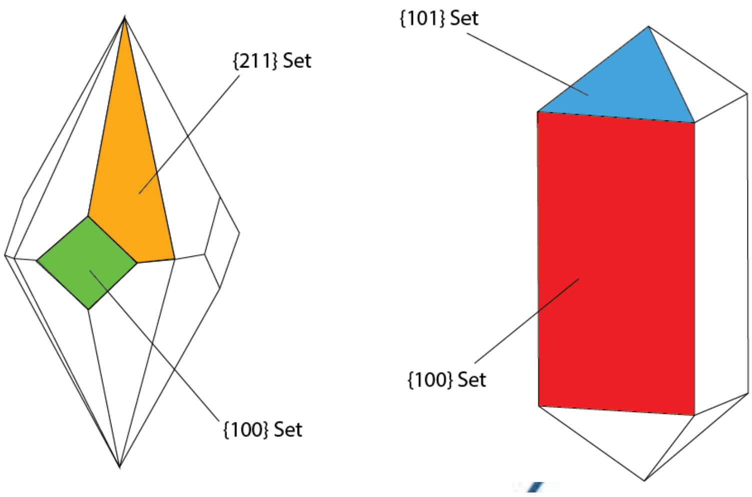
Nicolaus Steno, dán természettudós és pap portréja.
Nevéhez fűződik a szögállandóság törvényének meghatározása.
https://hu.wikipedia.org/wiki/Nicolaus_Steno#/media/F%C3%A1jl:Niels_stensen.jpg



Ideális kvarckristályok modellje (jobbra és középen), továbbá torzult kvarckristály (jobbra).
https://mek.oszk.hu/04700/04799/pdf/asvanytan1.pdf
http://www.johnbetts-fineminerals.com/jhbnyc/mineralmuseum/picshow.php?id=33889

> **TIPP: A kristályok lapszögeinek mérésére szolgál a reflexiós goniométer. Működését megérthetjük az alábbi videó segítségével:**
>
> https://www.youtube.com/watch?v=OBx-9UPOnmc

Mivel a kristálylapok a kristályrács anyagi részecskék által sűrűn megterhelt síkjainak felelnek meg, ezért ideális esetben a kristályrács alakja annak sajátosságaitól függ és a kristály egyenértékű (azaz szimmetriaművelettel fedésbe hozható) lapjainak távolsága a kristály középpontjától egyenlő. A kristályok morfológiájának, a rendszer kémiai összetételének és a kristályosodás körülményeinek az összefüggésein alapul számos anyagvizsgálati módszer. Ezek közül az egyik klasszikus, a cirkonkristályok morfológiai jellemzése, amit elsősorban granitoid kőzetek petrogenetikai vizsgálata során alkalmaznak, sokszor geokronológiai kutatások részeként.



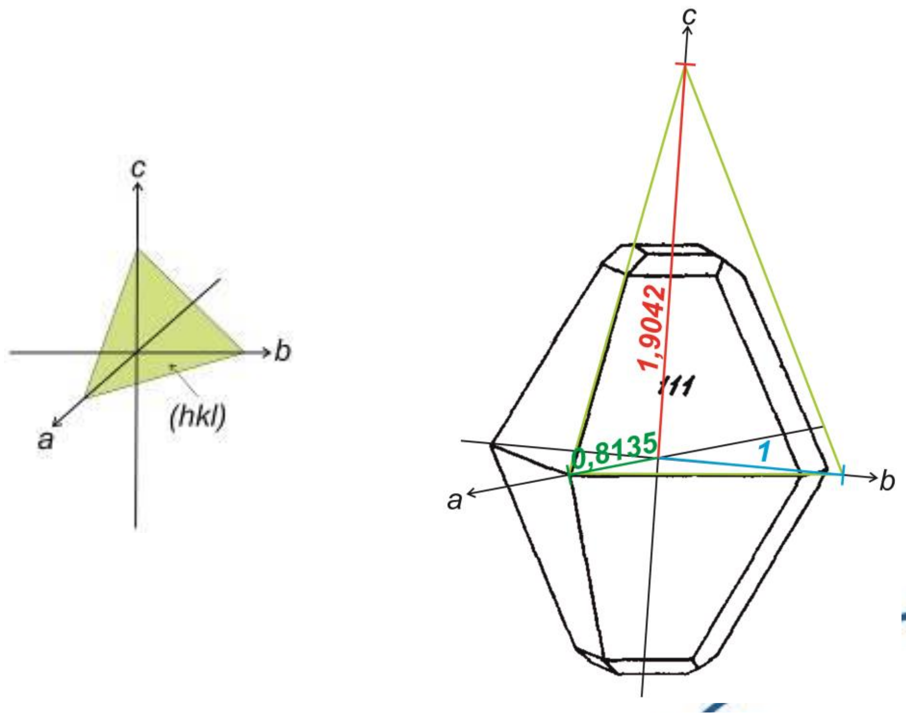
Különböző cirkonmorfológiai típusok. A cirkonmorfológiai kutatások során a prizma (zöld és piros) és a dipiramis (sárga és kék) formák arányát mérik és teszik számszerűvé, amivel a sajátalakú cirkonkristályok növekedésének sebességére következtethetnek.
https://en.wikipedia.org/wiki/Detrital_zircon_geochronology#/media/File:Zircon_crystal_system.png

Tipp: A cirkonmorfológiai vizsgálatokról és azoknak a geológiai kutatásban betöltött helyéről tudhatunk meg további részleteket az alábbi esettanulmányban:
http://epa.uz.ua/01600/01635/00568/pdf/EPA01635_foldtani_kozlony_2019_149_2_093-104.pdf

A paraméter törvény és a Miller-index

A paraméter törvény megértéséhez a kristályok külső morfológiájának és az egyes kristályrendszerek megértéséhez használt, az elemi cella élei által definiált térbeli koordinátarendszerekhez kell visszatérnünk (ld. előző lecke). Vegyünk egy jól fejlett kristálylapot, amely mindhárom tengelyt a pozitív végén metsz, ez lesz az alaplap. Az alaplap által a b-tengelyből lemetszett távolságot tekintjük egységnyinek és ehhez viszonyítjuk a másik két tengelyből lemetszett hosszat. Ez határozza meg az ún. tengelyarányokat. Az alaplapon kívül, a többi lap a tengelyeket csak a, b, c tengelyarányok racionális számú többszöröseivel metszhetik, azaz
*m*a : *n*b : *p*c, ahol *m, n, p* racionális számok.

A paramétertörvény tehát kimondja, hogy a paraméter viszonyszámok (m, n, p) mindig racionális számok vagy végtelennel egyenlők.



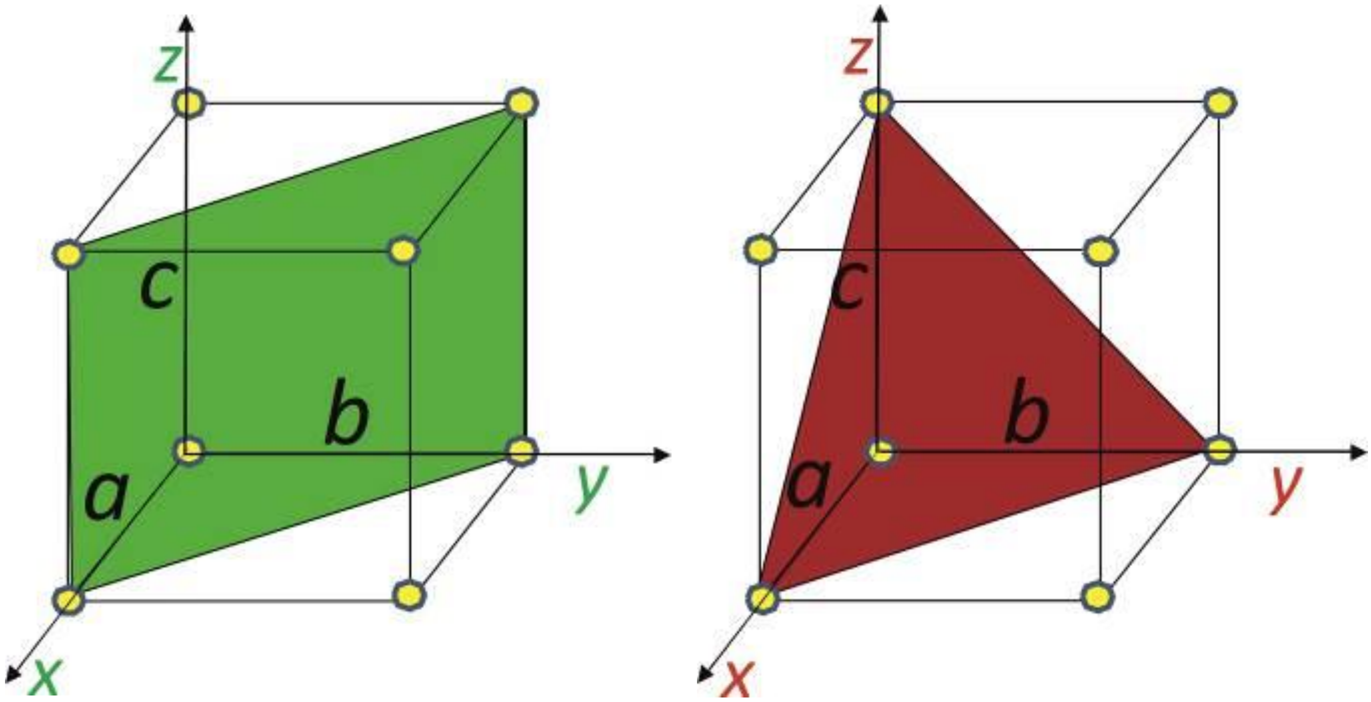
Az alaplap (balra) és a paraméter viszonyszámok a rombos kén kristályának (az alaplap indexe 111) a példáján (jobbra). Ennek tengelyarányai: a:b:c=0,8135:1:1,9042.

Ha kezelni szeretnénk ezeket a viszonyszámokat, akkor (adott

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

tengellyel párhuzamos lap esetén) a végtelennel kellene számolnunk, ami nehézségeket okoz. Ezért célszerű a reciprok értékeket vennünk és az 1/∞-t 0-nak definiálnunk. Ezek a reciprok értékek az ún. ***Miller-index***ek.

A Miller-indexek mindig egész számokkal, vagy nullával egyenlők. Szemléltetésül lássunk erre néhány egyszerű példát!



A fenti ábrán egy **zöld**del és egy **bordó**val kiemelt rácssíkot látunk egy köbös kristályban (a tömegpontokat sárga körök szimbolizálják, a kristálytani tengelyeket rendre ***x***-szel, ***y***-nal és ***z***-vel jelöljük). Nézzük meg a nevezett síkok tengelymetszeteit és Miller-indexeit!

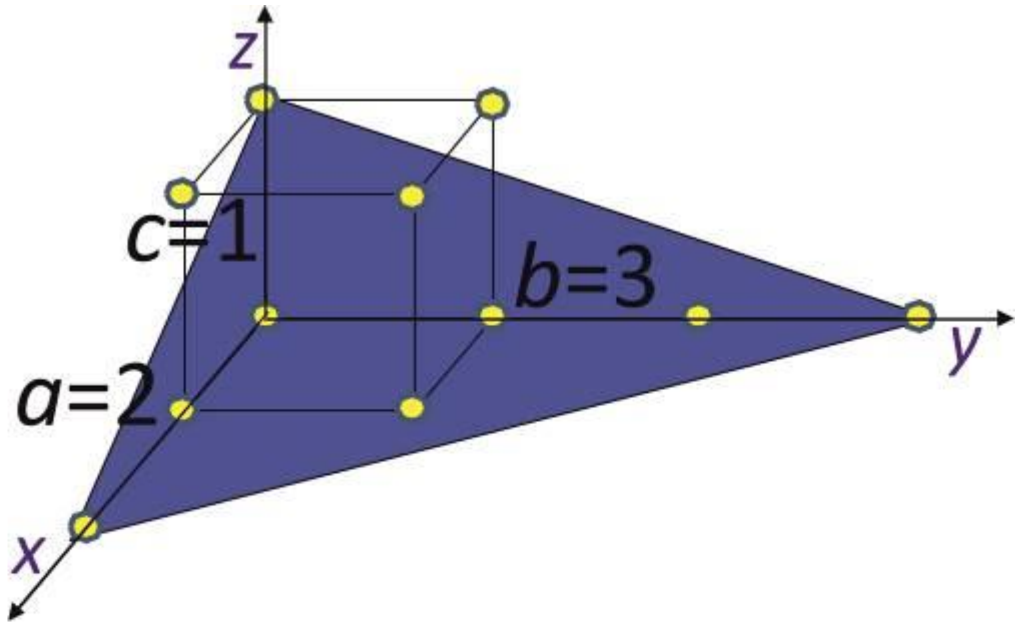
A zöld rácssík esetében a tengelymetszetek: ***a***=1, ***b***=1, ***c***=∞

A bordó esetében ugyanez: ***a***=1, ***b***=1, ***c***=1

Képezve a reciprok értékeket az 1 értéke nem változik, míg a ∞-ből 0 lesz, azaz az adott rácssíkok Miller-indexei **(110)**, illetve **(111)**. A Miller-indexeket hagyományosan ***h***, ***k*** és ***l*** betűkkel jelöljük. Síkok jelölésénél ***zárójelbe*** helyezzük a három tagból álló jelölést. Figyeljük meg az alábbi, kissé bonyolultabb esetet!

Az alábbi ábrán egy ***kék***kel jelölt rácssíkot látunk ugyanabban a hipotetikus köbös kristályban. Az előzőekkel szemben a sík itt mindhárom tengelyt metszi, rendre az ***a***=2, ***b***=3, ***c***=1 értékekkel. Vegyük a reciprok értékeket: ***a***=1/2, ***b***=1/3, ***c***=1/1, majd közös nevezőre hozva: ***a***=3/6, ***b***=2/6, ***c***=6/6. Elhagyva a nevezőt, megkapjuk a ***h***=3, ***k***=2, ***l***=6 indexeket. A kérdéses sík Miller-indexe tehát: **(326)**.

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu



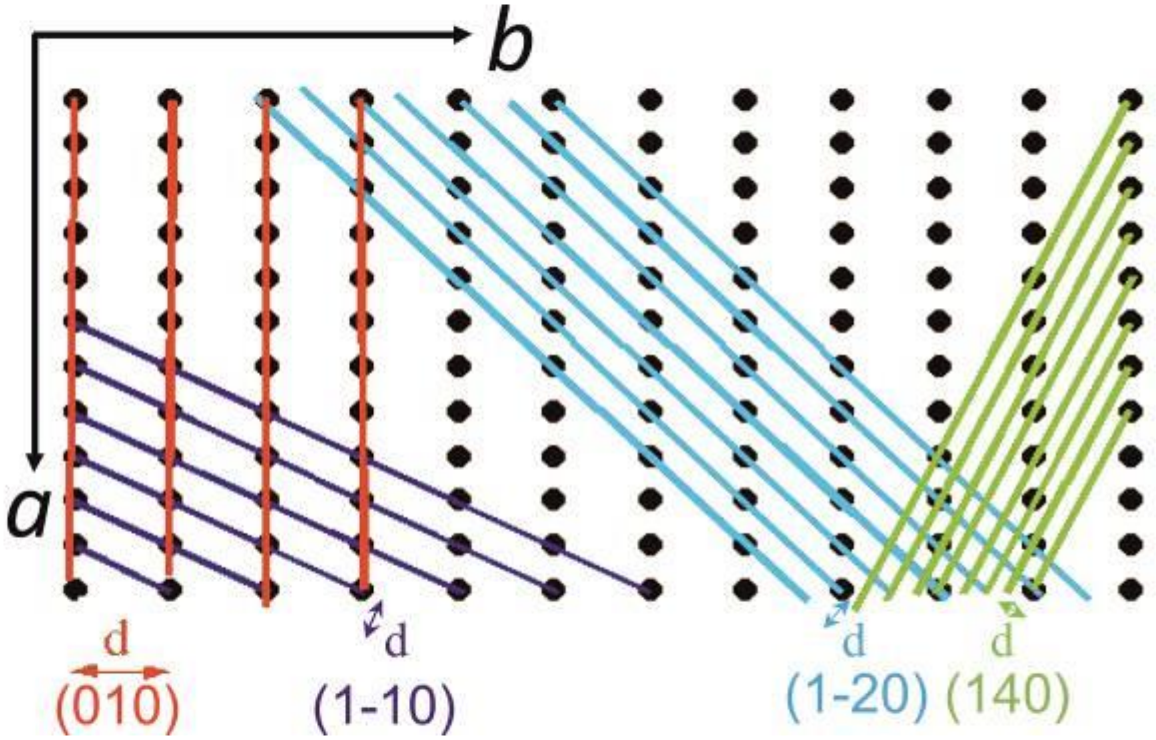
Általánosságban elmondható, hogy egy kristálylap háromféle módon helyezkedhet el a kristálytani tengelyekhez képest:

1. Az egyiket metszi, a másik kettővel párhuzamos; ilyenkor (100), (010), illetve (001) lapokról beszélünk annak függvényében, hogy az a-, a b-, vagy a c-tengelyt metszi-e a kérdéses lap.
2. Kettőt metsz, a harmadikkal párhuzamos; ez a (*hk*0), (*h*0*l*) és (0*kl*) indexű lapokat eredményezi. Ha két tengelyt azonos távolságban metsz a kristálylap, akkor (110), (101) és (011) lapokat kapunk.
3. A lap mindhárom tengelyt metszi, ami a (*hkl*), ***általános helyzetű lap***ot definiálja. Értelemszerűen az (111) lap a cella rácsállandóival egyező távolságban metszi az egyes tengelyeket.

A Miller-indexek egyúttal egy párhuzamos rácssík-sereget is meghatároznak. Ezekhez tartozik egy-egy *d* rácssík-távolság.

Az alábbi képen a ***c***-tengely irányából látunk különböző Miller-indexű párhuzamos rácssík-sereget, a hozzájuk tartozó *d* rácssík-távolsággal. Vegyük észre, hogy minél kisebb a Miller-index nominális abszolút értéke, annál nagyobb a rácssíktávolság!

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu



A rácssík-távolság természetesen kiszámítható. Rombos, tetragonális és köbös rendszerben (ahol a tengelykereszt szárai merőlegesek egymásra) viszonylag egyszerű ez a számítás az alábbi képletek alapján:

Rombos rendszerben, ahol
$a \neq b \neq c$ és $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

$$\boxed{\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

Tetragonális rendszerben, ahol
$a = b \neq c$ és $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

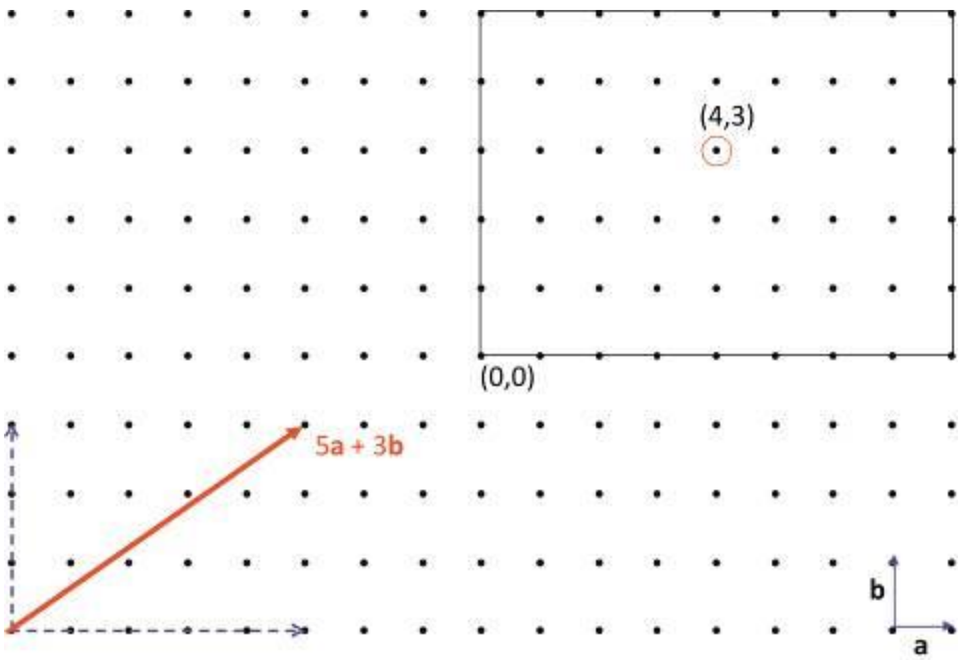
$$\boxed{\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}}$$

Köbös rendszerben, ahol
$a = b = c$ és $\alpha = \beta = \gamma = 90°$

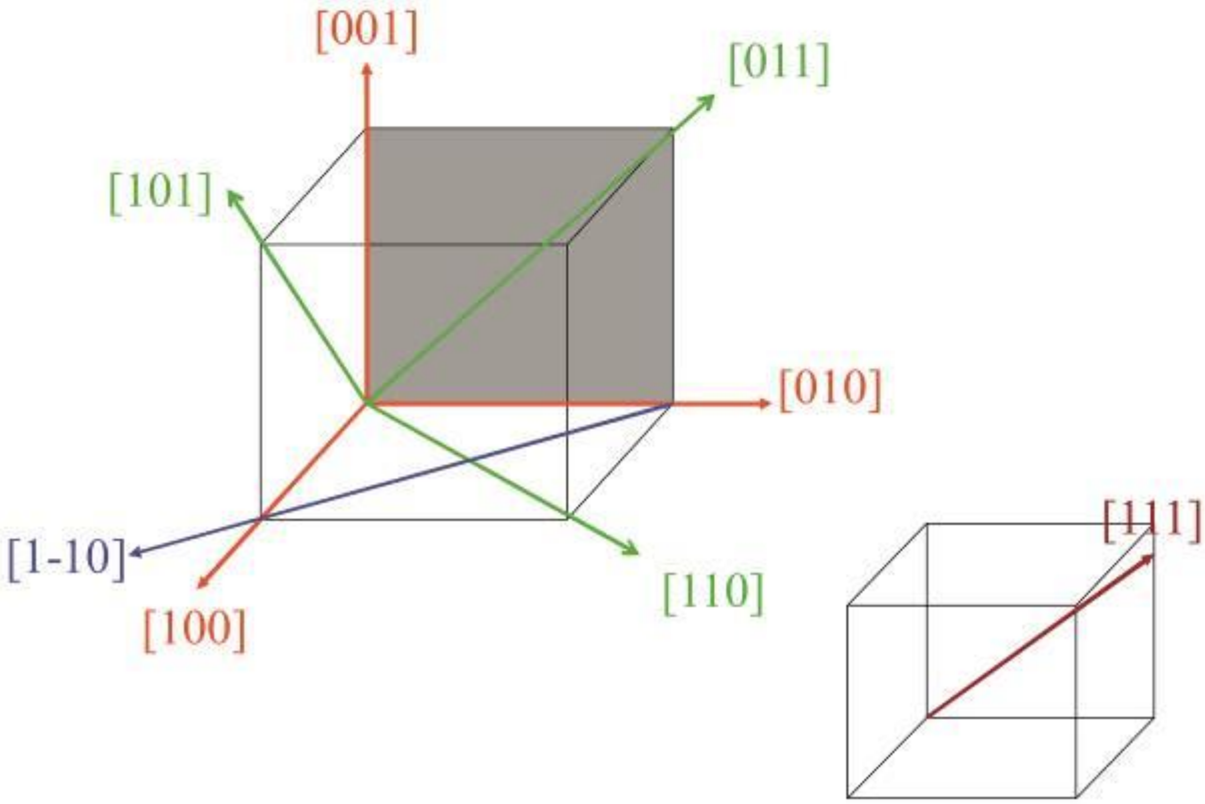
$$\boxed{\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}}$$

Miller-indexszel természetesen irányt is megadhatunk. Az **r** vektor

mutasson a rács origójából egy tetszőleges pontba. Ekkor:
r = r_1 **a** + r_2 **b** + r_3 **c**, ahol **a, b, c** a rácsállandók, azaz az elemi transzlációs vektorok.



Ha tehát definiáljuk a vektor kezdőpontjának és végpontjának a koordinátáit, majd a legkisebb egész számmá alakítjuk az értéket, megkapjuk az adott irány Miller-indexét. Ezt a háromtagú indexet ***szögletes zárójel***be helyezzük.



Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

A zónatörvény

Bármely kristály esetén a párhuzamos élekben metsződő lapok egy zónába (övbe) tartoznak. Ha vesszük a kristály középpontján áthaladó és az adott zónába tartozó lapok éleivel párhuzamos egyenest, akkor a ***zónatengely***t kapjuk. A zónatörvény alapján ***egy kristályon lehetséges összes lap zónaviszonyban van.***
A zónatengely Miller-indexe [**uvw**] kiszámítható. Ha *hkl* és *h'k'l'* a két kristálylap Miller-indexe, akkor

u = *kl'*–lk'; **v** = lh'–hl'; **w** = hk'–kh'

Következmény:
Ha egy lap benne fekszik egy övben akkor: h**u** + k**v** + l**w** = 0.
Ez a ***zónaegyenlet***.

Gyakoroljuk egy egyszerű példa segítségével a zónaegyenlet használatát!
Vegyük az olivin ásványt! Az olivin (122) lapja benne fekszik a [-2-12] tengelyű zónában?

Ha h**u** + k**v** + l**w** = 0, akkor az a kérdés, hogy 1×(-2) + 2×(-1) + 2×2 = 0?
Látjuk, hogy (-2) + (-2) + 4 = 0, tehát igen, az (122) lap benne fekszik a [-2-12] zónában.

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

Hasznos olvasnivalók az ásványtan témájában:

Koch, S., Sztrókay, K. (1986): Ásványtan. Tankönyvkiadó, Budapest.
http://mek.oszk.hu/04700/04799/pdf/asvanytan1.pdf

Pápay, L. (2006): Kristálytan, ásvány-, kőzettan. JATEPress, Szeged.

Szakáll, S. (2011): Ásvány- és kőzettan alapjai. E-tananyag, Miskolci Egyetem.
https://regi.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop425/0033_SCORM_MFFAT6101/adatok.html

Putnis, A. (1992): Introduction to Mineral Science. Cambridge University Press, Cambridge.

Önellenőrző kérdések (a kristálytan alaptörvényei):

1. Min alapul a szögállandóság törvénye?
2. Számolja ki az alábbi tengelymetszetű rácssíkok Miller-indexét!

   a=2, b=2, c=2

   a=2, b=4, c=∞

   a=4, b=∞, c=4
3. Határozza meg a fenti rácssíkokhoz tartozó *d* rácssíktávolságot, ha

   a rács a tetragonális rutil rácsa, ahol a rácsállandók: a=4,594 Å és c=2,958 Å

   a rács a rombos olivin rácsa, ahol a rácsállandók: a=4,78 Å, b=10,25 Å és c=6,30 Å

   a rács a köbös termésarany rácsa, ahol a rácsállandó: a=4,079 Å!
4. Milyen szabályszerűség figyelhető meg a fenti számolások tükrében?

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu