

3. Cristaloquímica de los minerales.

3.1. Propiedades fundamentales de las sustancias cristalinas

Se describen como materiales cristalinos aquellos materiales sólidos cuyos elementos constitutivos se repiten de manera ordenada y paralela y cuya distribución en el espacio muestra ciertas relaciones de simetría. Así, la propiedad característica y definidora del medio cristalino es ser periódico. Además de ésta, otras propiedades características son la simetría, la homogeneidad, la anisotropía, y capacidad para formar los cristales con formas externas (cristales con caras).

Por tanto, el cristal está formado por la repetición monótona de agrupaciones atómicas paralelas entre sí y a distancias repetitivas específicas (traslación). La red cristalina es una abstracción del contenido material de este medio cristalino, y el tratarlo únicamente en función de las traslaciones presentes constituye la esencia de la teoría de las redes cristalinas (Fig. 3.1).

En esta red espacial existe una porción del espacio cristalino, denominado celda unidad, el cual repetido por traslación y adosado desde un punto reticular a otro engendra todo el retículo. De esta manera, conociendo la disposición exacta de los átomos dentro de la celdilla unidad, conocemos la disposición atómica de todo el cristal.

En una red cristalina existen siempre tres traslaciones no coplanarias que tienen las dimensiones mínimas entre todas las traslaciones posibles de la red: son las traslaciones fundamentales o constantes reticulares, de dimensiones submicroscópicas. La porción del espacio cristalino limitado por estas traslaciones constituye la celda fundamental del cristal y es característica del mismo (Fig. 3.2).

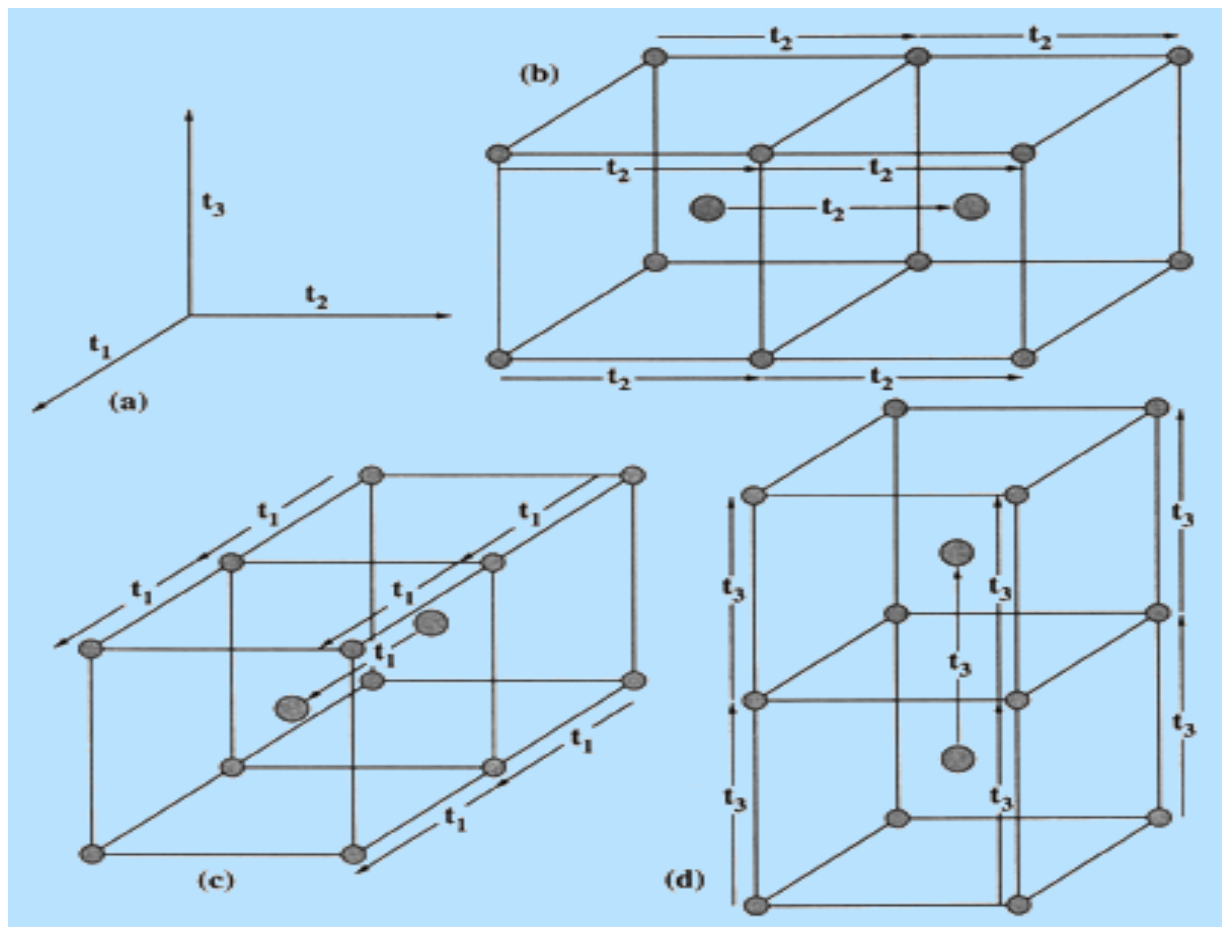


Figura 3.1. En la red cristalina todos los puntos, nudos, tienen exactamente los mismos alrededores y son idénticos en posición con relación al patrón o motivo que se repite. Este motivo es una constante del cristal ya que constituye el contenido material, es decir, su naturaleza atómica, de manera que $\text{red} \times \text{motivo} = \text{cristal}$.

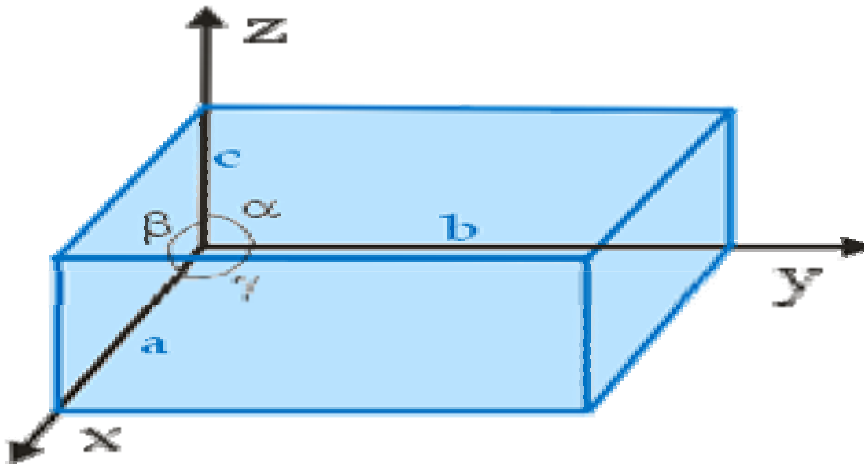


Figura 3.2. Celda unidad y sus parámetros.

Se denomina celda unitaria aquella que es la menor subdivisión de una red que retiene las características generales de toda la retícula y si reunimos celdas unitarias idénticas se construye una red. Red es un arreglo periódico de puntos en el espacio. La celda unitaria es la mínima subdivisión. Los valores de las distancias reticulares que describen el tamaño y la forma de la celda unitaria, son las dimensiones de sus lados y sus ángulos. Hay una diferencia entre las celdas simples y complejas. En las primeras los nudos están solamente en las vértices, en las segundas se colocan no solamente en las vértices, sino también en algunas partes dentro o en la superficie de la celda.

Veamos las propiedades principales del estado cristalino de minerales.

Periodicidad

El medio cristalino es un medio periódico ya que a lo largo de cualquier dirección la materia que lo forma se halla a distancias específicas y paralelamente orientadas, de forma que la orientación y distancias a que se encuentran dependen de la dirección elegida. La distancia según

la cual las unidades estructurales se repiten paralela e idénticamente a lo largo de una dirección dada se denomina traslación. Éstas definen la denominada red cristalina, constituida por una serie de puntos (nudos) separados entre sí por las citadas traslaciones.

Simetría

La palabra griega "simetría" significa que existe regularidad en la posición de los objetos o sus partes aisladas en el espacio. La simetría es una propiedad más general de cualquier cuerpo cristalino y su investigación es una tarea más importante en la cristalografía. La simetría rige al mundo de los cristales. Esto es una regularidad más general de las sustancias cristalinas. La simetría determina: 1) Las leyes de la distribución de los elementos estructurales en las redes cristalinas, 2) La posición de las caras (facetas) de los cristales en el espacio (Fig. 3.3).

Homogeneidad

En una red cristalina la distribución de nudos alrededor de uno de ellos es la misma, independientemente del nudo que tomemos como referencia. Así una red es un conjunto de nudos homogéneos o bien, un conjunto homogéneo de nudos.

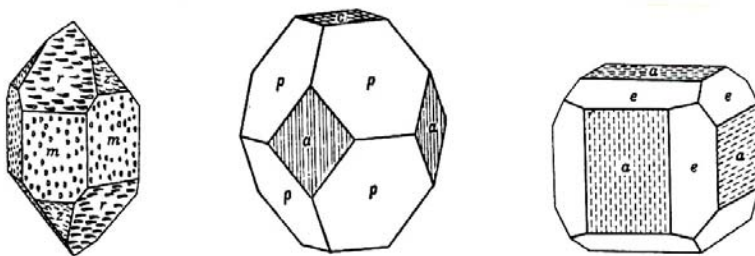


Figura 3.3. Cristales minerales de diferentes formas: Cuarzo (a), Apofilita (b), Pirita (c).

La homogeneidad es una propiedad de los cuerpos físicos, que significa ser iguales en

todo el volumen de la sustancia. Por ejemplo, dos volúmenes de una sustancia, con una orientación igual en el espacio, pero tomadas en diferentes partes de esta sustancia, son idénticos por todas las propiedades. Es decir, las propiedades iguales por las direcciones paralelas.

Anisotropía

La red de nudos constituyente del estado cristalino es anisótropa en cuanto a las distancias entre nudos, es decir, ésta depende de la dirección según la cual se mide.

Las propiedades de los cristales no son iguales por las direcciones no paralelas. Diferentes disposiciones atómicas a lo largo de diferentes planos o direcciones cristalinas, dan lugar a estas propiedades anisotrópicas (vectoriales). Puesto que la magnitud de la propiedad depende de la dirección, varía al cambiar la dirección cristalográfica. Algunas de las propiedades vectoriales de los cristales son: dureza, conductividad térmica y eléctrica, velocidad de la luz, etc. (Fig. 3.4). Entre las propiedades vectoriales se destacan sobre todo las propiedades mecánicas y ópticas de los cristales minerales.

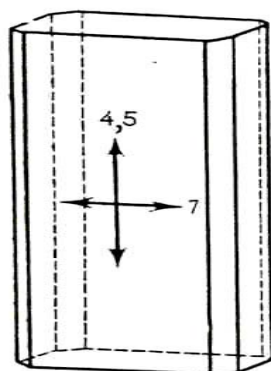


Figura 3.4. Anisotropía de la dureza de la Cianita Al₂OSiO₄

Una característica de los minerales que se encuentran en forma cristalina, es su propiedad

de manifestarse bajo formas poliédricas naturales (Fig. 3.3).

A cada uno de los minerales sólidos le es inherente una forma cristalina propia que depende de la composición química y de la estructura de la sustancia de que se compone el mineral, así como de las condiciones en que se formó. Los cristales crecen con las caras diferentes, pues las velocidades del crecimiento son diferentes, por las direcciones diferentes. Los planos que limitan los cristales se denominan caras o facetas, las líneas de intersección de los planos, aristas y los puntos de intersección de éstas, vértices.

La propiedad de los minerales sólidos adoptar formas de poliedros regulares, viene determinada por una distribución ordenada y regular de sus partículas componentes: átomos, iones, moléculas. La estructura del cristal se caracteriza por la distribución especial de estas partículas.

Así pues, la forma externa de los cristales depende de la estructura de la sustancia de que se componen. Se conocen estructuras atómicas, iónicas, radical iónicas, moleculares, según sea lo que se encuentre en los nudos de la red espacial del mineral sólido correspondiente.

3.2. Dos tipos de las sustancias sólidas

El estado cristalino se caracteriza por la disposición determinada de las partículas en el espacio, es decir, las sustancias con la estructura cristalina se caracterizan por el orden inmediato y determinado (Fig. 3.5). Por otra parte, cada partícula está en un lugar determinado de la estructura y por eso se caracteriza del orden a largo alcance. Como resultado de esto, los cristales naturales tienen la Anizotropía, de sus propiedades. Durante el calentamiento de los cuerpos cristalinos y por el aumento de las amplitudes de las oscilaciones de las partículas en la estructura, llega el momento cuando la sustancia se funde y se convierte en el estado líquido. El orden a largo alcance desaparece, aunque el orden a corto alcance se conserva. En el estado líquido no existe el orden a largo alcance y por eso todas sus propiedades son isotrópicas. A

veces, se puede enfriar el líquido y elevar la viscosidad tanto, que se transforma en un cuerpo sólido, aunque el orden a largo alcance ya no existe.

Así surge el estado amorfo (Fig. 3.5). Los cuerpos amorfos no producen la difracción de los rayos X y son isótropos, como también sus propiedades. Los vidrios diferentes son los ejemplos típicos de los cuerpos amorfos. Subrayamos que el estado amorfo no tiene una temperatura determinada de transición al estado líquido.

Los cuerpos amorfos se encuentran en la naturaleza rara vez. Ellos se forman como resultado del enfriamiento rápido del magma de Silicio (obsidiana) o del magma, el cual se forma por el golpe del meteorito.

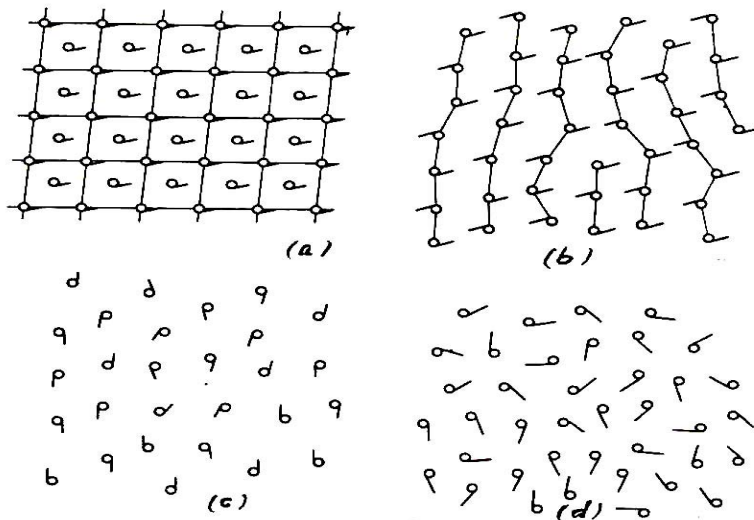


Figura 3.5. Esquema de la disposición de las partículas materiales en los cristales (a), polímeros (b), cristales líquidos (c), cuerpos amorfos (d).

A veces, las sustancias amorfas se forman por la destrucción de la estructura cristalina, por ejemplo, por la oxidación o descomposición del compuesto. En el resultado, la sustancia

inicial con la composición compleja se descompone por los compuestos más simples. Este fenómeno se llama la descomposición metamicta.

La sustancia nueva puede ser amorfa o es una mezcla criptocristalina de unos compuestos. Esta descomposición es típica para los minerales, con la composición compleja y particularmente para los minerales que contienen las impurezas radioactivas.

El estado amorfo es inestable desde el punto de vista termodinámico y por eso a través del tiempo los cuerpos amorfos tienen la tendencia a la recristalización (por ejemplo la aparición de esferulitas de cristobalita en la obsidiana). El tiempo de la transición del estado amorfo al estado cristalino depende de la naturaleza de la sustancia (se cambia de decenas días para el azúcar hasta centenas de años para el vidrio). El estado cristalino tiene un valor mínimo de una energía interna y por eso es más estable.

Es posible obtener la misma sustancia y en el estado amorfo y en el cristalino. Esto depende de diferentes factores, por ejemplo: de la viscosidad de la colada, de la velocidad del enfriamiento, etc.

Lo más fácil, el estado amorfo se forma por la cristalización de las coladas viscosas (por ejemplo, el vidrio); las coladas menos viscosas (por ejemplo, los metales) por el enfriamiento se cristalizan.

Todavía, recientemente, existía la persuasión que no se pueden obtener los metales amorfos. Durante los últimos años, apareció la tecnología nueva metalúrgica para la obtención de las aleaciones amorfas. El estado amorfo de los metales, estaba obtenido del estado líquido por las velocidades del enfriamiento más que 10000 K/seg.

Esta velocidad del enfriamiento permite alejar el proceso de formación del estado cristalino para una serie de los metales y aleaciones. En el estado amorfo fueron obtenidas unas cintas delgadas (con el espesor 10 micrones y la anchura 1 cm). Los metales en el estado amorfo

poseen a algunas propiedades que permiten usarlas en la práctica amplia (cabecitas para la grabación magnética, hojas de afeitar, etc).

El vidrio cristalino fue obtenido por las velocidades pequeñas del enfriamiento. Este vidrio se llama el sitalo y es más firme que el vidrio habitual.

Ahora, existen las sustancias que por su estructura interna son intermedios entre el estado cristalino y el amorfo los polímeros y los cristales líquidos (ver Fig.3.5). Las moléculas de los polímeros consisten de los grupos atómicos estables: eslabones monómeros que son unidos en las cadenas con los enlaces covalentes fuertes.

Las moléculas se establecen paralelamente por el empaquetamiento de las cadenas. La cristalización y el orden de la estructura de los polímeros dependen de las características de las moléculas aisladas que tienen grande longitud y pueden unirse en todas las direcciones. Los polímeros son anizótropos a diferencia de los cuerpos amorfos.

El orden de la estructura de los cristales líquidos es intermedio entre el estado cristalino y el líquido. Los cristales anizótropos y al mismo tiempo fluidos como y los líquidos habituales. Ellos tienen el intervalo determinado de la temperatura, donde pueden existir: encima de este intervalo los cristales líquidos se funden en el líquido isótropo y debajo del mismo, se cristalizan. Las propiedades y la estructura de los cristales líquidos se determinan por las formas alargadas de las moléculas, que consisten éstas sustancias.

3.3. Redes cristalinas

La investigación de la forma exterior de los cristales de los minerales aún en el siglo XVII, aportaba de los investigadores progresivos la idea de que los mismos consisten de partículas, los cuales se colocan en un orden determinado. Más tarde para la investigación del orden en sus posiciones y sus relaciones con la simetría de los cristales, comenzaron

respectivamente a identificar las partículas aisladas con los puntos en el espacio. Eso es más importante que en aquel tiempo no tuvieron las posibilidades de recibir las ideas de la forma y de las dimensiones de las partículas aisladas. Al mismo tiempo, el acceso idéntico permitió utilizar los métodos matemáticos exactos.

Por lo tanto, apareció la representación de la red cristalina (Fig. 3.1), como de la formación tridimensional periódica infinita en que los puntos regularmente alternan en el espacio (Fig. 3.6). Los puntos aislados comenzaron a considerarse en la calidad de los nudos de la red cristalina.

La totalidad de los nudos que están en la recta, recibió el nombre de fila. El plano que va a través de cualquiera de los tres medios se llama la red plana (malla), los paralelepipedos, las vértices de los cuales son los nudos se llaman las celdas unidades.

La correspondencia entre la red espacia y la forma externa del cristal, consiste en que cada cara real corresponde en la malla determinada de la red cristalina; cada arista del cristal, es la fila de la red; cada vértice del cristal es el nudo determinado.

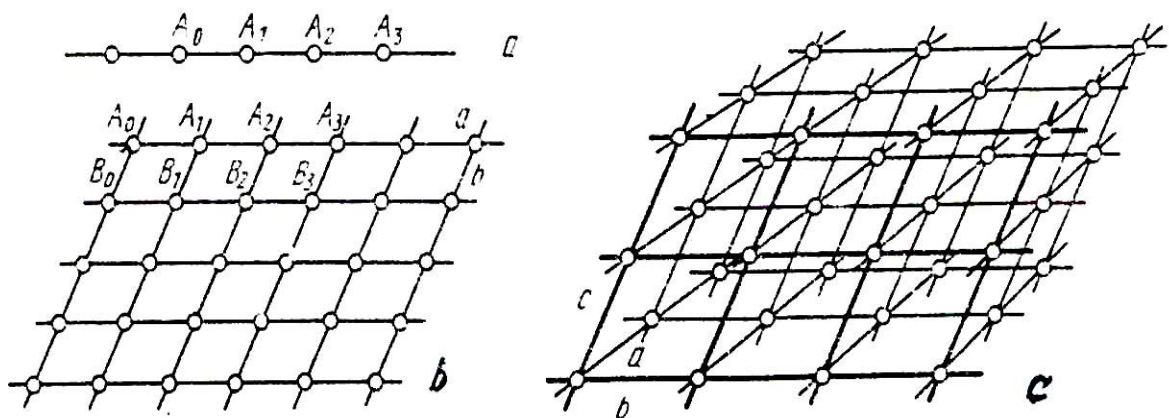


Figura 3.6. Red espacial (c), y sus elementos principales: una fila (a) y una malla (b).

En la descripción matemática de las redes cristalinas de diferente simetría, se usa el sistema coordinativo y el paralelepípedo elemental (celda elemental – Fig.3.2). Cada paralelepípedo tiene tres ejes coordinados (**a,b,c**) que son iguales a las partes de la celda elemental y tres ángulos (α , β , γ) entre estos ejes. Estas características son los parámetros o períodos de la red (la métrica del cristal).

La elección del sistema coordinado cristalográfico (celda elemental) está relacionada con la clasificación de los cristales por los sistemas. Esta clasificación explica que la totalidad de los elementos de simetría depende de la estructura cristalina, la cual a su vez depende de su celda elemental y sus parámetros.

Por primera vez en el siglo XIX el científico francés Bravais describió matemáticamente 14 tipos de las celdas unidades (Fig. 3.7). Estos 14 tipos de redes cristalinas forman la cantidad innumerable de las estructuras. A finales del siglo XIX, el científico famoso ruso Evgraf Fiodorov, determinó 230 variantes en la distribución espacial de las partículas de los cristales. Posteriormente sus conclusiones se vieron confirmadas por el método de Rayos X, investigaciones desarrolladas por Laue. Desde entonces, la Cristalografía, que era ciencia basada sólo en suposiciones y en cálculo matemático, siendo por ello los cristales elementos susceptibles de un estudio perfecto, del que se deduce su estructura interna tan peculiar, en ciencias, basada en realidades.

Una de las particularidades principales de la red cristalina es la repetición de sus nudos en las direcciones diferentes, la repetición de las mallas, que están situadas paralelamente. Toda la red se puede representar como el sistema repetido de las celdas de la red. Habitualmente entre los últimos escogen la celda elemental con la ayuda de la cual puede ser construir (por camino de las translaciones) toda la red cristalina (Fig. 3.7). La celda elemental debe tener el volumen mínimo,

su sistema tiene que corresponder al sistema de toda la red, el número de las aristas y de los ángulos iguales deben ser máximos; el número de los ángulos, entre ellos tienen el nombre de los parámetros de la celda. También la celda elemental de la estructura cristalina tiene que corresponder a estas exigencias, pero ella puede corresponder no a una, sino a dos, tres, cuatro y más la cantidad de las celdas elementales de la red cristalina correspondiente.

Las cantidades de las aristas de la celda elemental se señala **a,b,c** (correspondiente a los ejes coordenadas de los poliedros **x,y,z**) y los ángulos entre los ejes: **α,β,γ** . La caracterización de las celdas elementales son las siguientes:

1. SISTEMA CUBICO: $a=b=c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$; es suficiente el parámetro a (todas las aristas de la celda tienen que ser iguales y todos los ángulos rectos);
2. SISTEMA TETRAGONAL: $a=b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ (hay que calcular una constante $a:c$);
3. SISTEMA HEXAGONAL Y TRIGONAL: $a=b\neq c$; $\alpha=\beta=90$, $\gamma=120$; las celdas se caracterizan por dos parámetros: a y c ;
4. SISTEMA RÓMBICO: la celda tiene tres parámetros: $a\neq b\neq c$; $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$;
5. SISTEMA MONOCLÍNICO, la celda elemental tiene cuatro parámetros $a\neq b\neq c$ y β ($\alpha=\gamma=90\neq\beta$);
6. SISTEMA TRICLÍNICO: la celda tiene cinco parámetros: $a\neq b\neq c$ ($\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^\circ$).

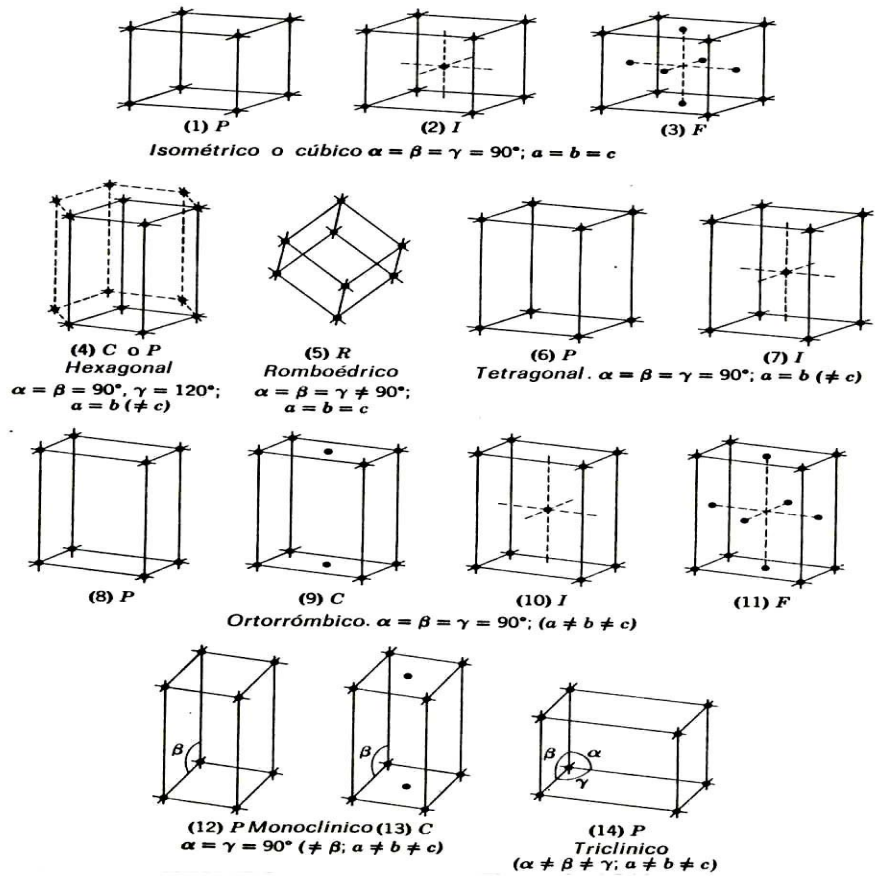


Figura 3.7. Redes espaciales de Bravais.

3.4. Principio del empaquetamiento

Para la comprensión correcta de las particularidades de las estructuras de los cristales y sus propiedades físicas, tiene una importancia grande el esclarecimiento de las regularidades del espacio llenado por las partículas aisladas.

El caso simple es el empaquetamiento de las esferas de igual radio (Fig. 3.8). Colocamos las esferas iguales (A) en una capa. Entre ellos se quedan las vacías (B y C), la cantidad de los cuales es más en dos veces, que la cantidad de las esferas. La capa siguiente de las esferas se puede poner en las vacías del tipo B y entonces las vacas del tipo C se quedan libres o al

contrario (B son libres, C- se ocupan). En la segunda capa también aparecen dos tipos de vacíos T y O (Vacíos tetraédricos -T- y octaédricos -O- son diferentes por el número de coordinación - 4 y 6- y por el tamaño - $0.225 R$ y $0.415 R$) y por lo tanto, la siguiente capa se puede colocar de dos modos distintos (Fig. 3.9).

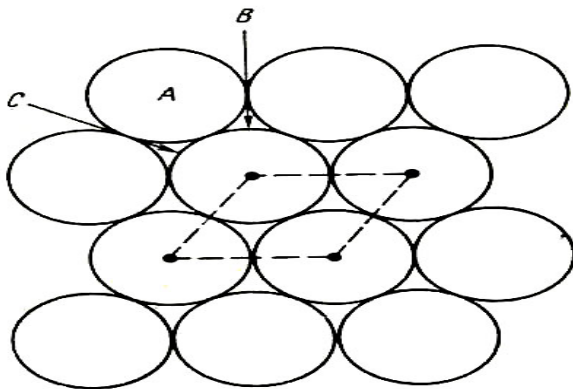


Figura 3.8. Capa de plano de las esferas de igual radio.

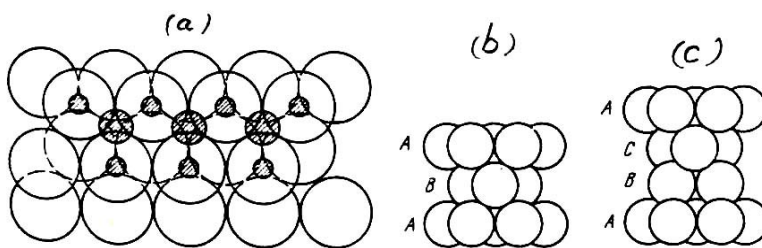


Figura 3.9. Vacíos octaédricos y tetraédrico entre dos capas de las esferas (a) y los empaquetamientos: hexagonal (b) y cúbico (c).

Así, por ejemplo, la tercera capa de las esferas del mismo diámetro se coloca en los vacíos del tipo T de la segunda capa. En este caso, los centros de las esferas de la capa y también la tercera capa, repiten completamente a la primera. En este empaquetamiento aparece un eje de simetría L_6 y el empaquetamiento se llama hexagonal. El empaquetamiento cúbico aparece cuando la tercera capa de las esferas se coloca en los vacíos de la segunda capa del tipo O, es decir, ésta encima de los vacíos entre las esferas de la primera capa. En este caso, la primera capa se repite solamente en la cuarta.

Las dos casos simples descritos de la alteración de las capas en los empaquetamientos cúbico y hexagonal, a menudo se señalan con la ayuda de las letras: /AB/AB/ para el hexagonal de dos capas y /ABC/ /ABC/ para las tres capas del empaquetamiento cúbico. Las letras corresponden del signo de la letra de los vacíos de cada tipo.

Los empaquetamientos complejos se marcan con la ayuda de este modo: /ABAC/ABAC/ de cuatro capas (empaquetamiento del topacio).

3.4.1. Vacíos en el empaquetamiento.

En el empaquetamiento de las esferas iguales entre ellas, se quedan los vacíos y las esferas ocupan solamente el 74% del volumen llenado. Si encima de tal vacío se cubre la esfera de la capa siguiente, ella está rodeada de cuatro esferas, es decir, tiene la forma tetraédrica. Cuando el vacío se cubre encima, no son una, sino con tres esferas que vuelven en 60 grados, relativamente de las esferas de primera capa, ella está entre 6 esferas y puede caracterizarse como octaédrico. Por la cantidad común de las esferas que forman el empaquetamiento, es igual a N , el número de los vacíos octaédricos es N y los tetraédricos $-2N$.

En la mayor parte de la formación de las estructuras de diferentes sustancias, corresponde a algunas leyes comunes. Se sabe, que a tendencia principal es la siguiente: las grandes partículas forman el empaquetamiento y los menores se colocan en los vacíos octaédricos o tetraédricos, formando el empaquetamiento lo más compacto.

Las diferencias entre las especies minerales se determinan por:

- 1) El tipo del empaquetamiento,
- 2) La cantidad y calidad de los vacíos habituales para los cationes (partículas menores),
- 3) La ley por la cual tiene lugar el llenado de los vacíos (si no se llenan todos los vacíos de dicho tipo).

Es necesario añadir que el número de los vacíos llenados se determinan en primer lugar por el tipo del compuesto químico, teniendo en cuenta la Valencia de los elementos), pues la formación de las estructuras cristalinas reales tiene que conservarse la regla de la electroneutralidad.

En las estructuras del tipo NaCl , todos los vacíos son llenados. En estas estructuras los aniones de Cl (átomos grandes) forman el empaquetamiento cúbico. Los cationes de Na (átomos menores) ocupan todos los vacíos octaédricos. La relación de estos vacíos corresponde a la

cantidad de las esferas 1:1 (Fig. 3.10).

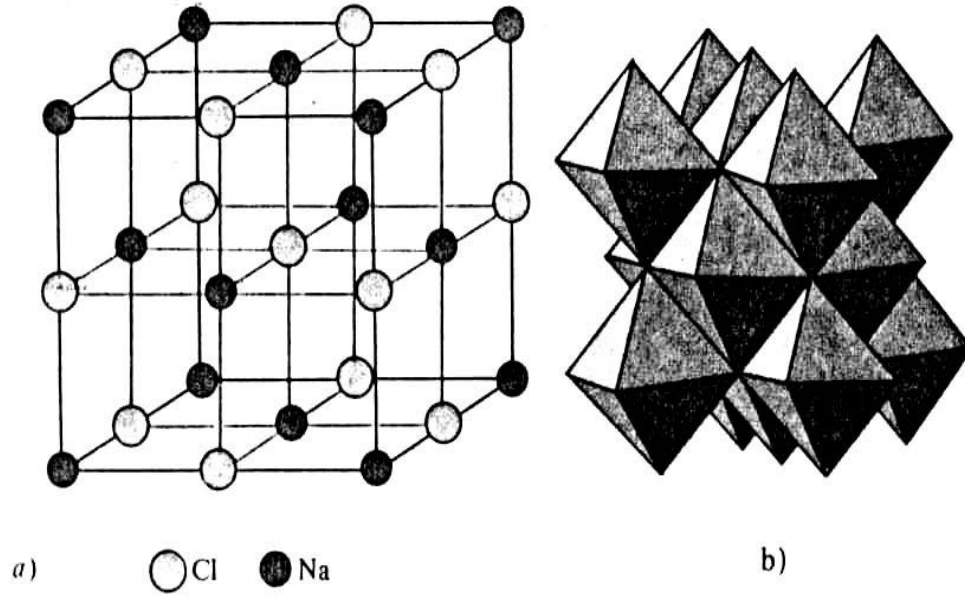


Figura 3.10. Estructura cristalina de la Halina (NaCl): en modelos globulares (a) y poliédrico (b).

La estructura de Li_2O constituye el empaquetamiento cúbico de los aniones de O, en el cual los cationes de Li ocupan todos los vacíos tetraédricos (la cantidad de esferas - Ni, la de vacíos -2N).

La estructura del corindón Al_2O_3 es el empaquetamiento hexagonal de los aniones de O. Los cationes de Al se colocan en los vacíos octaédricos, pero ocupan solamente 2/3 de esos vacíos, pues la proporción de la Valencia H y O en Al_2O_3 es 3:2. Con la correspondencia de la regla de electroneutralidad 1/3 parte de los vacíos octaédricos se quedan libres (Fig.3.11).

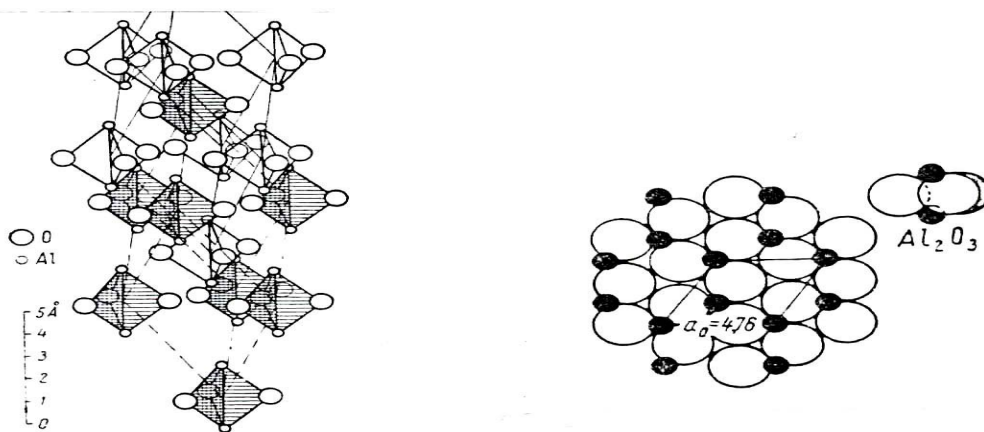


Figura 3.11. Estructura cristalina del Corindon (Al_2O_3): en forma de los poliedros de Al_2O_3 (a) y una capa de empaquetamiento de iones de oxígeno con cationes de aluminio en vacíos octaédricos (proyección en el plano 0001).

Las estructuras de muchos elementos constituyen los empaquetamientos cúbicos y hexagonales: gases nobles y metales (Na, Al, Fe, Au, Cu, Ar etc.) - cúbico; Mg, Be, Zr, Cd, Zn hexagonal. En las estructuras de los cristales según este principio se colocan los aniones, mientras que los cationes ocupan los vacíos de diferente tipo.

3.5. Concepto de números de coordinación

Por el análisis de los cristales a menudo es importante considerar la coordinación de los átomos que consisten en una estructura cristalina. Los aniones coordinados se agrupan siempre en torno al ion central coordinador, de tal manera que sus centros ocupan los vértices de un poliedro regular. De este modo, en una estructura cristalina estable, cada catión, está en el centro de un poliedro de coordinación de aniones. El número de los últimos en el poliedro es el número de coordinación (N.C.) del catión con respecto a un anión dado y viene determinado por sus respectivos tamaños (Fig.3.12).

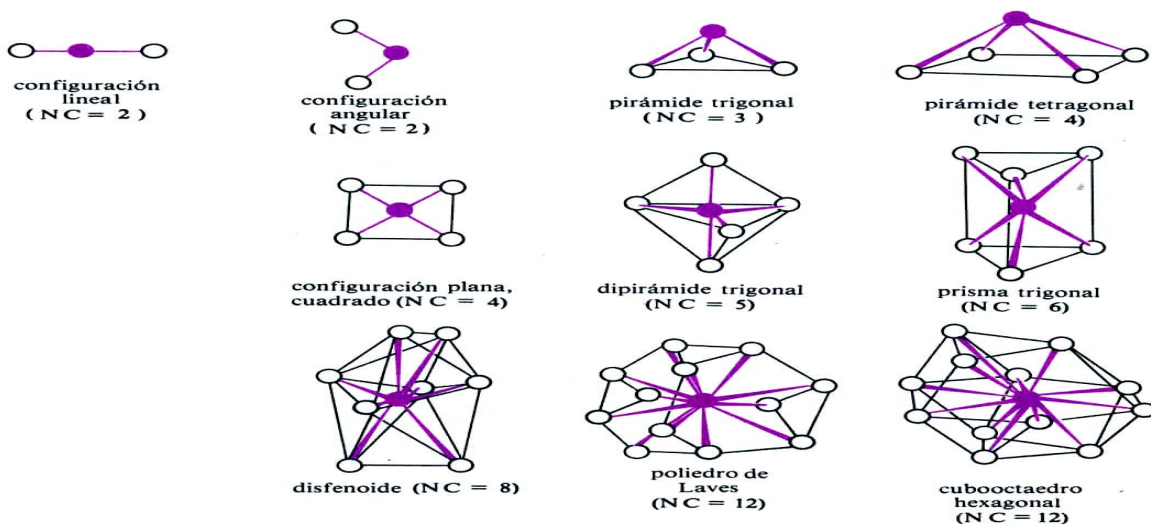


Figura 3.12. Poliedros de coordinación en estructuras con enlace covalente.

Así, en NaCl, cada Na tiene seis Cl, como vecinos más próximos, se dice que está en coordinación 6 con el Cl (N.C. 6) En la fluorita CaF₂, cada ion calcio está en el centro de un poliedro de coordinación 8 con respecto al fluor (N.C.8).

En las estructuras cristalinas de los minerales, a menudo se encuentran los números de coordinación 4,6,8,12 (la coordinación tetraédrica, cúbica octaédrica y cubooctaédrica) Las estructuras de los metales se caracterizan por el N.C. máximo 12. En algunas estructuras se encuentran las N.C. 2, 3, 5, 7, 9.

Esta característica de la estructura interna depende del tipo del enlace químico y de las dimensiones relativas de los aniones y cationes. El número de coordinación en los minerales con el enlace covalente depende de dos parámetros: a) correlación de los tamaños de átomos; b) carácter de la disposición en el espacio de los orbitales de Valencia p, d, f - electrones. El número probable-máximo de los átomos vecinos depende de la correlación de sus dimensiones. Pero el N.C. real puede ser otro en la dependencia del número y de la disposición de los orbitales de Valencia. El número de coordinación depende también de las condiciones termodinámicas y físico-químicas de formación. Así, el aumento de la temperatura de formación da el efecto de la disminución de N.C., mientras que el aumento de la presión está relacionado con el aumento de N.C.

3.6. Radios iónicos y atómicos

En los cursos de Química y de Física, se consideraron los conceptos sobre los radios de los átomos y de iones, sus dimensiones y sus regularidades del cambio en el sistema periódico del científico ruso Dmitry Mendeleev. Todas estas características son hipotéticas. Para los cristales y los minerales son muy importantes los radios iónicos en las estructuras reales. Sin embargo, actualmente no se pueden medirlos.

Los átomos y los iones no poseen superficies definidas y por eso hay que considerarlos

como los núcleos muy diminutos muy densos y con una fuerte carga, rodeados por un espacio ocupado por nubes de electrones muy diseminados, cuya densidad varía con su distancia al núcleo disminuyendo finalmente hasta cero. De aquí, que el radio de un ion sólo puede ser definido con precisión en términos de su interacción con otros iones. En el caso simple, cuando los cationes y aniones son bastante grandes y sus cargas débiles y tienen ambos numerosos vecinos dispuestos simétricamente y de signo contrario, los iones pueden ser considerados como esferas en contacto. El Cloruro de Sodio, en el que tanto el catión como el anión son monovalentes, bastante grandes y están rodeados por seis vecinos de polaridad opuesta, constituye un buen ejemplo.

En estos cristales la distancia interiónica puede ser considerada como la suma de los radios de los dos iones en contacto. En diferentes poliedros de coordinación se establece la correlación determinada de los radios de los cationes y aniones (Fig. 3.13).

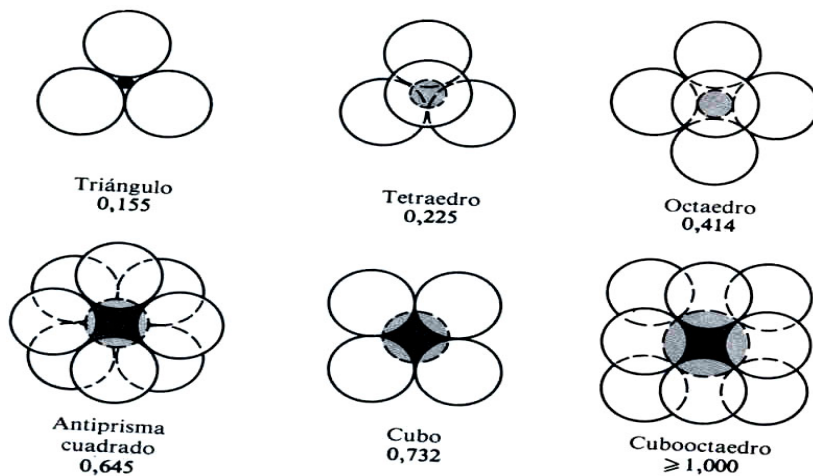


Figura 3.13. Correlación de los radios de los cationes (circuitos negros) y aniones (circuitos claros) en diferentes poliedros de coordinación en estructuras con el enlace iónico.

La distancia interiónica puede ser medida en términos de espaciamiento entre planos a partir de los datos de difracción de rayos X. Si el enlace no es predominantemente iónico, el espaciamiento interiónico no coincidiría con la suma de los radios, ni aún después de aplicar la corrección de polarización. En este caso hay que tener en cuenta las proporciones diferentes entre los enlaces iónicos y covalentes.

Para cualquier número atómico, el tamaño del ion depende de su estado de ionización. Los cationes son en general, más pequeños, más rígidos y menos dilatables que los aniones y para un elemento dado, los estados de ionización positiva, son indicadamente, más pequeños, que la negativa. Así, por ejemplo, el azufre forma iones divalentes negativos e iones positivos tetra-y hexavalentes, siendo típico el contraste entre los radios iónicos característicos de los diferentes estados de Valencia:

S^{2-}	S^0	S^{4+}	S^{6+}
1.74	1.04	0.37	0.30 (Å)

Los aniones en general son más grandes, se polarizan con mayor facilidad y son menos sensibles a los cambios de tamaños, al variar la Valencia que los cationes.

En las estructuras con enlaces covalentes, la distancia interatómica es, generalmente, igual a la media aritmética de las distancias interatómicas en los cristales de las sustancias elementales. Así, en el diamante, el espaciamiento C-C es de 1.54 Å; en el Silicio metálico la distancia Si-Si es de 2.34 Å.

Por lo tanto, los radios atómicos covalentes en el compuesto SiC entre Si-C debe ser próximamente 1.94 Å, que es la media aritmética de los espaciamientos en estado elemental. Las medidas prácticas con rayos X, nos dicen que el espaciamiento en este compuesto es de 1.93 Å.

Las dimensiones de los radios atómicos e iónicos, tienen las regularidades siguientes:

1. Dentro de una fila vertical del sistema periódico (clasificación periódica) los radios de los iones con una carga igual se aumentan con el aumento del número atómico.
2. Para el mismo elemento el radio de los aniones, siempre es más grande que el radio atómico, al contrario el radio de los cationes siempre es menos que el radio atómico.
3. Las dimensiones de los átomos e iones aumentan con la periodicidad del sistema periódico (como excepción los lantanoides y actinoides, para los cuales los radios se disminuyen con el aumento del número atómico).

Al mismo tiempo, existe otro sistema de los radios atómicos, que propuso W. Breg en el año 1920. En este sistema los radios catiónicos son más grandes que los aniónicos.

Actualmente, los científicos suponen que los átomos del mismo elemento en los diferentes compuestos químicos tienen diferentes radios. Así por ejemplo, la dimensión del ión de Fe^{3+} en los Sulfuros es 1.11 \AA , en los Fluoruros 0.86 \AA , en los óxidos - 0.94 \AA . Estos datos fueron confirmados últimamente en las investigaciones por difracción de electrones y de Rayos X, de los minerales y los cristales.

3.7. Enlaces químicos

Los minerales son sustancias cristalinas, los átomos de los elementos químicos que los componen están ubicados en los nudos de la red tridimensional, en orden lógico y se mantienen en posición de equilibrio por las fuerzas de atracción y repulsión mutuas. La naturaleza y el valor de dichas fuerzas se determinan por las propiedades de los átomos de elementos químicos que interactúan. Estas propiedades están condicionadas por la carga del núcleo, la composición electrónica de los átomos y son únicas para diferentes elementos químicos.

La estructura del átomo se determina por 4 números cuánticos: **n** - el número principal, caracteriza la energía de los electrones e indica el nivel en que están los electrones; **l** - número cuántico orbital, indica división del nivel en subniveles **s**, **p**, **d**, **f**; **m_l** - número cuántico magnético, depende de la distribución de los electrones en las celdas, **m_s** - número cuántico del spin, determina la cantidad de electrones que están en la celda (uno o dos).

Se conocen dos reglas principales para la distribución de los electrones en los átomos:

1. En el átomo no puede haber dos o más electrones, los cuales se caracterizan por tener los 4 números cuánticos iguales.
2. Los electrones en los subgrupos, se distribuyen de modo que el momento magnético de spin común sea máximo.

Los átomos de los elementos con diferentes estructuras electrónicas, se distinguen por las dimensiones y por la configuración la cual se describe mediante las orbitales (Fig. 3.14).

Como se sabe, las órbitas **s** tienen una configuración esférica, los tres orbitales **p** están orientados a lo largo de los ejes de coordenadas **p_x**, **p_y**, **p_z**, los orbitales **d** y **f** tienen la orientación más complicada.

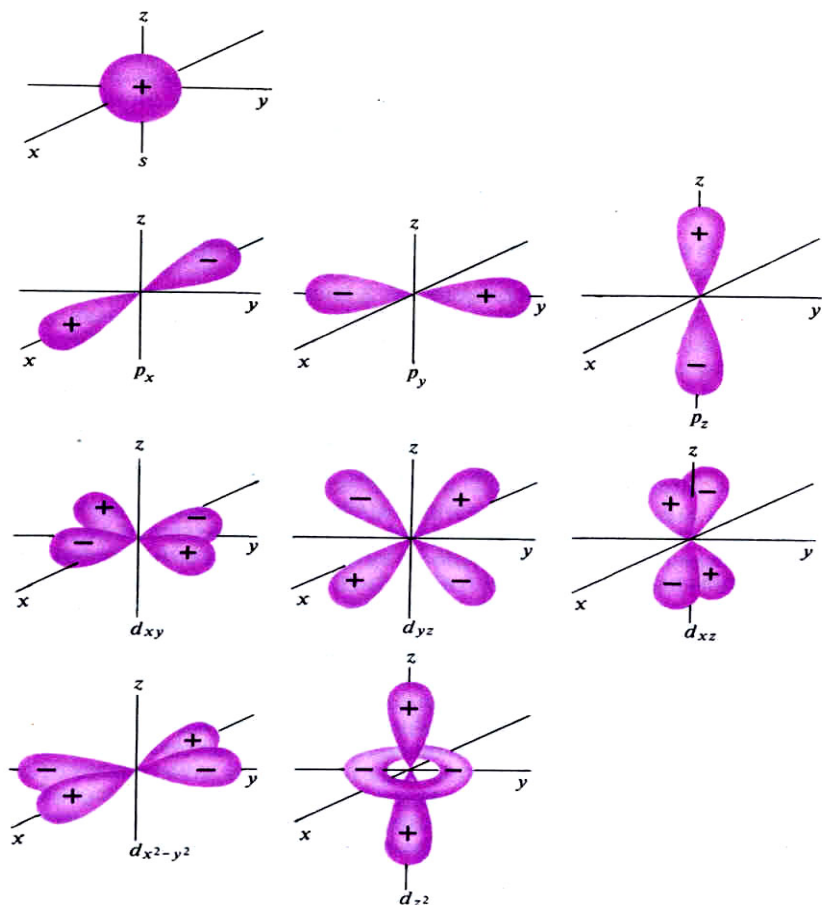


Figura 3.14. Configuración de los orbitales electrónicos s, p y d.

Se denomina **ENLACE QUÍMICO** a las fuerzas de uniones entre átomos que surgen al ceder, tomar o compartir electrones entre si con el fin de lograr la estructura más estable.

Los enlaces están íntimamente relacionados con los electrones de cada uno de los átomos que participan del enlace, y de las estructuras atómicas de estos, por lo que es comúnmente llamado a estos electrones llamados electrones de “valencia”.

Los átomos que entran en el compuesto, pretenden lograr la capa electrónica, que es ventajosa desde el punto de vista de la energía del tipo de gas noble (s^2p^6) o la capa del tipo cobre con 18 electrones.

Los átomos de los metales típicos dan sus electrones y se cargan positivamente (cationes)

los átomos de metaloides típicos reciben los electrones y se cargan negativamente (aniones). La fuerza de la afinidad electrónica del átomo se caracteriza por dos factores: la energía de la afinidad electrónica del átomo y el potencial de ionización. El último es la energía que hace falta gastar para la separación del electrón del átomo. La afinidad electrónica es la energía que se desprende por la asociación del electrón al átomo.

Los enlaces químicos están clasificados según 3 características:

1. La distancia internuclear o interatómica (0.74 a 6 Å)
2. La energía del enlace (energía necesaria para romper las uniones)
3. Tipo de fuerzas de unión (electroestáticas, de canje, Van der Waals, mixtas)

Con lo anterior se tienen 7 tipos de enlaces químicos:

1. Iónico o electrostático,
2. Covalente,
3. Covalente parcialmente iónico,
4. Coordinado,
5. Metálico,
6. Van Der Waals (Molecular),
7. Puente de Hidrógeno.

Enlace iónico: Un enlace de este tipo se da cuando se unen átomos que tienden a ceder fácilmente electrones con átomos que tienden fácilmente a tomar electrones, formando estos dos átomos iones con cargas opuestas, estas cargas hacen que se atraigan se forme un enlace muy fuerte al cuál se le llama iónico. Los primeros electrones de los metales alcalinos, tienen un potencial de ionización mínimo; mientras que los gases nobles tienen un potencial de ionización máximo. La energía de la afinidad electrónica es la más alta en los metaloides típicos y más baja en los metales: Mediante la interacción de los cationes y los aniones se realiza el enlace iónico.

Un ejemplo típico es NaCl (Figura 3.15): el Na tiene el número atómico 11, y la estructura de la capa electrónica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$; el Cl tiene el número atómico 17: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$. Durante la ionización el átomo de Na da el electrón ($3s^1$) y pasa al estado estable $2s^2 2p^6$; el Cl recibe este electrón y también pasa al mismo estado $3s^2 3p^6$.

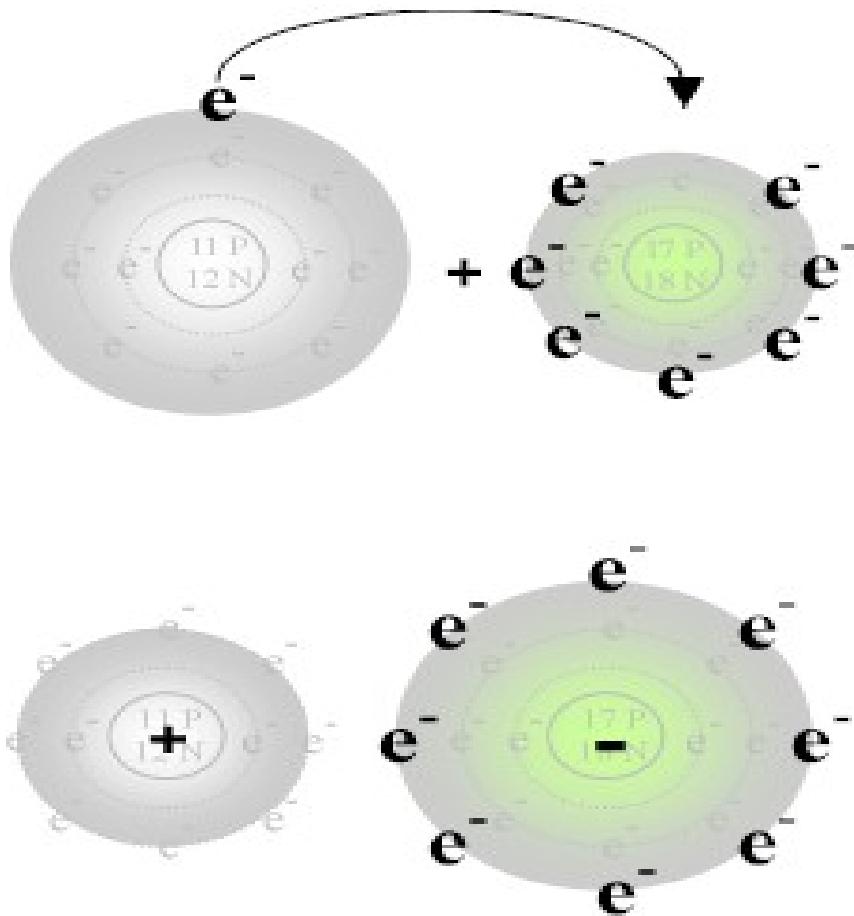


Figura 3.15. Enlace iónico en NaCl.

Enlace Covalente (Figura 3.16): Este tipo de enlace se da cuando se unen átomos que tienen tendencia a ganar electrones, normalmente se dan entre elementos no metálicos monoatómicos ó poliatómicos, pero estos en vez de ceder electrones como en el enlace iónico, los electrones los comparten, para llenar su arreglo atómico en su última capa, a este tipo de enlace se le llama covalente.

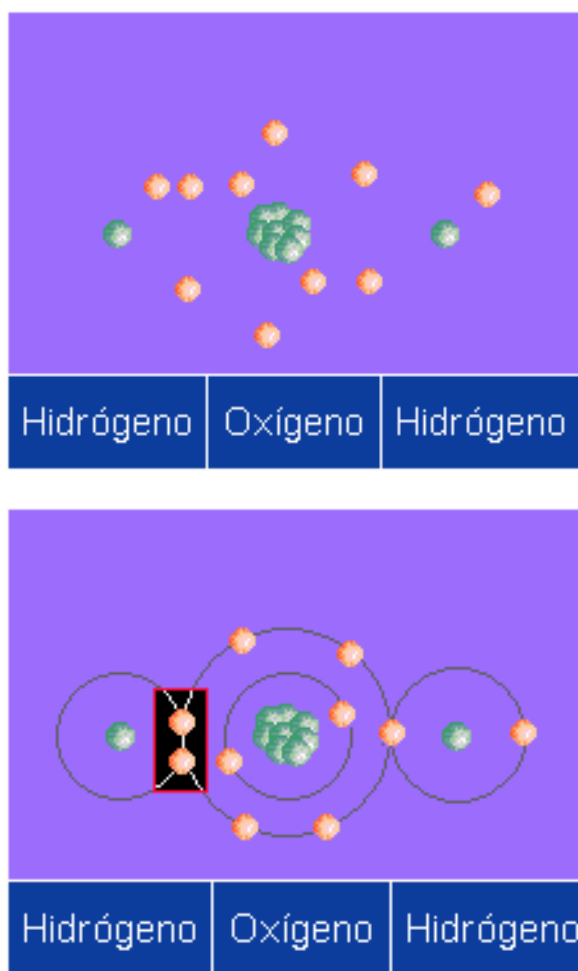


Figura 3.16. Enlace covalente en H₂O.

En algunos casos en la formación del enlace covalente toman parte no solamente los electrones libres, sino además los, que se presentan como resultado de la excitación. Por ejemplo, los átomos de carbono (C: $1s^2 2s^2 2p^2$) como resultado de excitación la capa exterior tiene 4

electrones libres. Por la combinación de tales átomos se forma la estructura del diamante (Fig. 3.21). La estructura de los compuestos covalentes se forma en dependencia del número de los enlaces y sus direcciones (Fig. 3.16; Tabla 3.2.).

Un **enlace covalente parcialmente iónico** se forma cuando los electrones son desigualmente compartidos entre dos átomos. Los enlaces covalentes parcialmente iónicos ocurren porque un átomo tiene una mayor afinidad hacia los electrones que el otro (sin embargo, no tanta como para empujar completamente los electrones y formar un ión). En un enlace covalente parcialmente iónico, los electrones que se enlazan pasarán un mayor tiempo alrededor del átomo que tiene la mayor afinidad hacia los electrones. Un buen ejemplo de este enlace es el enlace hidrógeno - oxígeno en la molécula de agua. Este tipo de enlace se puede considerar como una variación del enlace covalente, por lo que las propiedades y características que se habían mencionado para el covalente aplican para este enlace. Este enlace también es llamado enlace covalente “polar” debido a la polarización de la molécula.

Enlace Covalente Coordinado o Dativo se da cuando uno de los átomos que están uniéndose aporta el par de electrones que se van a compartir, mientras que el otro no aporta ninguno, es por lo anterior que es conocido este enlace como coordinado o dativo. Este tipo de enlace se puede considerar como una variación del enlace covalente, por lo que las propiedades y características que se habían mencionado para el covalente aplican para este enlace.

En este tipo de enlace los compuestos que se forman están como iones debido al intercambio de electrones.

El enlace metálico se da cuando átomos que son afines a ceder electrones se unen para formar una estructura, en la cuál los electrones que tienen en su última capa son cedidos para ser compartidos por todos los átomos a su alrededor, quedando estos átomos como iones positivos, y el conjunto de electrones que son cedidos forman una nube o mar de electrones que hacen que los

átomos no se repelan y se mantengan unidos (Fig. 3.17). El enlace “metálico” es característico de metales, aleaciones, aceros o uniones entre metales. Dentro del enlace metálico el arreglo que forman los átomos es el de una red cristalina compacta, en este arreglo, los átomos nunca están ligados a los otros, las fuerzas que los mantienen unidos son de tipo eléctrico por la cantidad de electrones que existen a su alrededor.

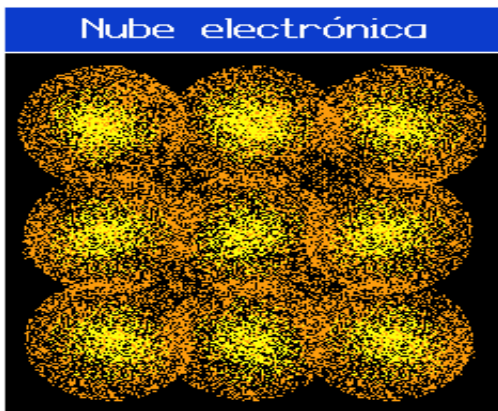


Figura 3.17. Nube electrónica en enlace metálico.

A diferencia de los compuestos iónicos y covalentes los metales conducen la electricidad en el estado sólido y también son dúctiles. Para explicarlo, se postuló, que un metal puede considerarse como una disposición regular de iones cargados positivamente (cationes), con igual número de cargas negativas en los electrones móviles, de modo que se preserve casi toda la neutralidad electrostática. Los electrones que intervienen en el enlace no están asociados con átomos particulares y se dice que están desubicados. La conductividad eléctrica de los metales esta explicada por la presencia de electrones móviles y la ductibilidad esta explicada por la facilidad con la cual los iones de cargas similares son capaces de deslizarse unos sobre los otros.

El enlace molecular surge entre las moléculas, entre los átomos, que componen las moléculas se establecen enlaces de otro tipo. Este enlace se genera por fuerzas eléctrica y se deben a la existencia de dipolos en las moléculas. Estos dipolos pueden ser permanentes, como sucede en todas las moléculas covalentes polares; o temporales, como ocurre en las moléculas covalentes no polares. Estos dipolos crean campos magnéticos que atraen los polos opuestos de las otras moléculas, lo que provoca que haya una atracción entre ellas y en momentos se mantengan unidas por fuerzas electromagnéticas. Dentro de las características que los compuestos presentan con este tipo de enlace son:

- Son débiles y fácilmente pueden ser rotos.
- En algunas sustancias incrementa su punto de fusión.
- Generalmente se presenta en sustancias volátiles

Enlace Puente de Hidrógeno: En el caso del agua (H_2O), el par electrónico del enlace O-H pertenece casi totalmente al oxígeno, altamente electronegativo, constituyéndose en el polo negativo (d-) de la molécula. Por su parte, el hidrógeno queda reducido prácticamente a su núcleo, es decir, forma el polo positivo (d+) de la misma molécula. Este átomo de hidrógeno, deficiente en electrones, tratará de conseguirlos a través de la interacción con el átomo de oxígeno de otra molécula de agua. Así, el átomo de hidrógeno establece un puente entre dos moléculas. De ahí el nombre de puente de hidrógeno a este tipo de fuerza intermolecular. Este enlace es característico de líquidos que están conformados por elementos con mucha afinidad a recibir electrones e hidrógeno, algunas características que da a los compuestos este tipo de enlace son: a) Su energía de enlace es alta; b) Su punto de ebullición es incrementado; c) Sólo se da este enlace en estado líquido.

Los valores de la energía del enlace entre las partículas son siguientes:

- covalentes e iónicos - 200-300 kilocal/mol

- metálicos - 25 -"

- molecular - 5 -"

Señalamos, que en realidad no se encuentran los tipos de enlaces puros y fundamentalmente los enlaces tienen un carácter intermedio (por ejemplo, covalente-iónico).

Se puede señalar que existen algunas relaciones bien definidas entre las propiedades físicas de los cristales minerales y el tipo del enlace químico correspondiente. Por la característica de los tipos aislados de enlaces, resulta clara la influencia considerable de los mismos en las particularidades geométricas de la estructura y de todas las propiedades, las cuales a partir de ellas se determinan. El tipo del enlace determina algunas propiedades de los cristales. Los minerales son un ejemplo típico de los últimos. Así los minerales con enlace metálico (los metales nativos - Ag, Au, Pt, Fe, etc.) tienen maleabilidad y plasticidad. La estructura de los esqueletos atómicos y del gas electrónico, se deforman fácilmente sin destrucción. Por el contrario, los compuestos iónicos y covalentes son frágiles.

El carácter de la distribución de los electrones en la estructura, el nivel de concentración y la fijación de los electrones libres determinan el color, brillo, índice de refracción, , poder de reflexión, conductibilidad eléctrica y otras. Los metales nativos poseen la mejor conductibilidad eléctrica y térmica, gran poder de su reflexión (fuerte brillo metálico), sus índices de refracción de los que depende el brillo, son los más altos, por lo común no son muy duros.

Todos los minerales con enlace iónico son dieléctricos en el estado sólido, muchos compuestos covalentes son semiconductores. Las sustancias con enlace metálico son los mejores conductores de la electricidad. Las sustancias con enlace molecular son dieléctricas y diamagnéticas.

Los compuestos iónicos y la mayoría de los moleculares son transparentes e incoloros. Los metales tienen brillo metálico y son oscuras a causa de la alta concentración de los electrones

libre. Entre los compuestos covalentes están la mayoría de los minerales coloreados.

La dureza es alta para los minerales con enlaces iónicos y covalentes. Al contrario, esta propiedad mecánica es baja para los minerales con enlace metálico y muy baja para los que tienen enlace molecular. La dureza está relacionada también con el tipo de empaquetamiento, de valencia de los átomos y del nivel de covalencia del enlace.

La densidad depende de las dimensiones interatómicas, del número de coordinación de la masa de los átomos (peso atómico). Por ejemplo, los minerales, que contienen los metales pesados (Fe, Pb, W, etc.) se caracterizan por el gran valor de peso específico.

3.8. Energía de la red cristalina

Durante la formación de los cristales, se desprende cierta parte de energía libre. En cambio, para la destrucción del cristal es necesario gastar una energía de valor correspondiente. Por ejemplo, al calentar moderadamente los minerales, debido al aumento de la amplitud de los movimientos oscilatorios de los átomos y su desplazamiento con respecto a las posiciones de los átomos y su desplazamiento con respecto a las posiciones de equilibrio, crecen las distancias interatómicas medias. Al aumentar considerablemente la temperatura, las distancias interatómicas medias aumentan bruscamente, como resultado de las cuales sucede la destrucción de los minerales.

La energía de la red cristalina se determina por el trabajo, que es necesario para la destrucción de gramo/molécula de la sustancia cristalina sobre los iones componentes aislados. Según del científico ruso Kapustinsky, la energía de la red cristalina se calcula por la siguiente fórmula:

$$U \text{ (kilocal/mol)} = 256.1 E w_1 \cdot w_2 / R_c + R_a,$$

donde E_n - cantidad de las unidades estructurales, w_1 - Valencia de catión, w_2 - Valencia de anión, R_c - radio de catión, R_a - radio anión.

Es decir, la energía de la red cristalina se determina por la cantidad de las unidades estructurales, sus dimensiones y valencia. La cantidad de energía de la red, que se calcula según esta fórmula, difiere de los datos experimentales en caso de que el tipo de enlace difiere del enlace iónico.

Tabla 3.3. Energía de la red y propiedades de cristales.

COMPUESTO	ENERGÍA DE LA RED (kilocal/mol)		DUREZA	ESTABILIDAD QUÍMICA
	Datos			
	Experimentales	Teóricos		
NaCl	183.3	183.6	2	Baja
ZnS	852	797.3	4	Media
Al ₂ O ₃	3618	4065	9	Alta

Algunas propiedades de la red cristalina tienen las relaciones estrechas con la energía de la red (Tabla 3.3). Por ejemplo, la energía de la red de los compuestos isodésimicos (con enlaces mezclados) tiene una dependencia directa con la dureza, la estabilidad química, la capacidad de fusión a altas temperaturas. Así, la dureza es muy baja para sustancias con enlaces moleculares y

las estructuras del tipo aislado y laminar. Su destrucción tiene la relación con la destrucción de los débiles enlaces en los cristales y se realiza sin la destrucción de los elementos aislados de la estructura cristalina.

3.9. Isomorfismo

El isomorfismo es el fenómeno de la sustitución mutua de los átomos en las estructuras de los minerales que tienen las propiedades cristal químicas cercanas. Estas propiedades determinan la variación del intercambio gradual y regular de la composición del mineral y la electroneutralidad de su red cristalina.

El isomorfismo, el cual se observa la transición completa de un miembro extremo de la mezcla isomorfa hasta otro, se llama completo o perfecto, por ejemplo: $\text{PbS} \rightarrow \text{PbSe}$; $\text{Mg}_2(\text{SiO}_4) \rightarrow \text{Fe}_2(\text{SiO}_4)$ y otros casos numerosos. Sin embargo, a menudo se encuentran los ejemplos del isomorfismo limitado, incompleto cuando los miembros extremos de las mezclas isomorfas logran alguna composición límite para cada uno de los miembros. En unos casos esta limitación puede constituir unas decenas de por ciento (por ejemplo, en la esfalerita puede ser hasta 50% de FeS en la forma de la impureza isomorfa), en otros casos las unidades del por ciento (hasta 8% de Na_2O en la espodumena $\text{LiAlSi}_2\text{O}_6$), pero a menudo una décima o centésima parte del por ciento.

Se distinguen también el isomorfismo isovalente y el heterovalente, por la Valencia de los iones, que sustituyen uno a otro. Por ejemplo: la sustitución de $\text{S} \rightarrow \text{Se}$ en Pb (S, Se), $\text{Li} \rightarrow \text{Na}$ en la $\text{LiAlSi}_2\text{O}_6$ es el isomorfismo isovalente. El buen ejemplo del isomorfismo heterovalente es la sustitución en el grupo de los feldspatos calciosódicos (plagioclasas), En esta serie los miembros extremos son: albita Na (AlSi_3O_8) y anortita Ca ($\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8$). En este caso hay una sustitución doble de dos grupos: $\text{Na}^+ \text{Si}^{4+} \rightarrow \text{Ca}^{2+} \text{Al}^{3+}$ (la valencia común es igual pero la

valencia de los cationes aislados es diferente).

Entre estos miembros extremos están los miembros intermedios, cuyas composiciones y propiedades varían regularmente entre el Na (AlSi_3O_8) y el Ca ($\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8$).

En caso especial del isomorfismo heterovalente, son las mezclas isomorfas, en las cuales las partículas se sustituyen no una a una, sino en otra proporción, por ejemplo, la sustitución isomorfa $\text{Bi}^{3+} \rightarrow \text{Pb}^{2+}$ en PbS en galena según el esquema $2\text{Bi}^{3+} \rightarrow 3\text{Pb}^{2+}$.

En este caso la solución sólida tiene la fórmula química: $\text{Pb}_{1-x}\text{Bi}_{2/3x}\text{S}$. Tal sustitución produce la aparición de una serie de vacíos en la estructura cristalina de la galena. Tales sustituciones sólidas se llaman las soluciones de la sustracción.

El fenómeno contrario se observa por el isomorfismo con el llenado del espacio, es decir, cuando para la electroneutralidad la cantidad de los iones se aumenta después de la sustitución. Por ejemplo, en la fluorita (CaF_2) los cationes grandes del Ca forman la estructura del tipo del empaquetamiento cúbico y los iones de F ocupan todos los vacíos tetraédricos. La sustitución en la Y-fluorita ($\text{Y}^{3+} \rightarrow \text{Ca}^{2+}$) exige la aparición de los iones complementarios de F^- para conservar la electroneutralidad (soluciones de introducción) Estos aniones ocupan los vacíos libres octaédricos. Las mezclas isomorfas, las cuales surgen como resultado de la sustitución de unos cationes por otras en la proporción de partícula a partícula, se llaman mezclas de primera generación. Las mezclas isomorfas (soluciones sólidas) de la sustracción o introducción (intersticial) son de la segunda generación, con cantidad variable de los átomos en la celda elemental.

Las propiedades de las mezclas isomorfas están en dependencia directa de su composición y en la mayoría son aditivos. Esta circunstancia permite usar las propiedades diferentes para la determinación de su composición química en las mezclas isomorfas.

Primeramente, la formación de las mezclas isomorfas se explicó como la consecuencia de las formas cristalinas semejantes y del tipo igual de los compuestos. Más tarde, fue establecido que el isomorfismo puede haber entre sustancias con diferentes estructuras (por ejemplo ZnS, que tiene el sistema cúbico y FeS, que tiene el sistema hexagonal) y con diferentes tipos de las fórmulas (por ejemplo, CaF_2 y YF_3).

La red cristalina de una sustancia se conserva por la sustitución de unas partículas por otras, en el caso cuando son cercanas y muy cercanas: 1) las dimensiones de las partículas; 2) la estructura de las capas electrónicas; 3) el carácter del enlace en los miembros extremos de la serie isomorfa; 4) la energía de las redes cristalinas; 5) las condiciones termodinámicas y de la existencia antes y después de la formación.

Un factor principal que limita el isomorfismo, es la influencia de las dimensiones de las partículas. Hay una regla de Grimm- Goldsmith: la mezcla isomorfa por las temperaturas que no están cerca de las temperaturas de fusión, se forma en tal caso, si los radios de las partículas estructurales correspondientes se distinguen uno del otro aproximadamente no más que el 15% (en los porcentos del radio menor).

El isomorfismo es completo para temperaturas diferentes cuando la correlación $r_1 - r_2 / r_2 < 10-15\%$; en el intervalo de esta correlación $10-15\% - 25-40\%$ el isomorfismo es completo si ocurre solamente durante de la cristalización del magma (por la reducción de la temperatura tiene lugar la descomposición de estas mezclas). El isomorfismo no es completo hasta las temperaturas de fusión en el caso cuando la correlación lo antes indicado es más que $25-40\%$.

Las estructuras de las capas electrónicas también influyen sobre el isomorfismo. Como el ejemplo, se puede señalar los iones de diferente tipo, pero de radio cercano. Los elementos de sodio (Na) y cobre (Cu) tienen los radios (0.98 \AA) y Valencia iguales. Sin embargo, el ion Na^+ tiene en los compuestos una capa electrónica del tipo "gas noble" (s^2p^6), mientras que el ion Cu^+

tiene otra estructura electrónica del tipo "cobre" ($s^2p^6d^{10}$). Por eso entre estos iones el isomorfismo no ocurre prácticamente.

Entre otras propiedades cristaloquímicas sobre el isomorfismo influye el carácter del enlace químico. Así, los compuestos con enlaces iónicos, que no tienen direcciones principales (no son orientados) son más favorables para las sustituciones isomorfas en comparación con los compuestos covalentes con los enlaces fijados y orientados.

La temperatura y la presión son los parámetros termodinámicos, que influyen mucho sobre el isomorfismo. Por ejemplo, el aumento de la temperatura amplía los límites hasta el isomorfismo completo. Al contrario, la disminución de este parámetro es una causa de la descomposición de las mezclas isomorfas con la formación de dos o más de los compuestos independientes. El papel de la presión es más complejo y diferente. El aumento de este parámetro termodinámico puede en algunos casos favorecer al isomorfismo, en otros - al contrario limitarlo.

En la naturaleza también existen las limitaciones genéticas y complementarias, que limitan el isomorfismo. A menudo, la sustitución isomorfa se limita por la ausencia de las concentraciones suficientes de los diferentes elementos químicos en el sistema de formación. Así, la sustitución isomorfa $Ni^{2+} \rightarrow Mg^{2+}$ en olivinos $(Mg,Fe,Ni)_2(SiO_4)$ se establece sólo en unas décimas del porcentaje % mientras que según los datos experimentales puede obtenerse la serie continua de $Mg_2(SiO_4)$ a $Ni_2(SiO_4)$. Otro ejemplo, la sustitución de $Cd,Mn \rightarrow Zn$ (en esfalerita ZnS) que es limitada, aunque en las condiciones experimentales se establece el ISOMORFISMO completo.

El fenómeno del isomorfismo tiene gran importancia en la práctica mineralógica. Las reglas y leyes del isomorfismo explican correctamente las particularidades de la composición química de los minerales y su relación con la génesis. Además, estas leyes permiten prever las

impurezas posibles y separar los elementos isomorfos de los, que están en los minerales en forma de las mezclas mecánicas. En la **Tabla Periódica de los elementos del conocido científico ruso Dmitry Mendeleev** fueron establecidos las series principales del isomorfismo entre diferentes elementos (Fig. 3.18). Por el cambio de la composición química de los minerales se puede prever el cambio de algunas propiedades físicas y al contrario.

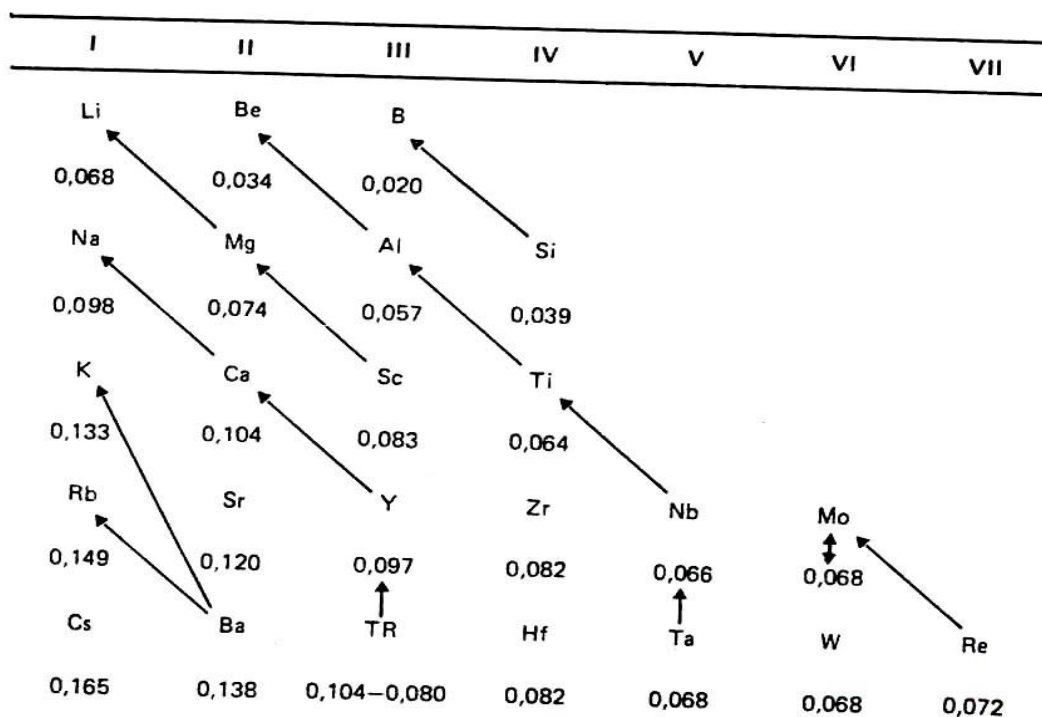


Figura 3.18. Series diagonales del isomorfismo en la Tabla Periódica de Dmitry Mendeleev (flechas indican las direcciones de las sustituciones isomorfas).

El isomorfismo tiene no sólo un valor científico, sino también la importancia práctica. Hay muchos minerales, de los cuales se extraen los elementos determinados, que son las impurezas isomorfas (están en las posiciones estructurales de la red). Así, la masa fundamental de se extrae de PbS (Galena) y CuFeS₂ (Calcopirita); el Ni se extrae de FeS (Pirofita); el Cd, In, Ga de ZnS (Esfalerita); el Ag de PbS (Galena) y Cu₁₂(AsS₃)₄S (Tetraedrita). En los minerales de hierro el Co y el Ni sustituyen el Fe. Muchos nuevos materiales sintéticos se crean como resultado de las impurezas determinadas de los átomos e iones. Por ejemplo, en los cristales de láser, en rubí (Al₂O₃) una pequeña parte (0.05%) de los átomos de Al se sustituye por los átomos de cromo. Prácticamente todos los cristales contienen las impurezas de diferentes átomos e iones.

3.10. Polimorfismo

Es el fenómeno de la transición (transformación) de un tipo estructural a otro tipo por la variación de las condiciones físico-químicas del ambiente de formación. En esta transformación de una especie mineral a otra especie, se mantiene constante la composición química (Fig. 3.19).

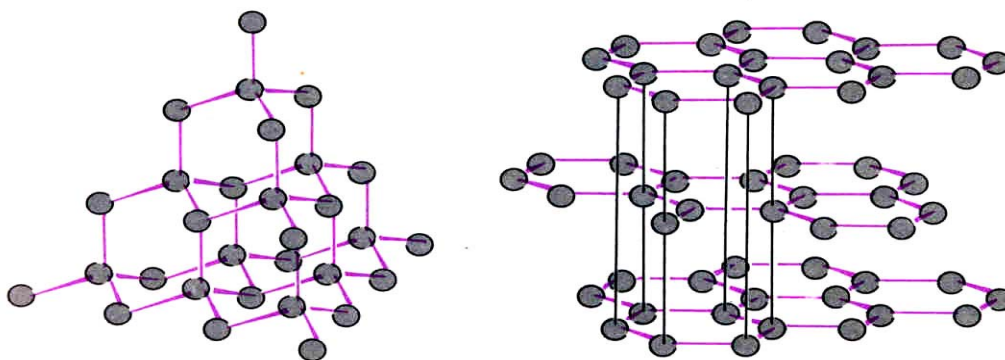


Figura 3.19. Modificaciones polimorfas del carbono: Diamante y Grafito.

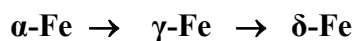
Las diferencias entre las estructuras de las modificaciones polimorfas, se divide según los tipos siguientes:

1. Las estructuras de las modificaciones polimorfas se distinguen por el número de coordinación (NC). Como el ejemplo típico tenemos 3 modificaciones del $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5$: disteno (N.C. de Al=6), andalucita (NC de Al = 6 y 5), silimanita (N.C.de Al= 6 y 4).

2. Las estructuras de las modificaciones polimorfas, se distinguen por el tipo del empaquetamiento con igual número de coordinación. Por ejemplo, dos modificaciones de ZnS (esfalerita y wurtzita) con el empaquetamiento cúbico y hexagonal; tres modificaciones de TiO_2 (el rutilo tiene el empaquetamiento hexagonal, la anatasa - el cúbico; la brookita, la cuarta capa mezclada).

3. El tipo de empaquetamiento y el número de coordinación, son iguales pero hay diferencia en el motivo de la posición en los átomos: la columbita y la mosita tienen la fórmula FeNb_2O_6 . En el primer mineral por el eje Z se alternan los iones Fe-Nb-Nb-Nb-Fe, en el segundo Fe-Nb-Nb-Fe.

4. La estructura de las modificaciones polimorfas se distinguen por un pequeño giro de algunos grupos estructurales en el proceso de las transformaciones polimorfas. Por ejemplo: β - cristobalita se distingue del α -cuarzo por el ángulo Si-O-Si: en el primero es 180° y en el segundo 160° . Todavía es menos la diferencia entre α y β cuarzo (ver Fig. 3.20). Otro ejemplo está relacionado con diferentes modificaciones del hierro entre las cuales se puede mencionar las siguientes:



Temperatura: **910°C** **1400°C**

Tipo de la red: **I** **F** **I**

En el caso del estaño se observa la transformación en la temperatura de 13.3°C entre α -Sn (gris, red cúbica F) \rightarrow β -Sn (blanco, red Tetragonal I).

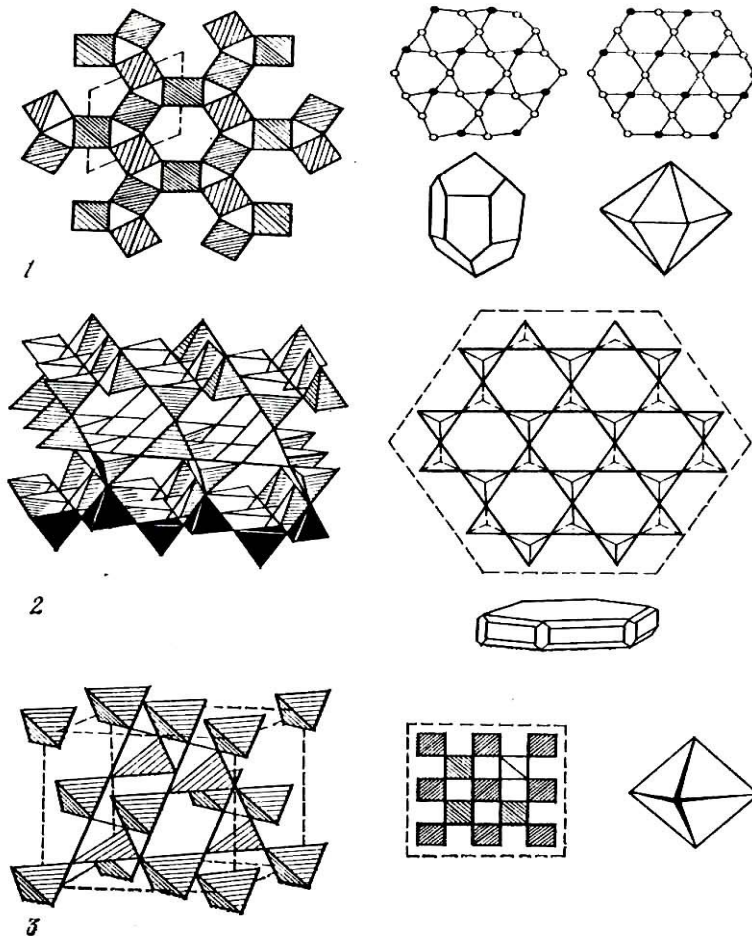


Figura 3.20. Estructuras y cristales de las modificaciones polimorfas de SiO₂: 1-cuarzo trigonal y hexagonal, 2-tridimita, 3-coesita.

La transformación polimorfa puede ser enantiotropo (recto-opuesto) como para el hierro y monótropa, como en el caso de las modificaciones de CaCO₃: aragonita (rómbrico) \rightarrow calcita (trigonal) en la temperatura 400°C.

Las impurezas influyen sobre la temperatura de la transformación polimorfa (acelerar o retener). La transformación de β -Sn a α -Sn no ocurre por las temperaturas bajas si se incluye 0.1% de Bi; para acelerar esta transformación hay que añadir 0.1% Al; 0.75% de Ge se estabiliza α -Sn hasta 60°C.

La energía de la red de las modificaciones polimorfas de la misma sustancia, no es igual y por eso la transformación polimorfa ocurre con un efecto térmico. La energía de la red de la modificación de baja temperatura es más alta, que la de la modificación de alta temperatura. Los efectos térmicos de las transformaciones polimorfas se observan en forma de mesetas térmicas en las curvas de calentamiento de las sustancias analizadas. Hay que tener en cuenta, que no hay un modo único para la denominación de las modificaciones polimorfas de la misma sustancia. En la Metalurgia, con la letra α se señalan las modificaciones de alta temperatura y después todas las demás con las letras siguientes del alfabeto griego (β , γ , etc.). Al contrario, en la mineralogía, a menudo se señalan con la letra α las modificaciones de baja temperatura.

La transformación polimorfa tiene lugar cuando los enlaces en la estructura son muy débiles. En realidad, por ejemplo, para el azufre nativo las transformaciones polimorfas tienen lugar para las temperaturas bajas y muy fácilmente, porque los enlaces en esta estructura cristalina son moleculares (es decir, débiles).

Al mismo tiempo, el diamante puede transformarse en el grafito a 3000°C y a presión ordenada, porque este mineral se caracteriza por tener enlaces covalentes y muy estables. En las transformaciones polimorfas, influyen: la temperatura, la presión, los elementos isomórfos y otros factores.

3.10.1. Paramorfosis

Es el fenómeno de la formación de la nueva modificación de baja temperatura a partir de

los cristales de la modificación de alta temperatura guardando su forma inicial. Estas formas se usan para la determinación de las condiciones de formación de las asociaciones minerales, donde ellas se encuentran. Los ejemplos típicos son: $\alpha\text{-SiO}_2 \rightarrow \beta\text{-SiO}_2$; Ag_2S (argentita) \rightarrow Ag_2S (acantita).

3.10.2. Politipos

Este fenómeno depende de la capacidad de una sustancia cristalina formar las modificaciones que se caracterizan por algunas características estructurales. Los politipos tienen dos parámetros iguales de la celda elemental y el tercero, que es variable. El número de los politipos puede ser distinto para las sustancias diferentes. El grafito tiene dos politipos: hexagonal ordinario /AB/ /AB/ y romboédrico /ABC/ /ABC/, Lo mismo tiene la molibdenita (MoS_2). El mayor número de los politipos se conoce para las micas, la esfalerita (ZnS) tiene más de 35 modificaciones. Los politipos se señalan con las letras del alfabeto latino, que corresponden al sistema del politipo dado, delante de los cuales está la cifra, señalando el número de capas, por ejemplo: el grafito hexagonal se señala 2H, romboédrico - 3 R.

Los politipos se forman a menudo por el aumento de la temperatura en el proceso de desorden de la estructura cristalina (la transición de los politipos de esfalerita ZnS - 4H, 6H, 15R, 3R - al politipo de la wurtzita 2H). Los politipos se forman también como resultado de los defectos diferentes del crecimiento de los cristales (dislocaciones o defectos lineales, por ejemplo, dislocación de rosca).

3.11. Tipos de las estructuras cristalinas

Las estructuras cristalinas (internas) de los minerales son muy diferentes. Al mismo tiempo, en la distribución de los elementos estructurales hay muchas particularidades cercanas, las cuales permiten todas las estructuras conocidas dividir sobre 5 tipos principales:

1. COORDINATIVOS: Se representan en la forma de los poliedros coordinados regulares (compuestos de C, Cu, NaCl, CsCl, etc.; ver Fig. 3.12, 3.19). Ellos se construyen según el principio del empaquetamiento: ante todo se extienden los empaquetamientos de los átomos grandes (generalmente aniones) y a veces los cationes (CaF_2).

2. AISLADOS o INSULARES: Se caracterizan por los grupos atómicos aislados en las estructuras de los minerales (Fig. 3.21). Se encuentran las estructuras aisladas moleculares (el tipo de azufre), pero a menudo los radicales complejos (dentro de estos radicales los enlaces son más fuertes y covalentes que los iónicos, entre estos radicales y los cationes). Por ejemplo, nesosilatos (silicatos aislados) con los radicales (SiO_4): olivino, granates; los Carbonatos con los radicales (CO_3): calcita; fosfatos con los radicales (PO_4): apatito y otras. Se conocen los radicales y grupos más complejos, por ejemplo, en ciclosilicatos: (Si_3O_9), (Si_4O_{12}), (Si_6O_{18}), la estructura de las cuales está formada por anillos de los tetraedros aislados.

3. DE CADENAS (sencillas o dobles): Se caracterizan por la presencia en las estructuras los elementos unidimensionales en la forma de las cadenas sencillas o complejas (ver Fig. 3.21). Por ejemplo, en los inosilicatos los tetraedros (SiO_4) pueden estar enlazados formando cadenas al compartir oxígenos con los tetraedros adyacentes. Estas cadenas sencillas pueden unirse después lateralmente compartiendo más oxígenos algunos de los tetraedros para formar cadenas dobles. Las estructuras de este tipo tienen también los minerales siguientes: Se, HgS, Sb_2S_3 , Bi_2S_3 , piroxenos, anfíboles.

4. DE CAPAS (ESTRATOS, HOJAS, LAMINARES, REJILLAS): Se caracterizan por la presencia en la estructura de los elementos hojosas bidimensionales (ver Fig. 3.19, 3.21). Tales estructuras tienen muchos minerales, por ejemplo, MoS_2 , $\text{Mg}(\text{OH})_2$, $\text{Al}(\text{OH})_3$, filosilicatos. En las estructuras de los últimos los tetraedros (SiO_4)

forman unas hojas conjunto con las hojas de brucita $Mg(OH)_2$ o gibsita $Al(OH)_3$.

5. DE ARMAZONES TRIDIMENSIONALES: En las estructuras de este tipo, los elementos aislados se unen por sus vértices, está formado el armazón tridimensional (ver Fig. 3.21). Por ejemplo los tectosilicatos, tales elementos forman los tetraedros Al-O y Si-O. Estos tetraedros se enlazan compartiendo oxígeno para formar un armazón tridimensional, en el cual están grandes vacíos con los cationes complementarios (mono o divalentes).

Los tipos principales de las estructuras cristalinas fueron establecidos hace 50 años debido a las investigaciones estructurales de los silicatos. El estudio de estos tipos fue muy importante en el aspecto teórico por el conocimiento mas profundo de los cristales y minerales. Es que la estructura interna tiene las relaciones estrechas con las propiedades físicas, morfología, condiciones de formación. Los grupos químicos determinados juegan el papel especial en la génesis: así por ejemplo, los grupos Hidroxidos o los complejos de uranio contribuyen a la formación de las estructuras de capas; los elementos químicos como Sb y Bi forman en los Sulfuros las estructuras de cadena etc.

En las diferentes clases cristalóquímicas hay muchos ejemplos de varias estructuras cristalinas: las de capas (grafito, molibdenita, oropimento, yeso etc.), las de cadenas (selenio, cinabrio, estibnita etc.), las de insulares (azufre, rejalgar, etc.). En la actualidad entre 4000 especies minerales predominan las estructuras insulares (37%), de capas (21%) y coordinativas (18%). En la cantidad menor se encuentran las estructuras de cadena (14%) y de armazones (10%).

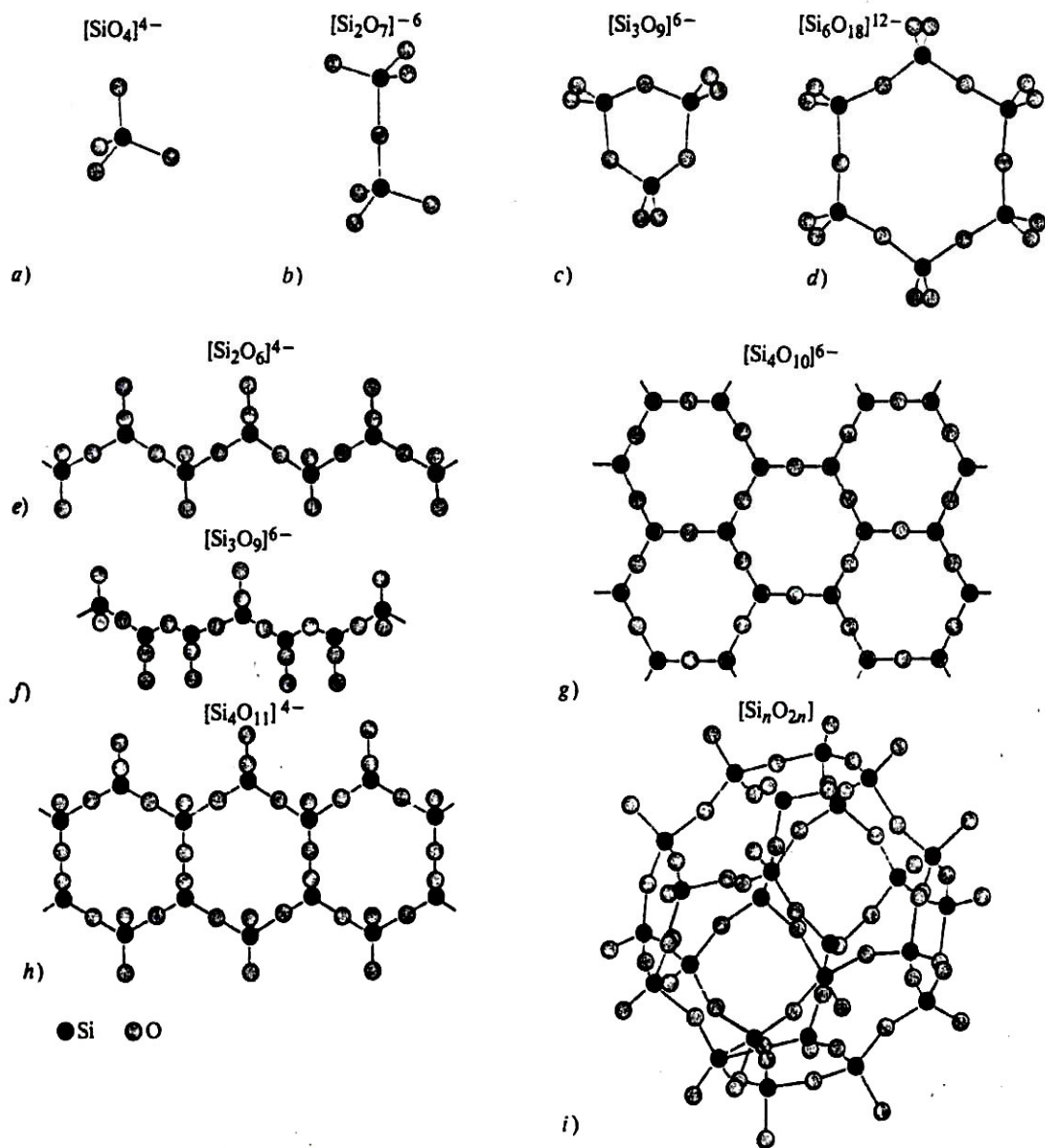


Figura 3.21. Silicatos de estructura insular (a, tetraedro simple; b, tetraedros dobles, c, anillos de tres y d, de seis tetraedros), de cadena (e, cadenas simples, y f, g complejas), de laminar (h, capa hexagonal de tetraedros), y de armazón (i, armazón tridimensional de tetraedros).

3.12. Defectos atómicos en las estructuras cristalinas

Los cristales y minerales no son los sistemas ideales, sino que reales de átomos que interaccionen, que se caracterizan por las alteraciones de la periodicidad de la estructura cristalina.

Las imperfecciones elementales de la estructura de los minerales y cristales son los defectos puntuales: los huecos y los átomos intersticiales. La concentración de dichos defectos esta enlazada principalmente con las condiciones térmicas de formación, es decir se halla en equilibrio con la temperatura. Por eso los defectos puntuales se llaman térmicos o equiponderales.

Los huecos de los átomos V son las posiciones libres, no ocupados de átomos en una estructura cristalina ideal (Fig. 3.22). A ellos pertenecen por ejemplo, los huecos de los átomos de oro V_{Au} en los cristales de oro nativo. Para los minerales de composición mas complicada, por ejemplo, en los cristales iónicos pueden existir los huecos catiónicos V_c y aniónicos V_a . Los átomos internodales M_i (intersticiales) pueden imaginarse como átomos desplazados de sus posiciones en el espacio intersticial vecino (ver Fig. 3.19). El número de coordinación del átomo intersticial puede diferenciar del N.C. en su posición corriente.

Los defectos puntuales de los minerales (menos los nativos) se caracterizan por cargas excesivas o efectivas. Por ejemplo, el hueco aniónico tiene una carga excesiva positiva designada con punto: V_a y el hueco catiónico, una carga negativa, designada con rayo: V_c' . Los iones intersticiales poseen carga excesiva y un signo que corresponde a su Valencia. Por ejemplo, en la fluorita (CaF_2), el ion intersticial de flúor tiene una carga excesiva negativa: F_i' .

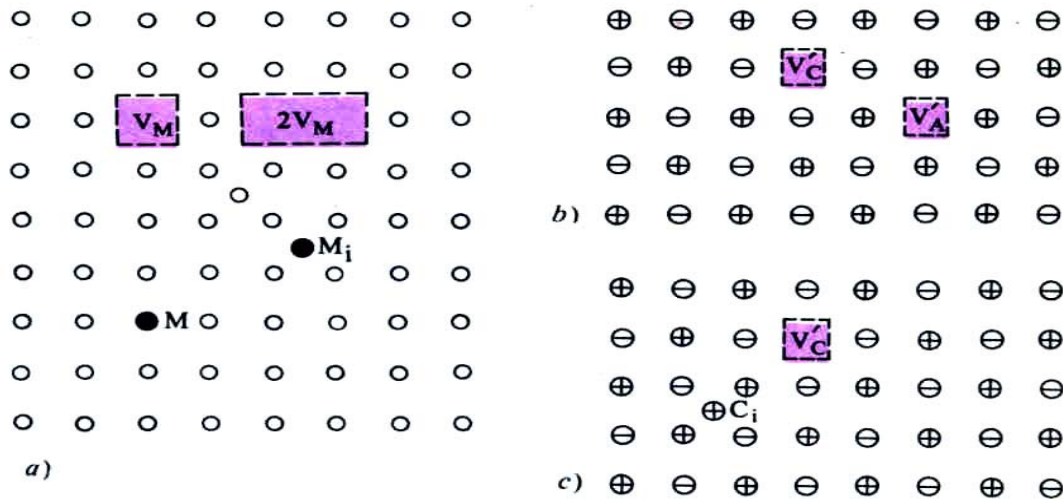


Figura 3.22. Tipos de defectos puntuales: a, en el metal: V_M y $2V_M$ (hueco y doble hueco), átomo de impureza de sustitución (M), átomo intersticial, átomo de impureza intersticial (M_i); b, par de huecos catiónico (V'_C) y aniónico (V'_A)-defecto de Schottky, c, par de huecos, catiónico (V'_C) y átomo intersticial (C_i) – defecto de Frenkel.

Generalmente en los minerales están presentes a la vez diferentes tipos de defectos puntuales, que tienen cargas excesivas de diferente valor y signo. La necesidad de observar la neutralidad electrostática sirve de causa a la total compensación local o volumétrica de las cargas excesivas con diferente signo. En el caso de compensación local de los propios defectos puntuales se forman efectos de asociación pares o más complicados. El par átomo intersticial - hueco atómico $[MiV_M]$ - se denomina defecto de Frenkel. Los huecos atómicos y cationicos dobles $[VcV_A]$ representan el defecto de Schottky con carga neutra (se designa con una cruz oblicua). A los defectos puntuales no equiponderales pertenecen generalmente los de radiación, los cuales surgen debido al desplazamiento de átomos a lo largo de las trayectorias de las partículas con alta energía vinculadas con la desintegración de los elementos radiactivos formando huellas. La concentración de estas últimas, detectadas por el decapado de la superficie de los minerales es proporcional a la dosis de irradiación radiactiva y por eso se utiliza para determinar la edad absoluta de los minerales. En caso de una concentración muy alta de defectos de radiación, la estructura cristalina de ciertos minerales que contienen elementos radiactivos, pueden destruirse pasando el metamictio próximo al vítreo o amorfo.

Defectos lineales.

Las desviaciones normales de la disposición ideal de los átomos a lo largo de ciertas direcciones (líneas) en la estructura cristalina de los átomos se denominan dislocaciones y pueden representarse por dos tipos: marginales y en hélice (Fig. 3.23).

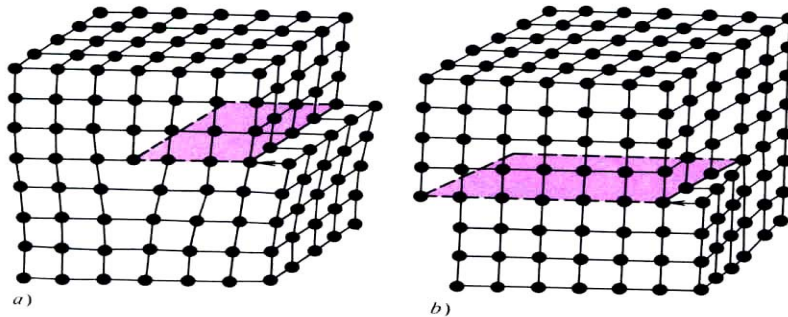


Figura 3.23. Las desviaciones normales de la disposición ideal de los átomos a lo largo de ciertas direcciones (líneas) en la estructura cristalina de los átomos se denominan dislocaciones y pueden representarse por dos tipos: marginales (a) y en hélice (b).

La dislocación marginal corresponde al caso de la existencia de la estructura del mineral de una red o capa atómica complementaria incompleta llamada semiplano. El semiplano "intersticial" se limita por una línea o un borde de dislocaciones. Las dislocaciones en hélice son unas líneas a lo largo de las cuales los planos atómicos están desplazados, formando escalones helicoidales. A lo largo de las líneas de dislocación se crean los estados de tensión de la estructura: de compresión o de tracción: los átomos se hallan allí en coordinaciones singulares con los enlaces no saturados, debido a que las disoluciones adquieren cargas excesivas.

Las dislocaciones marginales se forman a menudo debido a las deformaciones mecánicas: deslizamientos de la estructura cristalina de los minerales, acompañadas de la variación de la forma de los granos cristalinos (Fig. 3.24) y las en hélice en el proceso de crecimiento.

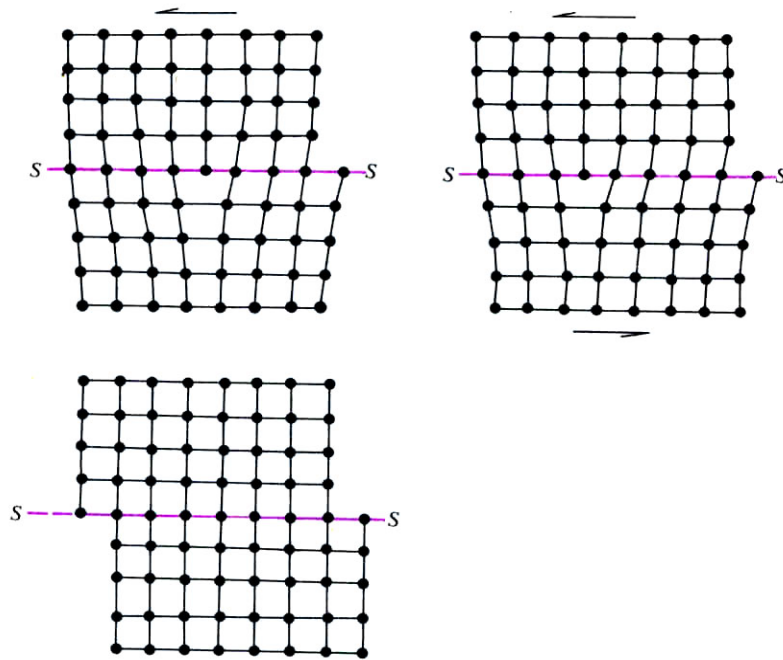


Figura 3.24. Formación y deslizamiento de la dislocación marginal durante la deformación mecánica de los cristales

A las líneas de dislocaciones en los minerales están asociadas generalmente las impurezas de diferentes elementos. Con las dislocaciones esta vinculada la variabilidad de las propiedades mecánicas y la morfología de los minerales. Las dislocaciones son detectadas corrientemente por el método de decapado con la observación siguiente de los pequeños hoyos de decapado al microscopio.

La superficie y los límites de los cristales y granos representan defectos bidimensionales que se caracterizan por una disposición irregular de los átomos y energía superficial excesiva. Se distinguen por su alta actividad química, la composición y coordinación de los átomos. La superficie tiene una naturaleza de crecimiento o de deformación. En la red real pueden existir al

mismo tiempo diferentes defectos, de los cuales las dislocaciones en hélice forman las estructuras superficiales para el crecimiento de los cristales (Fig. 3.25).

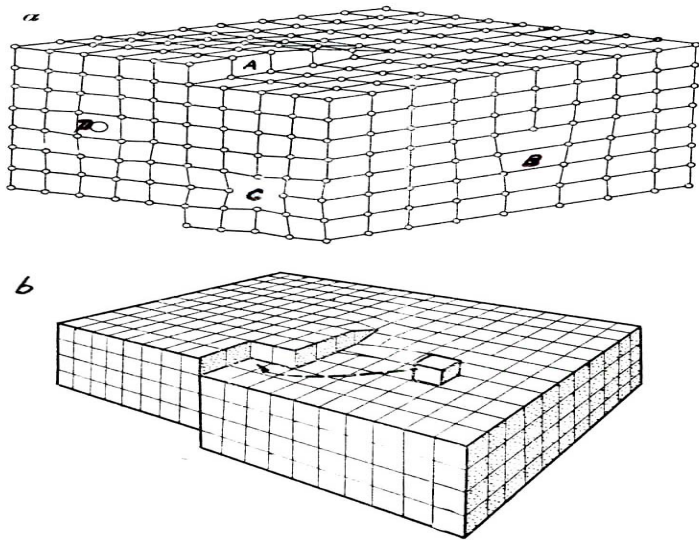


Figura 3.25. Esquema de la red real (a) con los defectos puntuales (C,D) y las dislocaciones marginales (B) y en hélice (A). Las dislocaciones en hélice crean las condiciones favorables para el crecimiento del cristal (b).

3.13. Composición química y fórmula cristaloquímica de los minerales.

En la composición química de los minerales se encuentran prácticamente todos los elementos de la Tabla Periódica de Dimitry Mendeleev (Tabla 3.4). Entre estos elementos se distinguen: formadores de las especies minerales, dispersos (isomorfos) e inertes.

Tabla 3.4.

Clasificación de los elementos por su papel en la composición de los minerales.

Característica de los elementos	Número de especies minerales	Listado de los elementos
<u>A. Formadores de las especies minerales:</u>		
1. Fundamentales	Más que 500	O (1364), H (908)
2. Esenciales	500-150	Si (432), Ca (385), S (369), Al (320), Fe (300), Na (222), Mg (191), Cu (184), P (179), Mn (171), Pb (168)
3. Principales	150-50	B (112), C (112), K (106), U (101), Cl (97), F (86), Sb (74), Zn (61), Bi (61), Ti (60), Ba (60), V (59), Ag (50)
4. Raros	50-10	Ni (49), Be (47), Se (37), Ce (33), N (32), Co (28), Sr (26), Li (24), Nb (23), Sn (22), Y (21), Zr (18), Cr (17), Ta (17), Hg (16), Mo (15), Th (12), Pd (11), W (11)
5. Muy raros	Menos que 10	La (9), Au (9), Ge (8), Pt (8), Cd (5), Tl (5), In (3), Sc (2), Ir (2), Br (1), Cs (1), Ru (1), Rh (1), Os (1)
<u>B. Dispersos (Isomorfos)</u>	No forman las especies minerales	Rb, Tc, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tu, Yb, Lu, Hf, Re, Po, At, Fr, Ra, Ac, Pa, Np, Pu
<u>C. Inertes</u>	No pueden formar las especies minerales	He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn

Existen varios métodos de expresión breve de la composición química de los minerales.

Los resultados de los análisis químicos se recalculan para las relaciones moleculares o atómicas y luego se escriben en forma de fórmulas empíricas o cristal químicas de la composición.

El recalcu para la fórmula química se realiza en el orden siguiente. Con este propósito el tanto por ciento de masa de cada componente (en forma de óxidos o elementos) deben dividirse por la masa molecular o atómica respectiva; es necesario reducir las cifras obtenidas, las cantidades moleculares o atómicas a números simples, los cuales muestran en que proporciones (relaciones cuantitativas) se hallan los componentes que integran el mineral.

Todas las formulas químicas adquiridas a los minerales has sido calculadas a partir de los análisis químicos. Un análisis da los porcentajes de constituyentes de un mineral: las partes en 100 de peso de los diversos elementos o de los radicales presentes. Consideremos los siguientes análisis de varios compuestos que no contienen el oxígeno en su composición (Tabla 3.5).

Tabla 3.5. Calculo de la composición para los compuestos minerales no oxigenados.

Componente (Elemento)	Contenido (masa %)	Masa atómica	Cantidades atómicas	Proporciones atómicas
Cu	34.40	63.54	0.541	1
Fe	30.47	55.85	0.545	1
S	35.87	32.07	1.1185	2
Na	39.4	22.99	1.710	1
Cl	60.60	35.07	1.709	1
Ca	51.3	40.08	1.279	1
F	48.7	18.99	2.564	2

En el caso de los compuestos oxigenados (sales oxigenadas, óxidos e hidróxidos) los resultados de los análisis químicos se presentan en la forma de los óxidos correspondientes. Para calcular la formula cristal química de los minerales hay que considerar la cantidad de algún elemento o de su suma. Por ejemplo, si se admite que el contenido de átomos de oxígeno en el

piroxeno corresponde a la composición teórica, es decir es igual a 6, entonces el cálculo del análisis químico de este mineral puede hacerse según el esquema que se expone a continuación. Con la finalidad de obtener los coeficientes para cada átomo, es necesario dividir las cantidades atómicas de cada elemento por el divisor común que se calcula mediante la división de la suma de las cantidades atómicas del oxígeno por 6.

El cálculo del análisis químico del piroxeno para la fórmula cristalocímica con respecto al oxígeno (Tabla 3.6). Al escribir las fórmulas, se acostumbra poner por separado los aniones y los cationes: primeramente se escriben los cationes, luego los aniones simples o complejos. En las fórmulas cristalocímicas se escriben por grupos separados los átomos situados en posiciones estructurales iguales, es decir, que son isomorfos. Los primeros se escriben los elementos principales de especies y solo después los secundarios de impureza. Las particularidades estructurales de los minerales también pueden reflejarse en las fórmulas cristalocímicas. La información parcial sobre la estructura se contiene en la forma de indicación de los radicales.

Las fórmulas cristalocímicas son importantes en la explicación de los esquemas isomorfos presentes en los compuestos naturales. Las relaciones entre los elementos componentes de los minerales permiten obtener los datos necesarios para la interpretación de las condiciones de formación de los mismos. Finalmente, estas fórmulas muestran la distribución de los elementos impurezas algunas de los cuales pueden tener importancia práctica.

Tabla 3.6. Cálculo de la formula cristaloquímica del piroxeno - CaMg Si₂O₆

Componentes	Contenido Masa,%	Masa molecular	Cantidades moleculares (x 10000)	Cantidades atómicas De cationes	atómicas de oxígeno	Coefficientes de relaciones atómicas
SiO ₂	52.25	60.09	8696	8696	17392	1.920
TiO ₂	0.72	79.90	90	90	180	0.019
Al ₂ O ₃	2.54	101.94	249	498	747	0.110
Fe ₂ O ₃	1.81	159.70	114	228	342	0.05
FeO	1.95	71.85	271	271	271	0.059
MnO	0.64	70.94	90	90	90	0.019
MgO	14.97	40.32	3713	3713	3713	0.819
CaO	24.38	56.08	4348	4348	4348	0.960
Na ₂ O	0.56	61.98	90	180	90	0.039
Total	99.93			Divisor:27173:6=4529		

Formula cristaloquímica:

