



Abschnitt 59

Pyrit

Pyrit ist das
Sulfid-Mineral



Es heisst Pyrit,

weil es einen
brauchbaren

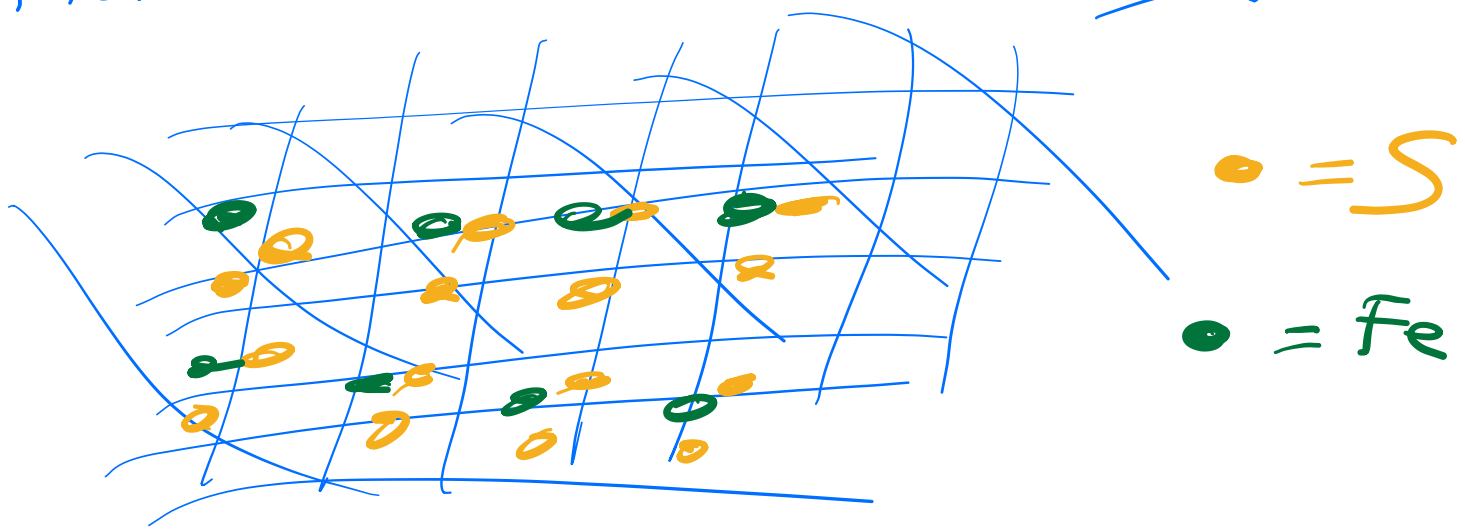
Funke produziert, wenn man
es schlägt. "Pyr" = Feuer (Gr.)

Es heisst auch "Fool's Gold"
(Narrengold), weil es so echtes
Gold ähnelt.



Die Kristallstruktur von $\mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ Pyrit ist ein kubisches Gitter, ausgestattet mit Eisen und Schwefel-Atomen in einer gewissen Arrangement.

Sei K die Gitter ^{kristall} mit den ^{ausgestattet} Atomen. $\subseteq \mathbb{R}^3$



$$\text{Sym}(K) = \{ \phi \in \text{Isom}(\mathbb{R}^3) \mid \phi(K) = K \}$$

$\text{Sym}(k)$ ist unendlich.

$\text{Sym}(k)$ enthält zwei wichtige Untergruppen:

1) $\text{Trans}(k) = \underline{\text{Translations-}} \underline{\text{untergruppe}}$

$:= \{ \phi \in \text{Sym}(k) :$

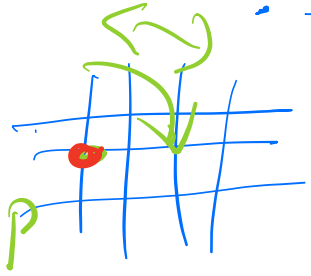
$\phi \text{ ist eine Translation} \}$

$\cong \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}$ (immer)

Gitter $\begin{matrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix}$

2) $S_{\text{ymp}}(K) = \underline{\text{Punktgruppe}}$

$:= \{ \phi \in \text{Sym}(K) :$



$\phi(p) = p \}$

wobei p ein fester Punkt
des Gitters ist

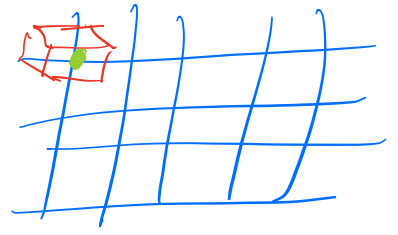
= Stabilisator von p .

Die Punktgruppe einer
Kristallstruktur ist
immer endlich.

Sie hängt von Wahl von p
nicht ab (bis auf
Isomorphismus).

Die Punktgruppe eines kubischen
Gitters ist

$\text{Sym}(W)$.



Wenn man das Gitter mit
Atomen dekoriert, gibt
es eventuell weniger

Symmetrien. Also die

Punktgruppe kann eine
eigentliche/strikte
Untergruppe von $\text{Sym}(W)$

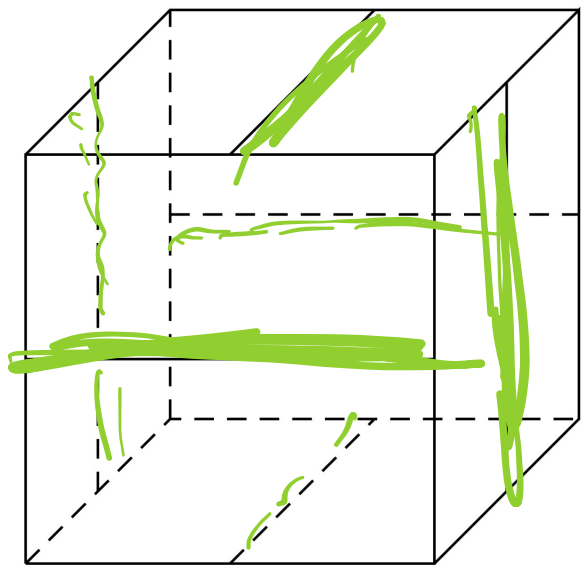
sein.

Bei Pyrit sind die Fe- und S-Atome leicht asymmetrisch platziert, sodass die Punktgruppe sich auf

$Sym(P)$

reduziert — die Symmetriegruppe eines Pyritokubers.

$Sym(P)$



P

$$\# \text{Sym}(W) = 48$$

$$\# \text{Sym}(P) = 24 \quad (\text{index} = 2)$$

Hier ist ein Bild der
Kristallstruktur von Pyrit.

Unlesbar!

Schrecklich

Understanding the Surfaces and Crystal Growth of Pyrite FeS_2

5

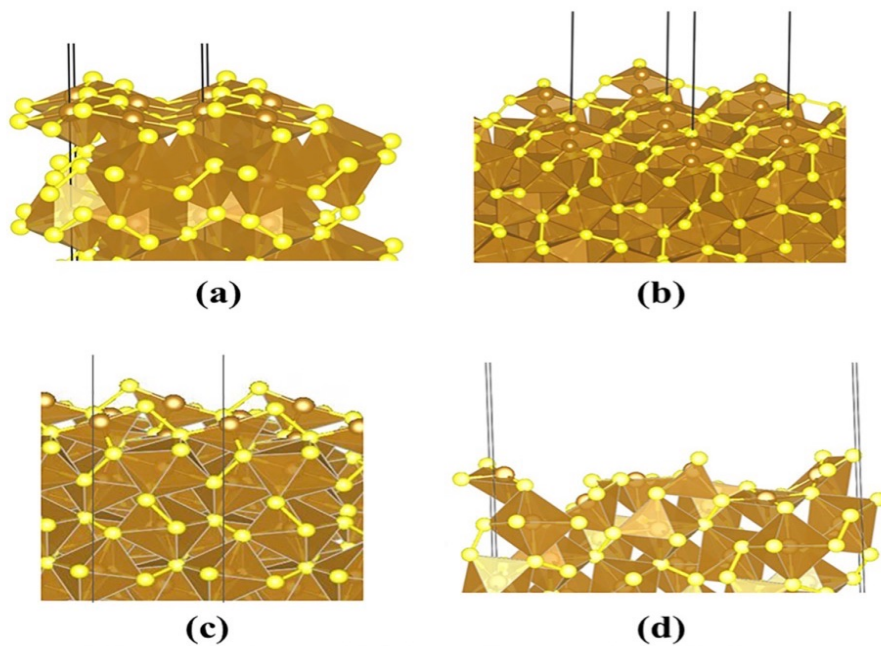


Figure 5. Polyhedral representation of surfaces (optimized using force field) a) (100), b) (111), c) (210), d) (310).

Die unendliche Gruppe $\text{Sym}(K)$
(deren Punktgruppe $\text{Sym}(P)$ ist)

heißt $P\bar{a}3$ oder T_h^6 . 230

Kristall habitus

Bisher haben wir einen unendlichen Kristall betrachtet. Aber reale Kristalle sind endlich gross. Und sie haben eine klare Form.



Würfel FeS_2



Oktaeder FeS_2

Die typische makroskopische Gestalt(e) eines Minerals

heisst der Kristall habitus
des Minerals.

Was bestimmt den Kristall-
habitus?

Der hat etwas

mit der (mikroskopischen)

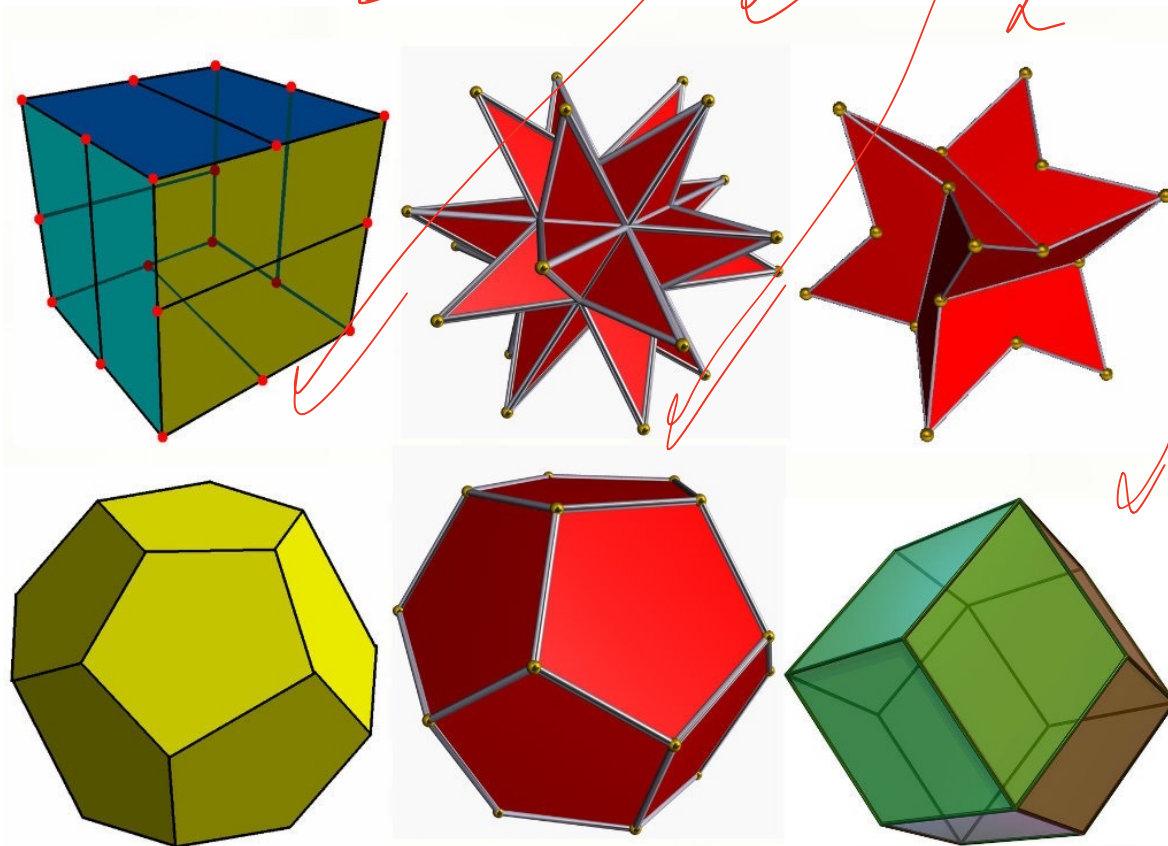
Punktgruppe des Kristalls
zutun,
aber was?

Pyrit-Kristalle haben einige
verschiedene Morphologien,
insbesondere

- Würfel
- Oktaeder
- Nicht-regulär-Dodekaeder
(= Pyriteder)

so wie viele exotische
Kombinationen davon !!

Hier gibt es etliche
ziemlich exotische theoretische
Polyeder mit der $Sym(P)$
Symmetrie:



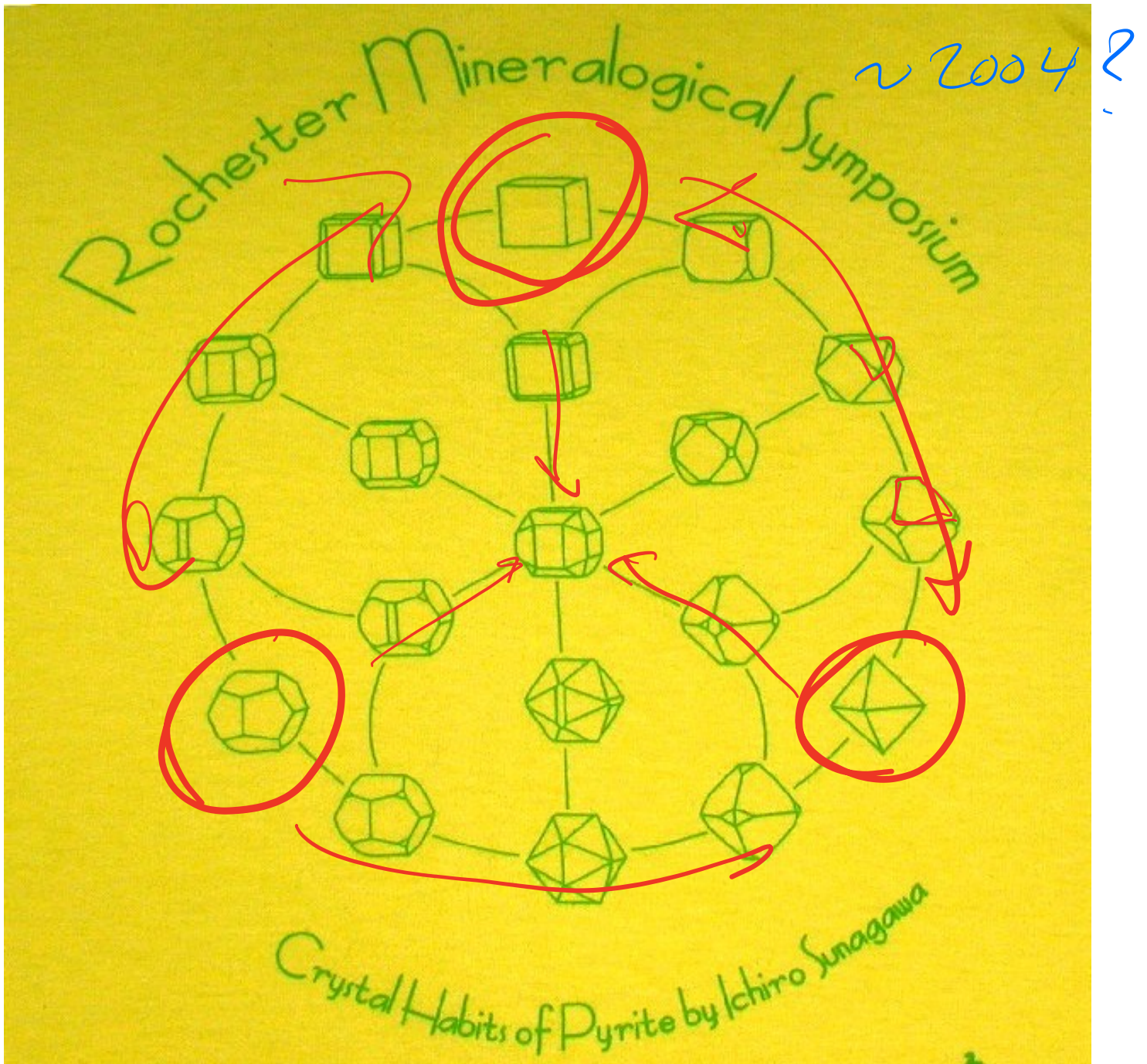
nicht-regulär
Pyritoeder

regulär
Dodekaeder

Rhombische
Dodekaeder

Es gibt sogar ein

2-parametrische Familie
von kompatiblen Polyedern.



Welche davon sieht man
in der Natur?

Alle!

Aber manche sind häufiger
als andere.

Siehe B. Morgan blog

www.rasny.org/pyrite

mit eine Unmenge Bilder
von echten Pyrit-Mineralien
(mit ganz verschiedenem Habitus).

References

- *Pyrite*, Wikipedia.
- C. Arrouvela, J-G. Eon, *Understanding the Surfaces and Crystal Growth of Pyrite FeS₂*.
- J. Baez, https://math.ucr.edu/home/baez/tcu/5_tcu.pdf.
- Burns-Glazer, 25-26, 345.
- S. Dutch, Miller indices, <https://stevedutch.net/symmetry/millerdx.htm> (contains an error)
- *Miller indices*, Wikipedia.
- B. Morgan, many Peruvian pyrites, <https://www.rasny.org/pyrite>.
- R. Van Dommelen, Nova Scotia pyrite blog, very readable, <http://nsminerals.atspace.com/pyrite.html>.
- *Wulff shape of crystals*, Scholarpedia, http://www.scholarpedia.org/article/Wulff_shape_of_crystals.

Abschnitt 60

Pyrit: Schieferungsflächen

Die Facetten, die man an einem Kristall sieht, sind durch zwei Mechanismen bestimmt:

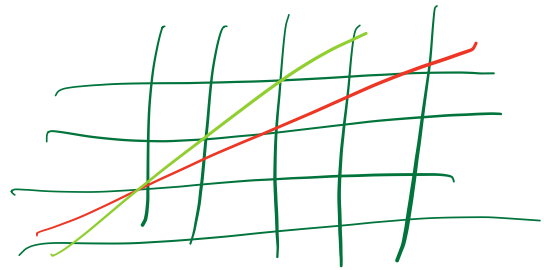
- 1) Schieferungsflächen (statisch) – bestimmt nur durch Energie und Geometrie
- 2) Wachstumsflächen (Kinetik) – bestimmt auch durch thermodynamische Variablen: Temperatur, chemische Umgebung

Schieferungsflächen:

Energie wird freigesetzt, wenn ein Kristall entsteht. Einmal sie frei ist, tendiert sie dorthin zu ziehen. Also ist sie nicht mehr verfügbar um den Kristall wieder abzubauen. Also: es gibt dann eine Tendenz, dass Kristalle entstehen. Nachher, sind die Kristalle durch chemische Bindungen zusammengehalten (so nennt man diese Tendenz).

Um einen Kristall zu
Spalten entlang einer
Fläche (meistens eine Ebene), muss
man diese Bindungen
trennen. Das kostet
Energie. Wieviel Energie,
hängt davon ab, welche
Bindungen getrennt sind.
Die Energie ist proportional
zur Flächeninhalt der
Trennungsfläche, aber
mit einem Gewicht, das
von dem Winkel zwischen

der Fläche und der Geometrie des Kristallgitters abhängt.



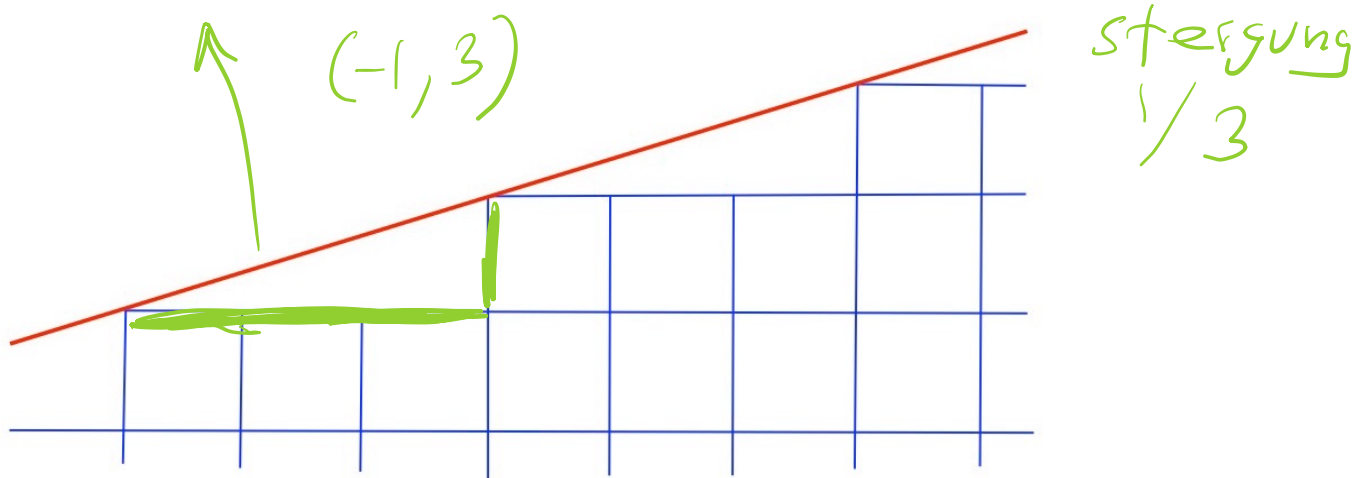
Es stellt sich heraus das die billigsten — und deshalb die am wahrscheinlichsten — Schieferungsflächen sind Ebenen mit einer "Steigung", die aus kleinen Ganzzahlen besteht. D.h. der Kristall schneidet sich

entlang einer Ebene der Form

$$E = \{ (x, y, z) :$$

$$mx + ny + pz = \text{Konst} \}$$

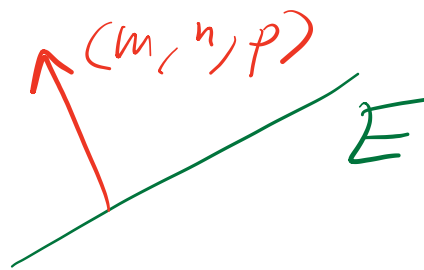
wobei m, n, p kleine
Ganzzahlen sind.



Dass es kleine Ganzzahlen
ist, verleiht der Oberfläche
eine einfache Treppenstruktur
mikroskopisch!

Das Tripel

mnp

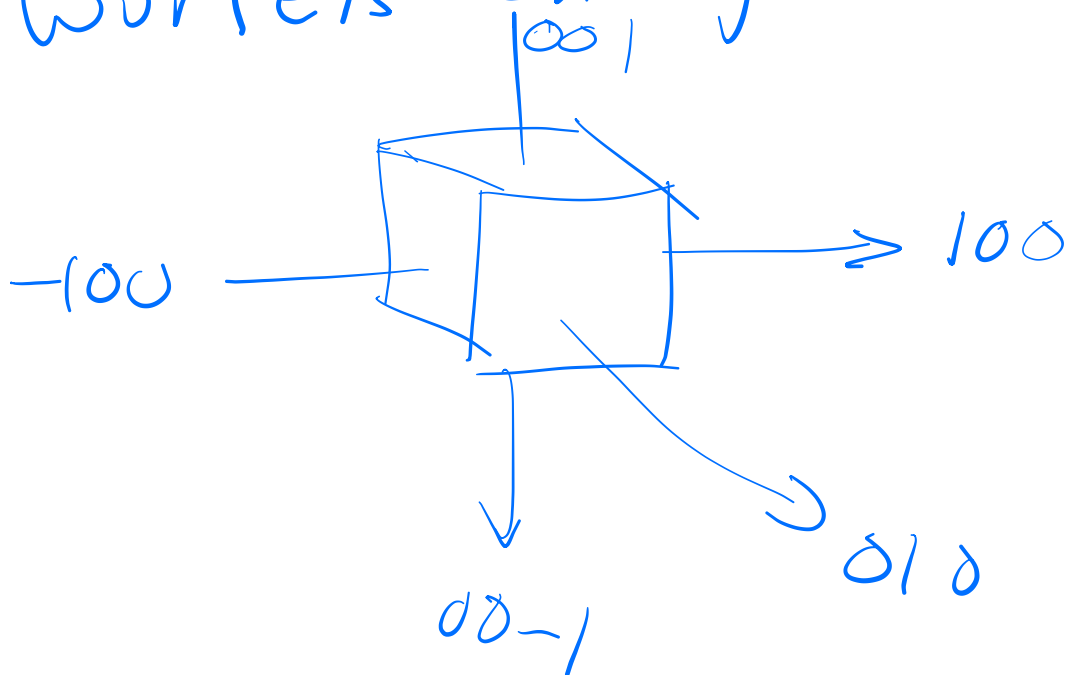


heißt Millersche-Indizes.

Die einfachsten
Schieferungsebenen sind

± 100 , 0 ± 10 , 00 ± 1 ,

die die Facetten eines
Würfels entsprechen



Es gibt 6 Millersche-Indizes
für die 6 Facetten des
Würfels. Die haben alle
dieselbe Energiedichte,
weil sie im gleichen
geometrischen Verhältnis
zum Kristallstruktur
stehen.

Noch ein einfaches
System von Ebenen ist
 $\pm 1 \pm 1 \pm 1$, 8 Tripel
die die 8 Facetten
eines Oktaeders entsprechen.

Die Energiedichte der Fläche (pro cm^2) ist verschieden für eine 111-Ebene als für eine 100-Ebene. Um heraus-^{energetisch}zufinden, welche ^{favorisiert} ist, muss man entweder

- * 1) messen Labor
- 2) rechnen Bleistift

Für Pyrit, die 210-Reihe
ist auch wichtig. Man
beginnt mit

210

und wendet die
Symmetriegruppe $Sym(P)$
an. Man bekommt z.B.

210, 021, 102

aber nicht

120° -Drehung

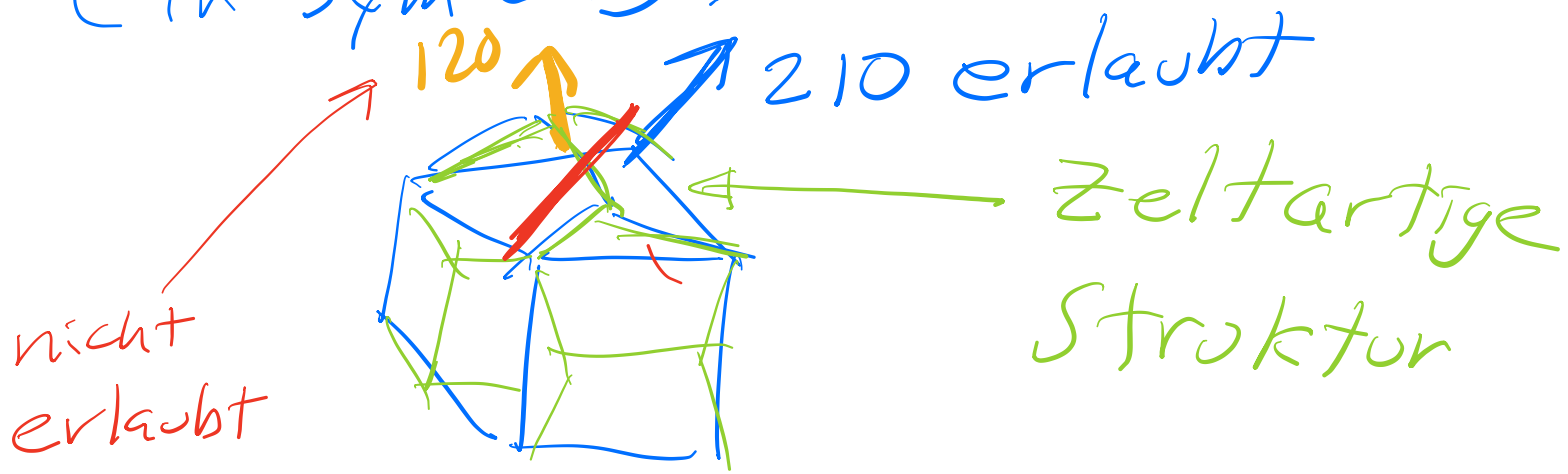
120, 012, 201,

weil die notwendige

Spiegelebenen

fehlen

(in $S_{ym}(CP)$)



Das vollständige System
von Millerschen-Indizes

ist

$$2 \neq 10$$

$$02 \neq 1$$

$$\neq 102$$

$$-2 \neq 10$$

$$0-2 \neq 1$$

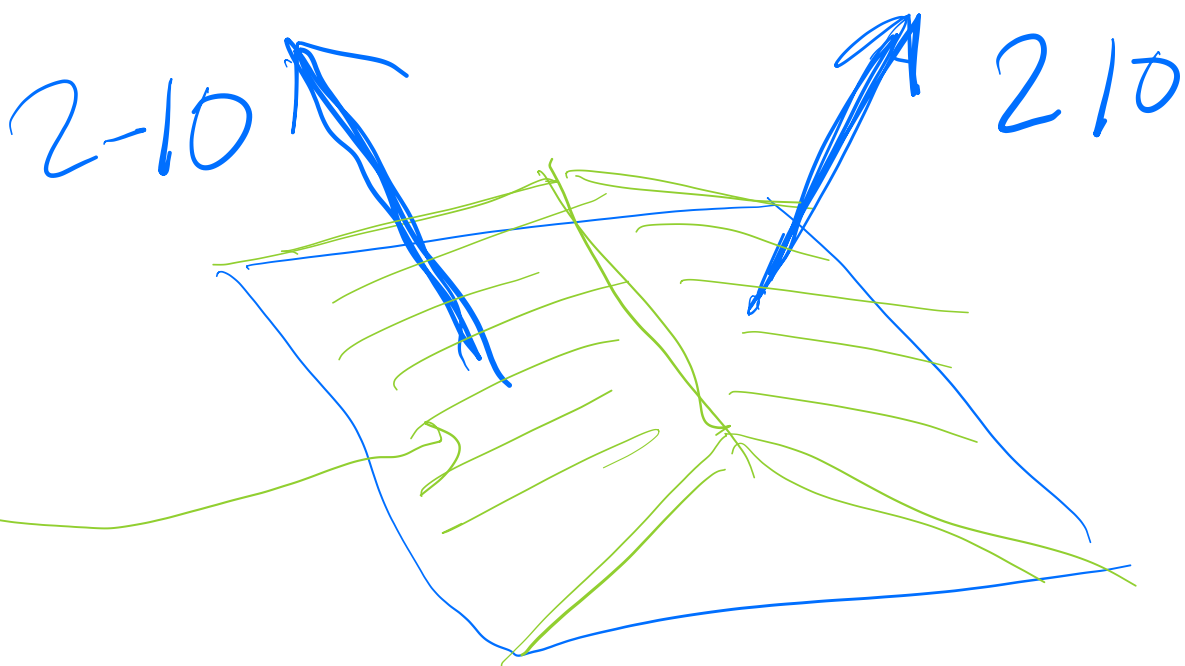
$$\neq 10-2$$

12 Tripel

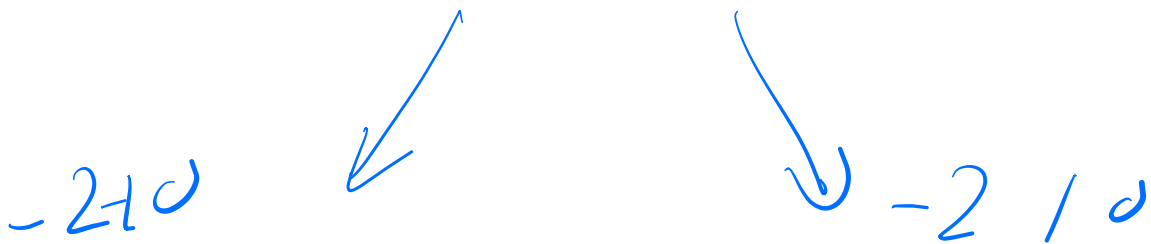
arrangiert in ⁶ Zwillingspaaren.

(Zwillingspaare sind
Indizes von den 2
Flächen einer

Zeltartigen Struktur:



unten?



Es gibt 12 Indizes.

Warum nicht 24? Weil

$$\# \text{Sym}(P) = 24.$$

Jedes Indiz-Tripel ist

2-mal erreicht durch

$\text{Sym}(P)$, weil die 0

in 210 (zum Beispiel)

führt zu einer

Spiegelung, die 210

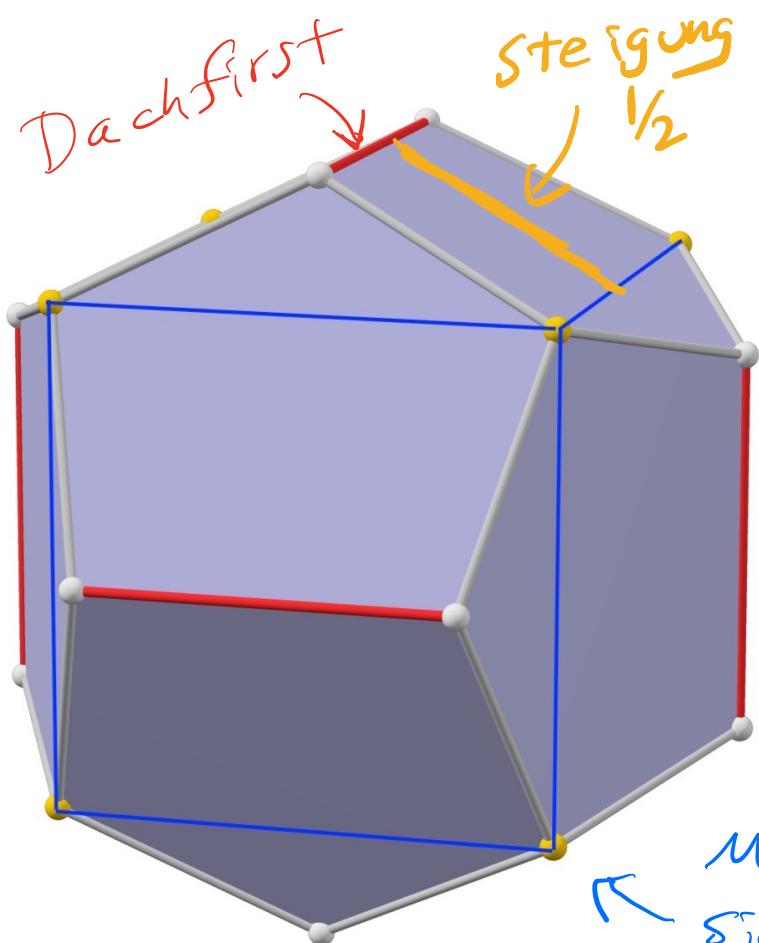
erhält. Also die

erreichbaren Indizes
sind

$$\frac{\# \text{Sym}(P)}{2} = \frac{24}{2}$$

$$= \underline{\underline{12}} \text{ Indizes}$$

Wir können viele Figuren finden, deren Facetten dem 210-System gehören, aber die einfachste und am meisten symmetrisch ist ein Dodekaeder mit 5-eckigen Facetten,



das man Pyritoeder nennt.

Man sieht den Würfel drin

Man kann ihn von einem
Würfel konstruieren, mit
einem "Zelt" auf jeder
Facette. Die Dächer
des Zeltes haben Steigung
 $\frac{1}{2}$ bezüglich der
Würfel facette.

Die Figur hat nicht
die ganze Symmetrie
des Dodekaeders. Die
Zelt - Dachfirste sind
anders als die anderen

Kanten. Sie sind ein
bischen länger? Ja oder nein?

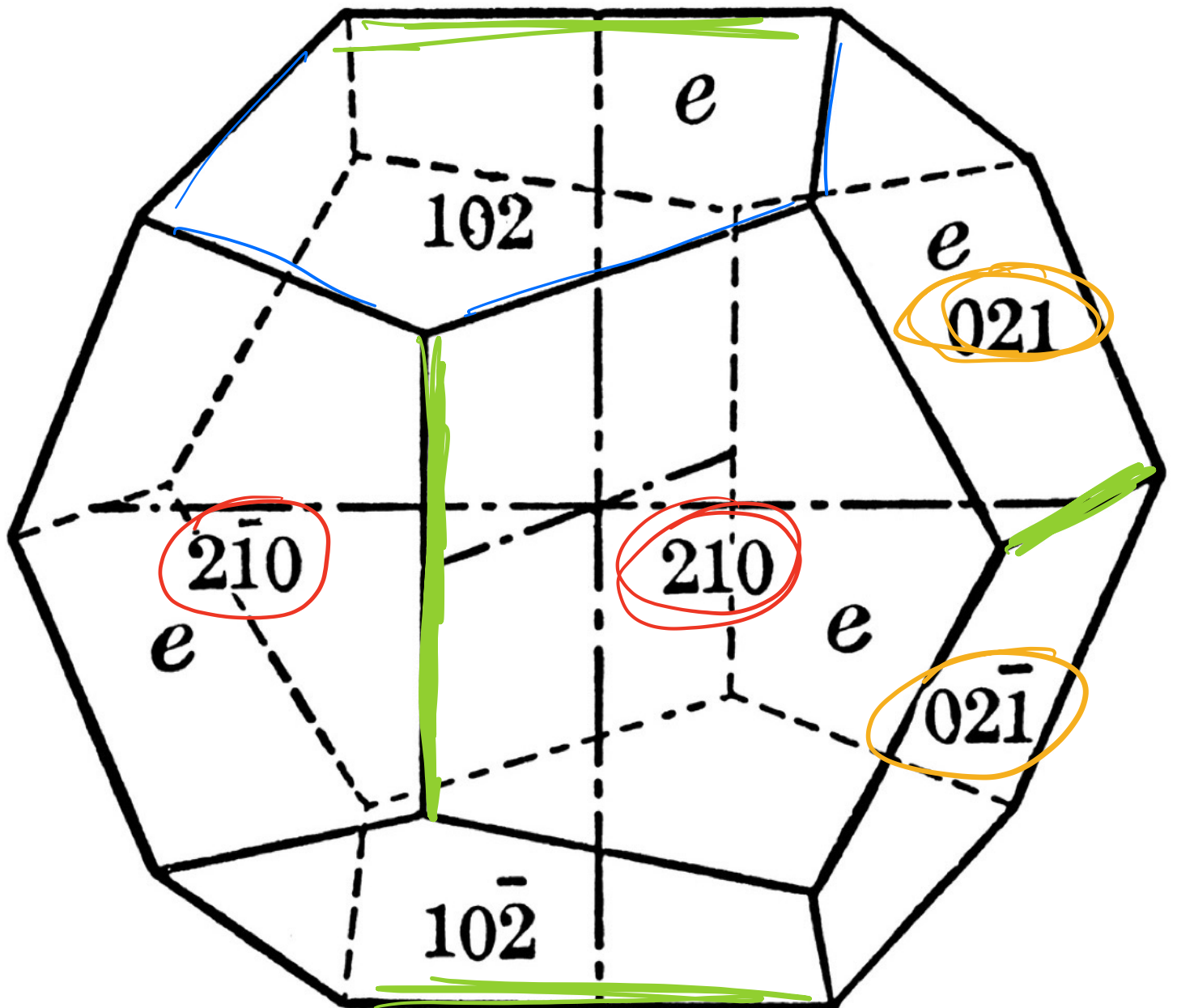
länger? YES ?
 kürzer? NO

Man kann die Figur so
visualisieren:

(2 gifs)

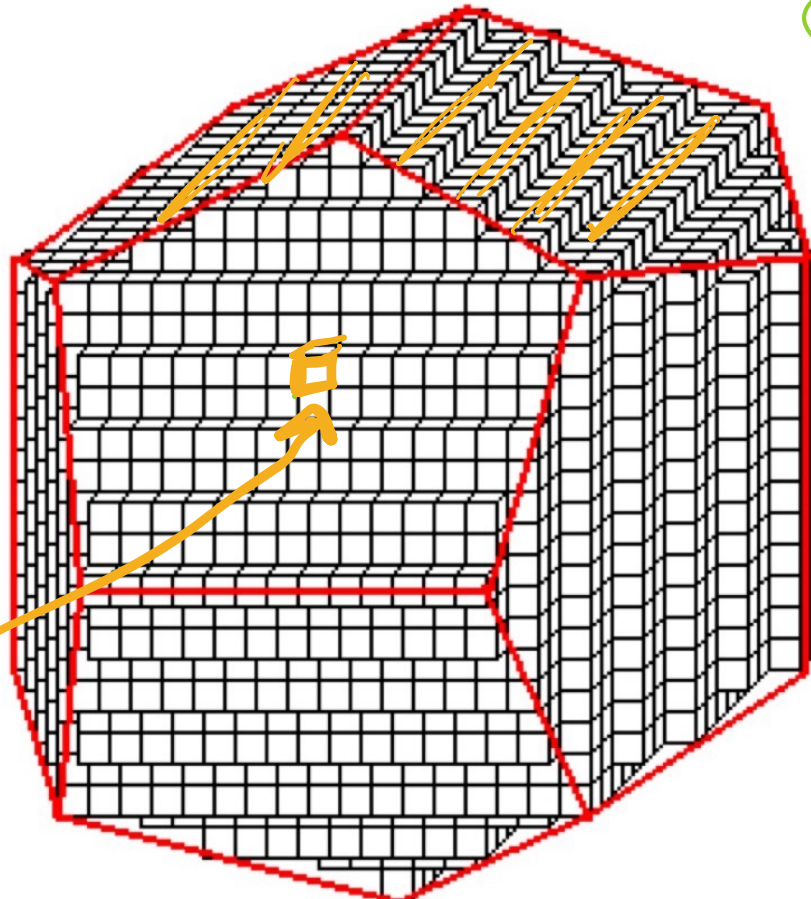
Ich weiss es nicht.

Pyriteder
mit Millersche - Indizes

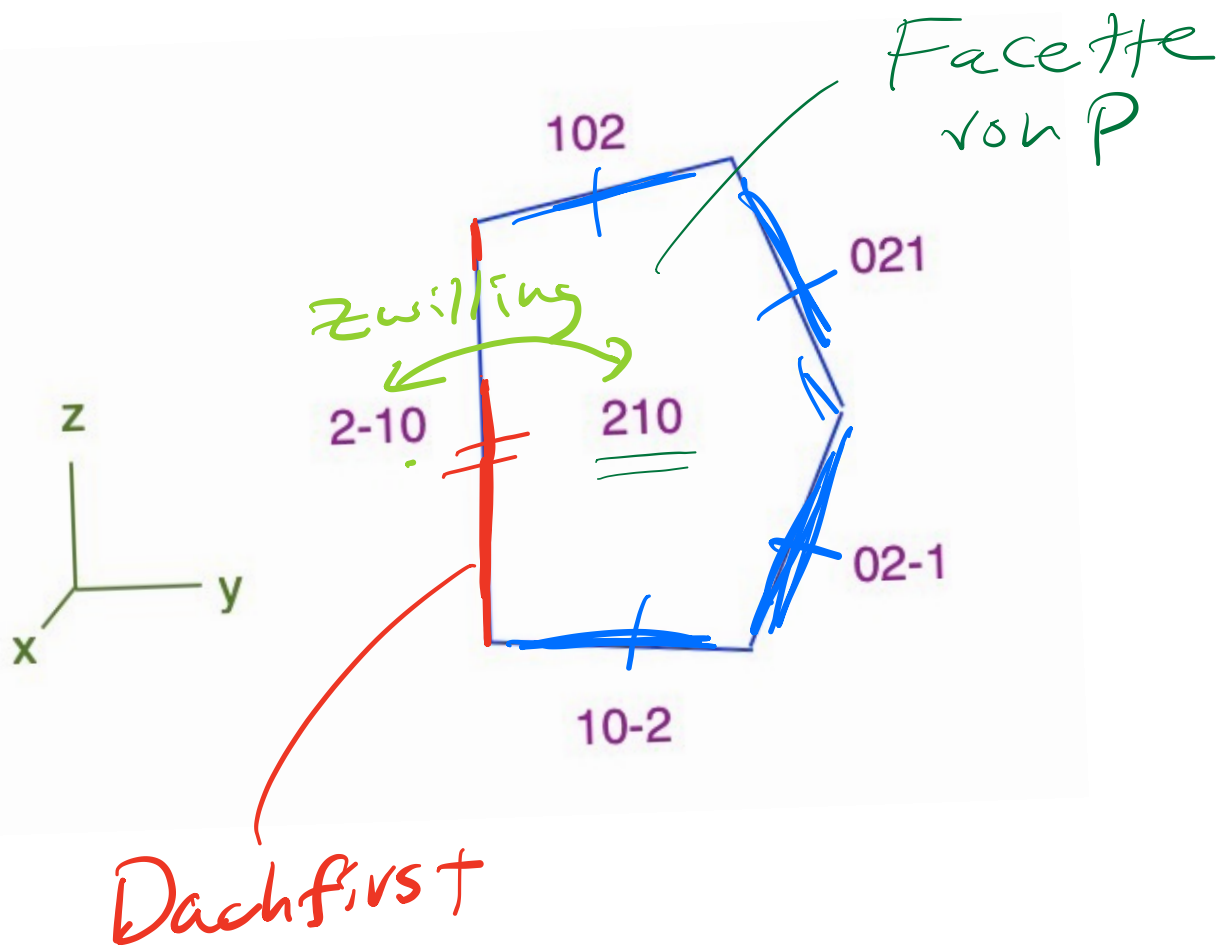


2:1
Steigung
mikroskopisch
Gitter-
würfel

winzigen
würfel



Pyritoider



Hier sieht man
die "striations" vom Pyrit
makroskopisch.

