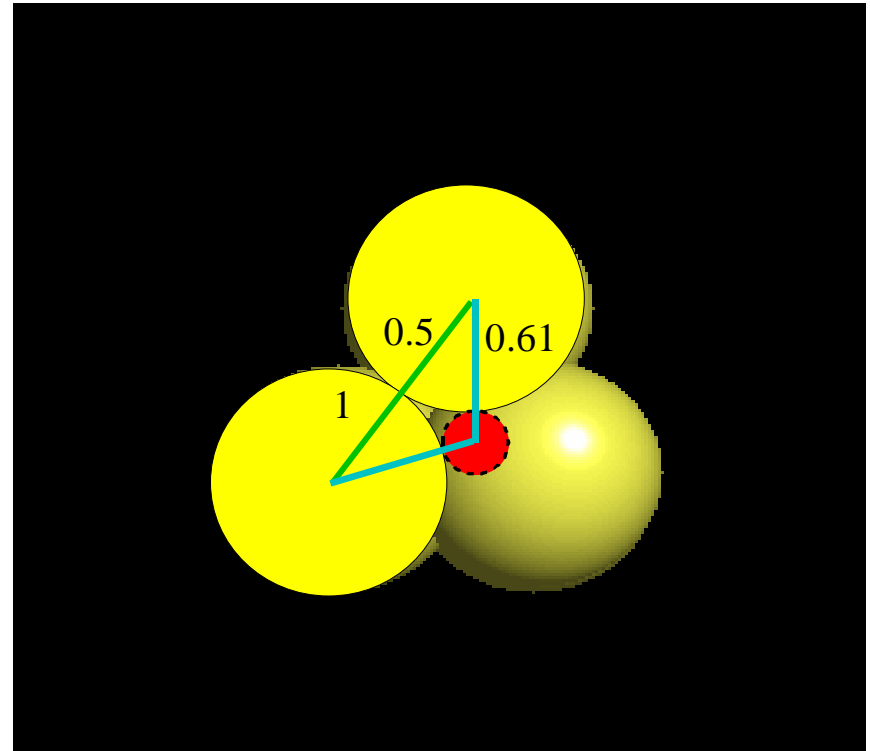


Nachbesprechung

Übung 5

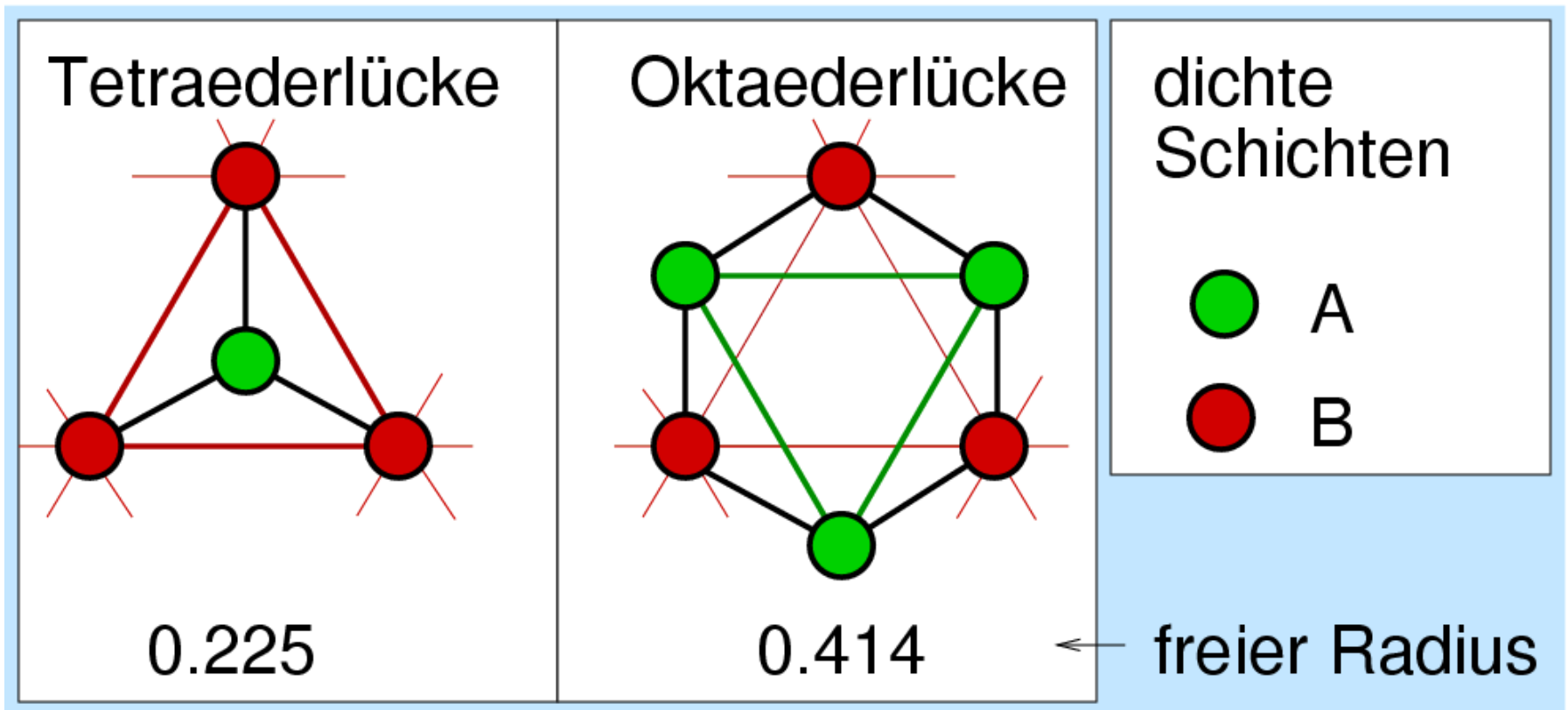
Max. Größe der Tetraederlücke

- Limitierendes R_K/R_A ?
- Abstand Mittelpunkt-Ecke in einem Tetraeder mit Kantenlänge 1 = 0.6124
- $\sin (109.47 / 2) = 0.8165$
- $0.5 / 0.8165 = 0.6124$
- $R_K = 0.612 - 0.5 = 0.1124$
- $R_K/R_A = 0.1124/0.5 =$
0.225



Kugelpackungen

- Tetraederlücken und Oktaederlücken



Begriffe

- Isomorph
- Mischkristall

- Polymorph
- Phasenübergang

Isomorph

- Isomorph bedeutet, daß die zwei Mineralien die gleiche Struktur haben, aber unterschiedliche chemische Formeln.
- Kristalle mit ähnlichen Bindungsverhältnissen:
- z. B. Kalzit CaCO_3 - Magnesit MgCO_3

Mischkristalle

- Zwischen isomorphen Kristallen können sich Mischkristalle bilden
- Bedingung: Ionenradien der Endglieder dürfen sich nicht um mehr als 10 – 15% unterscheiden
- Ladungsausgleich muss gewährleistet sein
- z.B. vollständige Mischbarkeit zwischen Strontianit (SrCO_3 , $r(\text{Sr}^{2+}) = 1.12 \text{ \AA}$) und Witherit (BaCO_3 , $r(\text{Ba}^{2+}) = 1.34 \text{ \AA}$)
- Hingegen Mischungslücke zwischen Calcit (CaCO_3 , $r(\text{Ca}^{2+}) = 1.00 \text{ \AA}$) und Magnesit (MgCO_3 , $r(\text{Mg}^{2+}) = 0.66 \text{ \AA}$)

Polymorphie - Phasenübergänge

- **Polymorphe (Modifikationen):**
Elemente oder Verbindungen, die bei gegebener chemischen Zusammensetzung aber bei verschiedenen Druck- und Temperaturbedingungen Festkörper mit unterschiedlichen Kristallstrukturen ausbilden werden polymorphe Substanzen genannt.
- Der Übergang von einer Modifikation in eine andere heißt **Phasenübergang**

Modifikationen - Transformationen

- „Modifikationen einer Substanz“: die verschiedenen Phasen, die eine polymorphe Substanz ausbilden kann
- „Transformation – Phasenumwandlung“: Umwandlung einer Modifikation einer Substanz in eine andere Modifikation derselben Substanz

Phasenübergänge

- **displazive** Phasenübergänge –
Verformung bestehender Koordinationspolyeder aber kein Aufbrechen oder Neubildung von Bindungen
- **rekonstruktive** Phasenübergänge –
Umstellung des Bindungsgerüsts

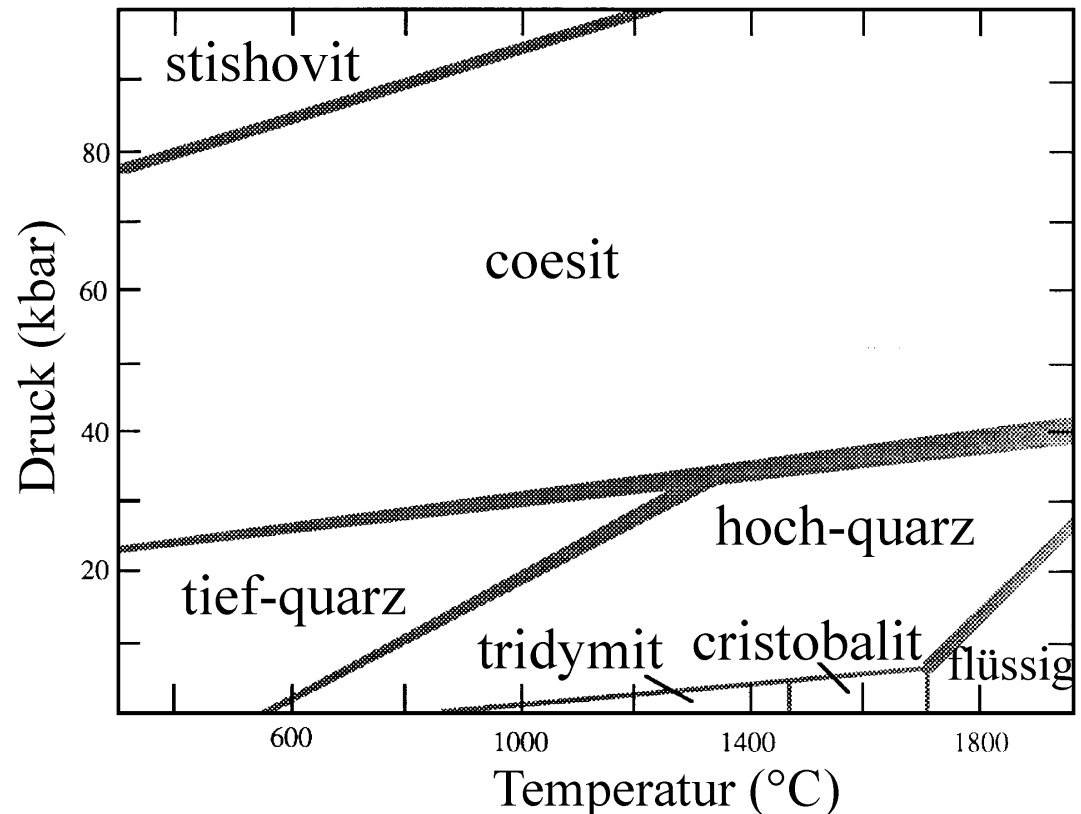
Beispiele für Polymorphe Substanzen

Substanz	chemische Formel	Modifikation
Kohlenstoff	C	Graphit
		Diamant
Alumosilikat	Al_2SiO_5	Andalusit
		Kyanit
		Sillimanit
Kalium-Aluminium Silikat	KAlSi_3O_8	Sanidin
		Orthoklas
		Mikroklin
Eisendisulfid	FeS_2	Pyrit
		Markasit

Beispiel SiO_2

Je nach Druck- und Temperaturbedingungen bildet SiO_2 unterschiedliche Kristallstrukturen aus:

Coesit, α -Quarz,
 β -Quarz, Cristobalit,
Stishiovit, Tridymit



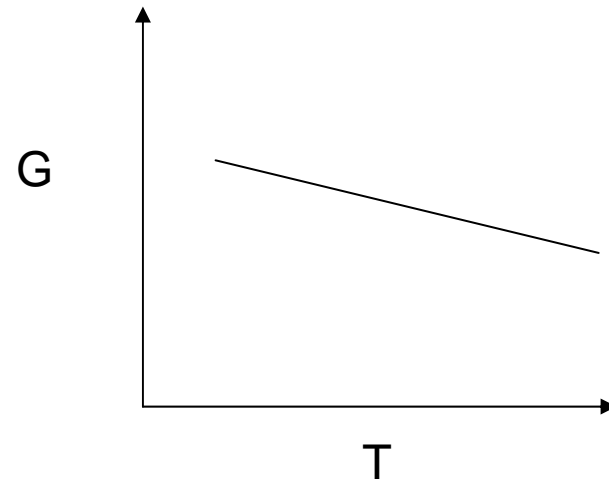
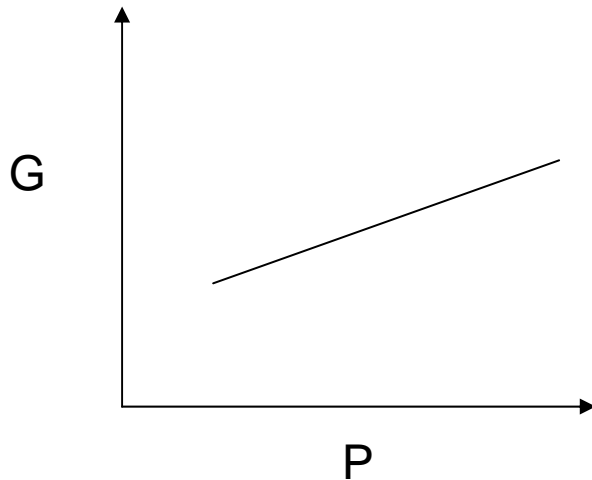
Stabilität in Abhängigkeit von Druck und Temperatur

- Materie versucht, sich in der für die jeweils vorherrschenden Druck- und Temperaturbedingungen „energetisch“ günstigsten Form zu organisieren
- Energieinhalt einer Phase kontrolliert ob die Phase unter bestimmten P- und T Bedingungen stabil ist oder nicht
- In der Mineralogie/Petrologie ist die Gibbs'sche (freie) Energie G die relevante Energiegröße
- G ist eine Funktion von Druck, Temperatur und Teilchenzahl: $G = G(T, p, n_i)$

Druck- und Temperaturabhängigkeit der Gibbs'schen Energie

$$\left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T = V$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_P = -S$$

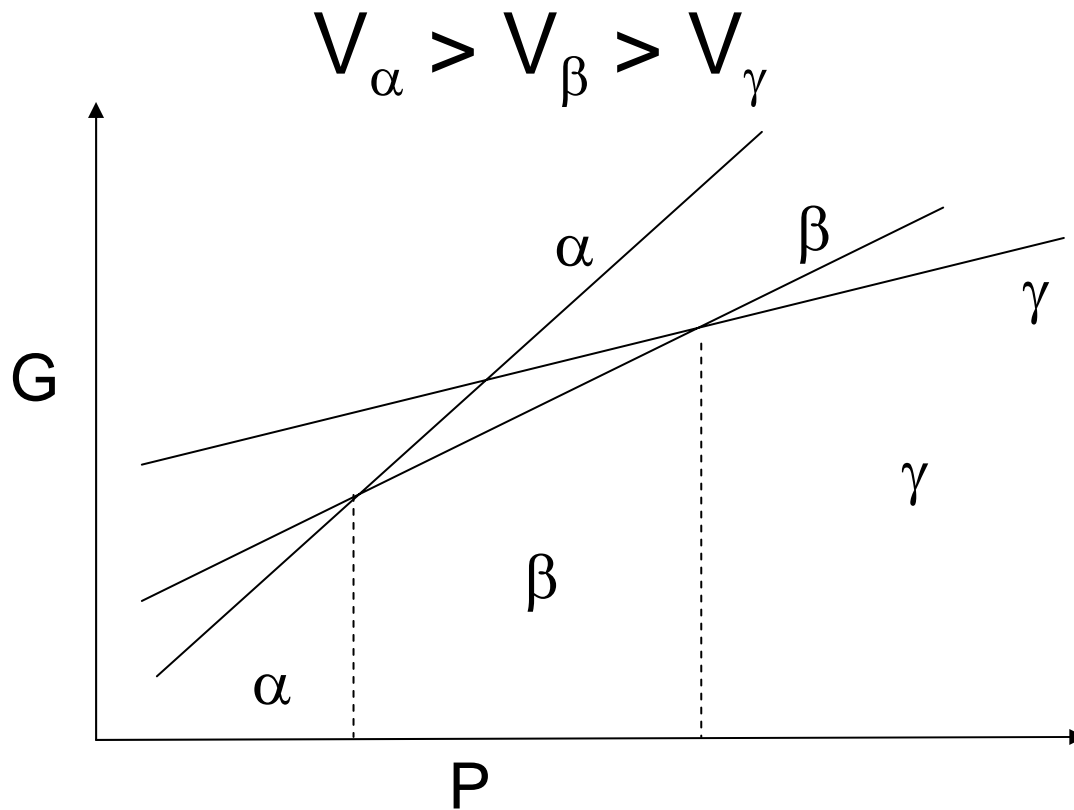


d.h. die Gibbs'sche Energie eines Minerals steigt mit zunehmendem Druck und fällt mit zunehmender Temperatur

Stabilitätskriterium - Minimale Gibbs'sche freie Energie

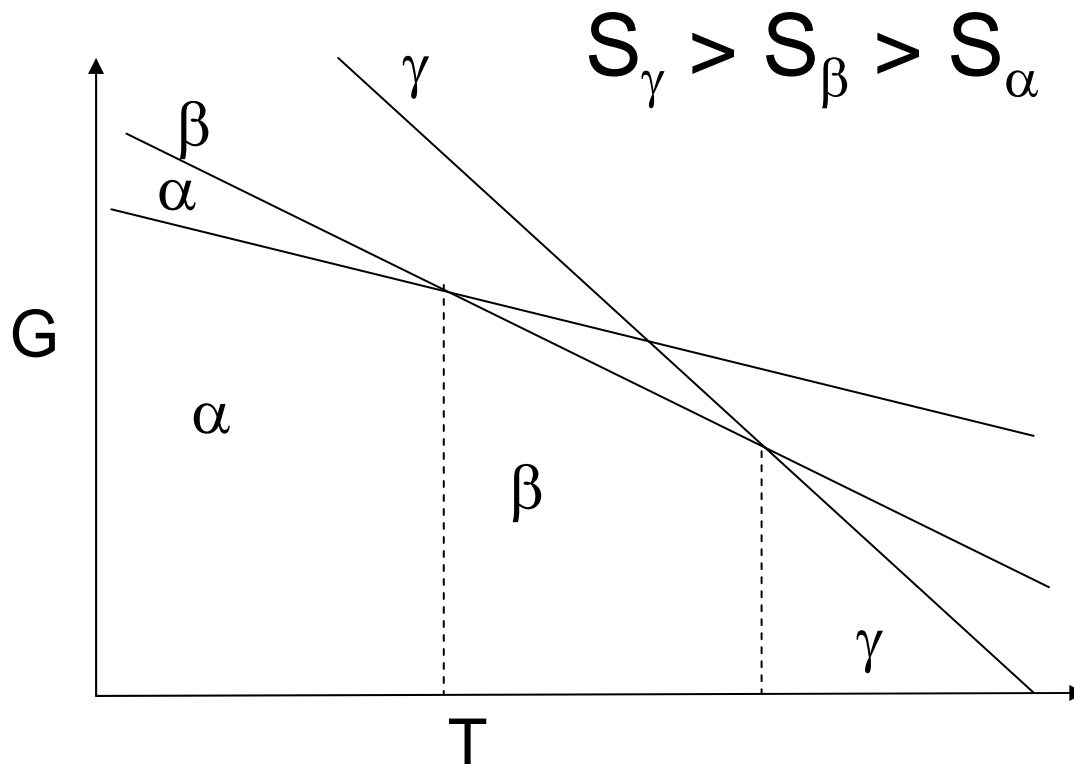
- In einem System ist diejenige Phase oder Phasenassoziation stabil, die bei den gegebenen Druck (P) und Temperaturbedingungen (T) den Zustand mit der geringsten Gibbs'schen freien Energie repräsentiert.
- Da die Gibbs'sche freie Energie einer Phase als Funktion von P und T variiert, sind bei unterschiedlichen P - T Bedingungen unterschiedliche Minerale oder Mineralassoziationen stabil.

Druckabhängigkeit der Mineralstabilität



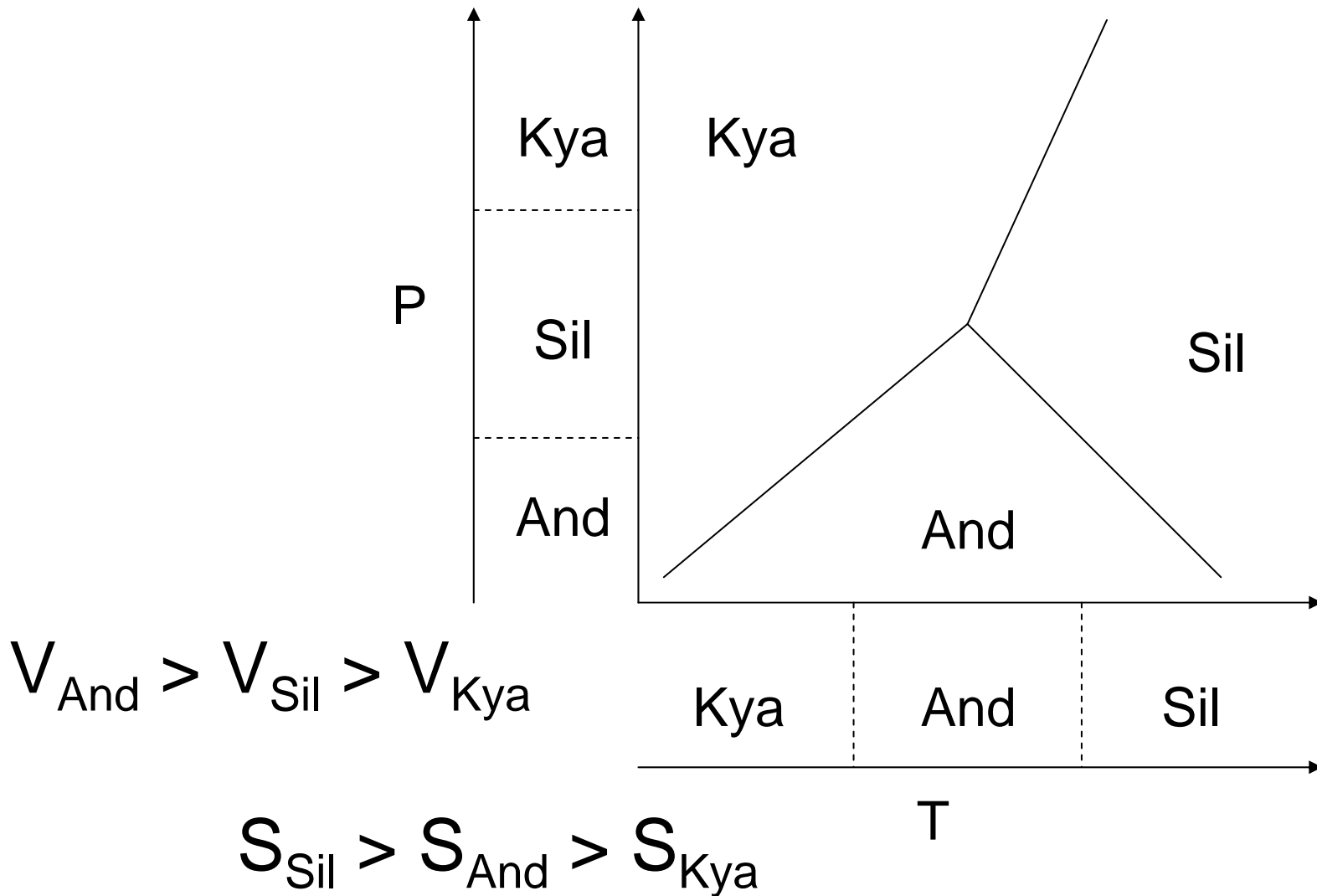
Mit zunehmendem Druck werden Phasen mit kleinem Molvolumen stabilisiert gegenüber Phasen mit großem Molvolumen

Temperaturabhängigkeit der Mineralstabilität



Mit zunehmender Temperatur werden Phasen mit großer Entropie stabilisiert gegenüber Phasen mit kleiner Entropie

Al₂SiO₅ Modifikationen



Al_2SiO_5 Modifikationen

