

# Vazby, struktury, povrchy

# Prvky a periodický systém

## Elektronová struktura

Kvantová čísla:

hlavní  $n = 1, 2, 3, \dots$  : určuje hlavní část energie elektronu a průměrnou vzdálenost od jádra

vedlejší (azimutální)  $l = 0, 1, \dots, n-1$ : celkový úhlový moment a tvar orbitalu

magnetické  $m = -l, \dots, 0, \dots, l$ : určuje z-komponentu úhlového momentu a tedy orientaci orbitalu

spin  $m_s = -1/2, +1/2$ : určuje spin elektronu

Pauliho princip výlučnosti – žádné dva elektrony v elektronovém obalu nemohou mít všechna kvantová čísla stejná

Princip obsazování orbitalů:

1s	2 e
2s 2p	8 e
3s 3p	8 e
4s 3d 4p	18 e
5s 4d 5p	18 e
6s 4f 5d 6p	32 e
7s 5f 6d 7p	32 e

# Vazby a velikosti

**Vazby:** mezní typy vazeb – kovalentní, iontová, kovová, Van der Waalsova, vodíková – ve strukturách minerálů se většinou setkáváme s jejich kombinacemi

## **Velikosti stavebních částic minerálů**

U neutrálních atomů závisí jejich poloměr na atomovém čísle, tedy na počtu elektronů v elektronovém obalu atomu.

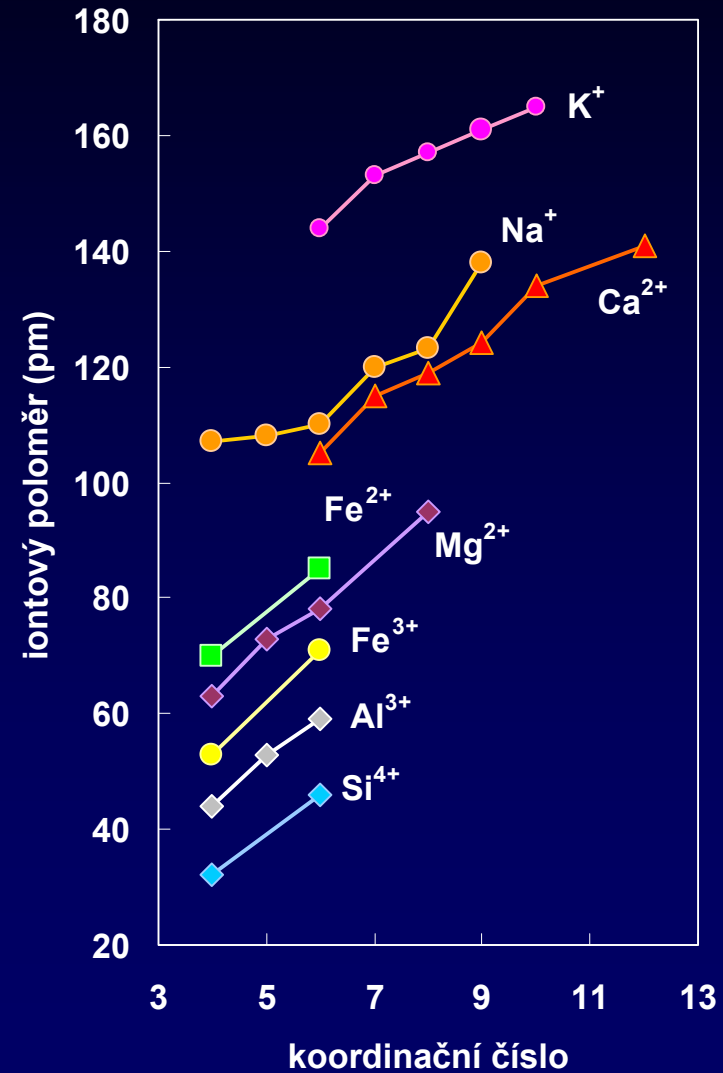
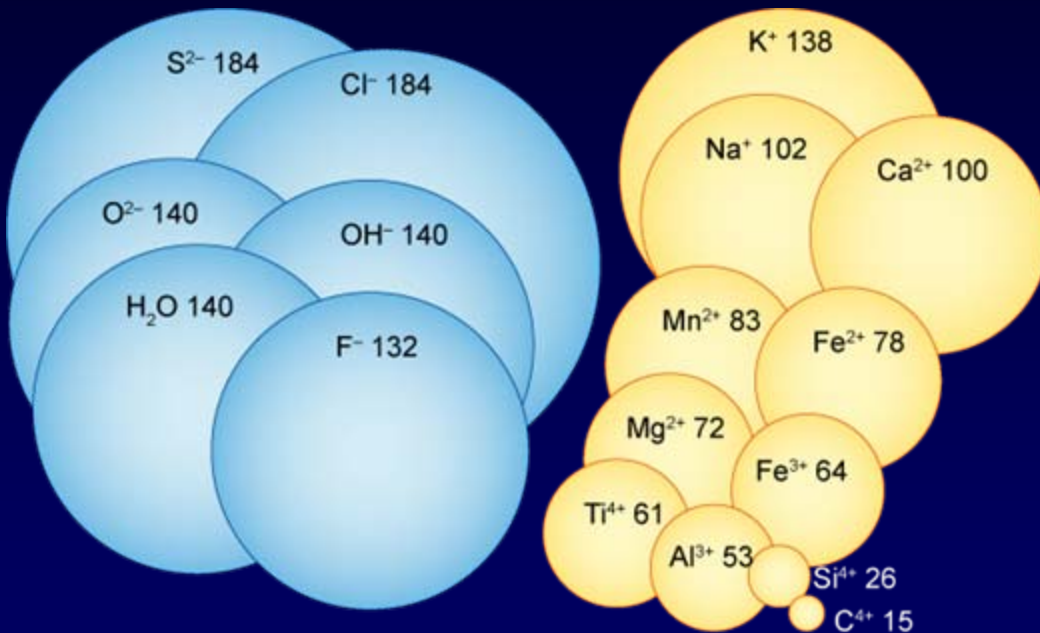
U nabitých částic – ionů – závisí v hlavní míře na jejich náboji. Obecně platí, že čím vyšší je jejich kladný náboj, tím jsou menší – výrazné přitahování kladným nábojem protonů jádra; čím je vyšší záporný náboj, tím jsou větší – vzájemné odpuzování stejných nábojů elektronů.

Relativní srovnání iontových poloměrů nejzastoupenějších prvků v zemské kůře (čísla udávají poloměr v pm – pikometrech –  $10^{-9}$  m)

# Velikosti

O4 2

O4 1

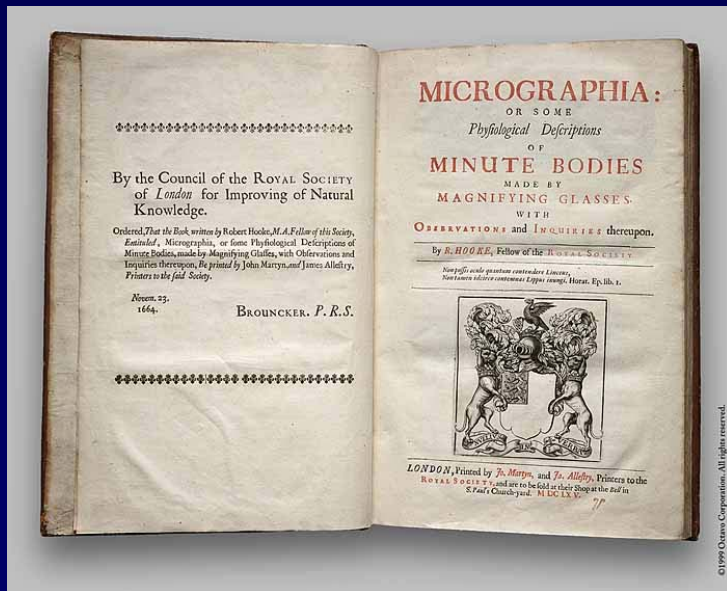


# Základy výstavby struktur

Když se Robert Hook v roce 1665 zamýšlel nad podstatou pravidelných tvarů krystalů, došel k závěru, že je to důsledek pravidelného ukládání malých kulových částic:

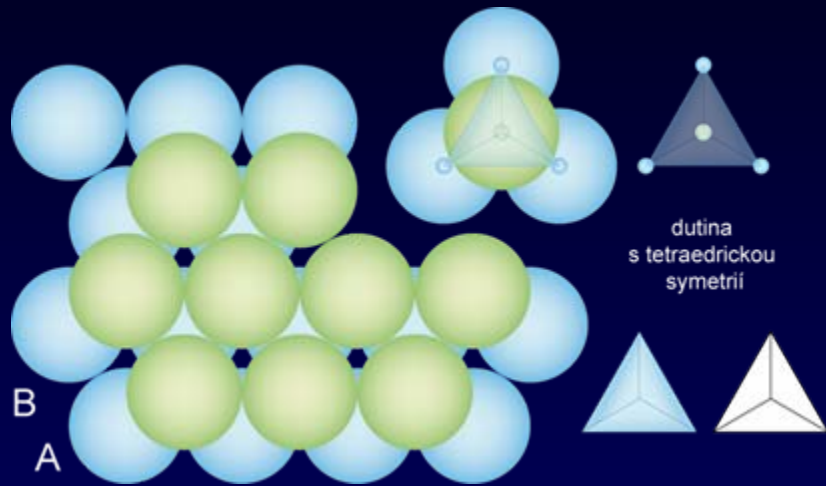
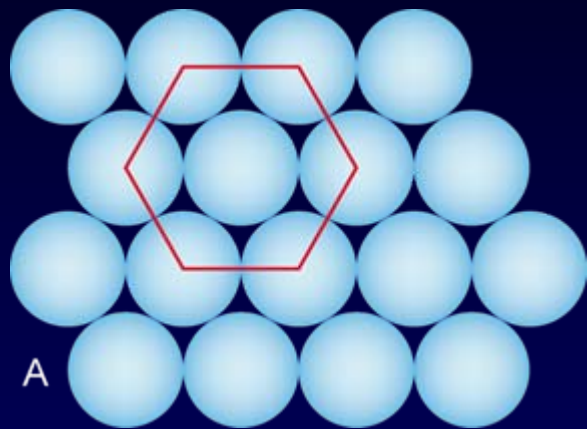
„[...] A tak se domnívám, že kdybych měl čas a příležitost, mohl bych prokázat, že všechny tyto pravidelné útvary, jež jsou tak nápadně *rozmanité* a *zvláštní* a v takové míře zdobí a zkrášlují tak mnohá tělesa ... mají s největší pravděpodobností původ ve třech nebo čtyřech polohách či postaveních *kulovitých částic* ... A to jsem také názorně demonstroval se souborem kuliček a s několika málo dalšími velmi jednoduchými tělesy, takže mohu říci, že ani jediný pravidelný tvar, s nímž jsem se dosud setkal, není takový ... abych ho nemohl napodobit pomocí souboru kuliček a jednoho nebo dvou dalších těles, k čemuž dokonce někdy téměř úplně postačí setřepat tyto částičky dobře dohromady.“

Hook Robert (1665): *Micrographia, or Some physiological Description of Minute Bodies made by Magnifying glasses with observations and Inquiries thereupon*. Jo. Martyn and Ja. Allestry, London.



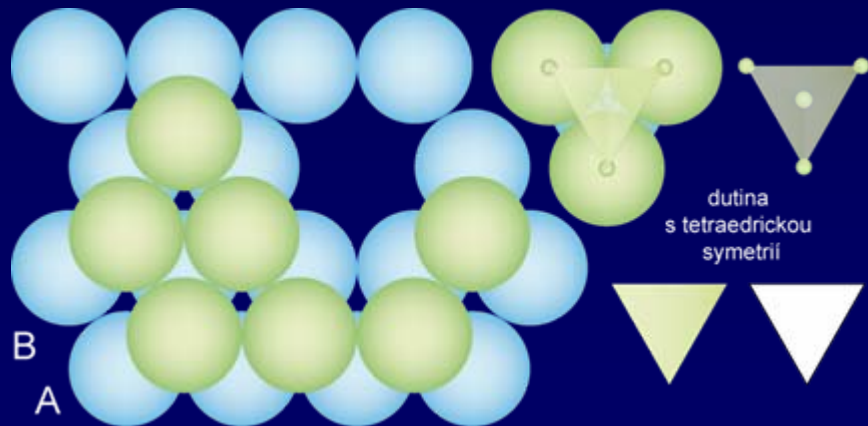
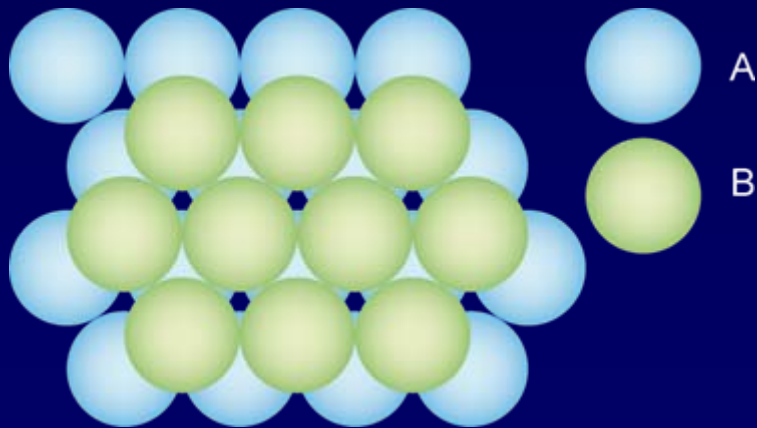
# Uspořádání – 2 vrstvy

O4 5



O4 7a

O4 6

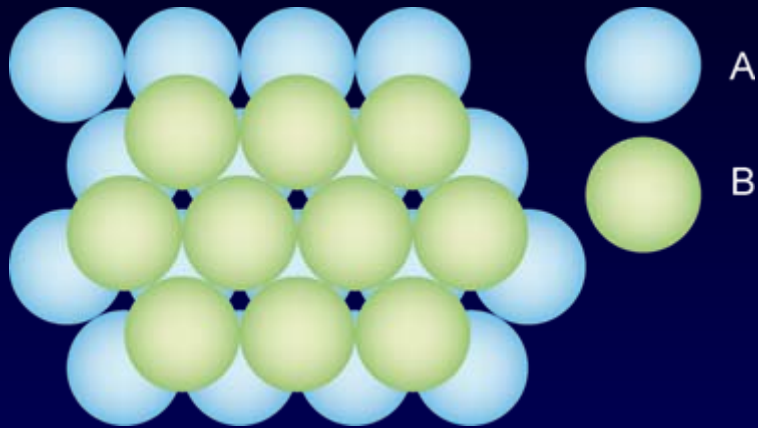


O4 7b

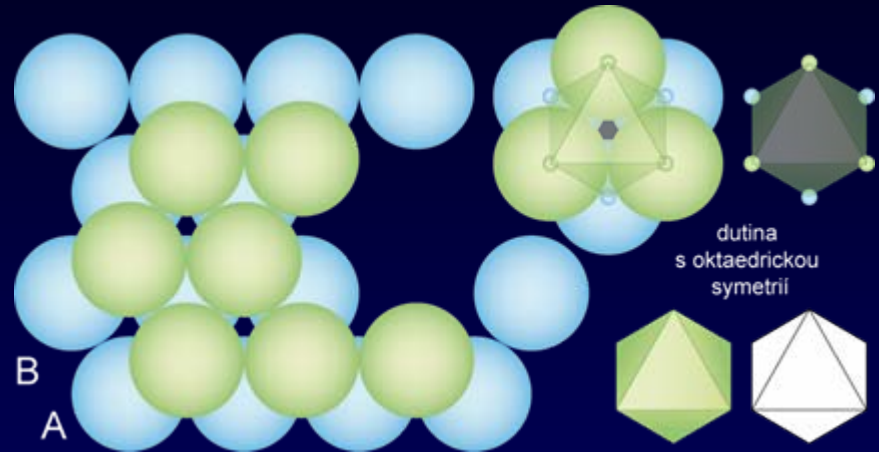


# Uspořádání – 2 vrstvy

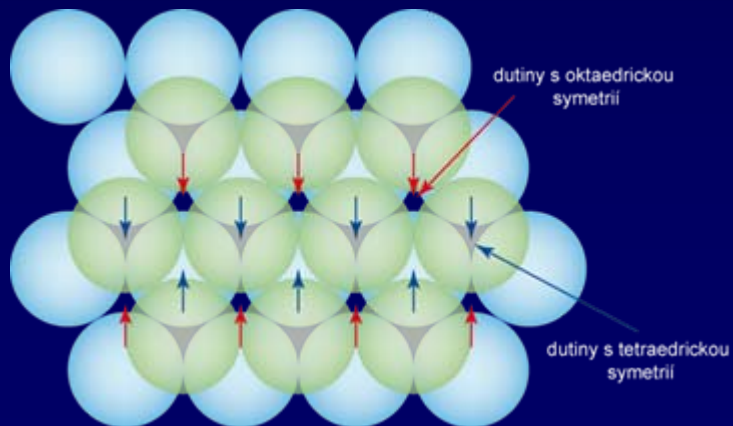
O4 6



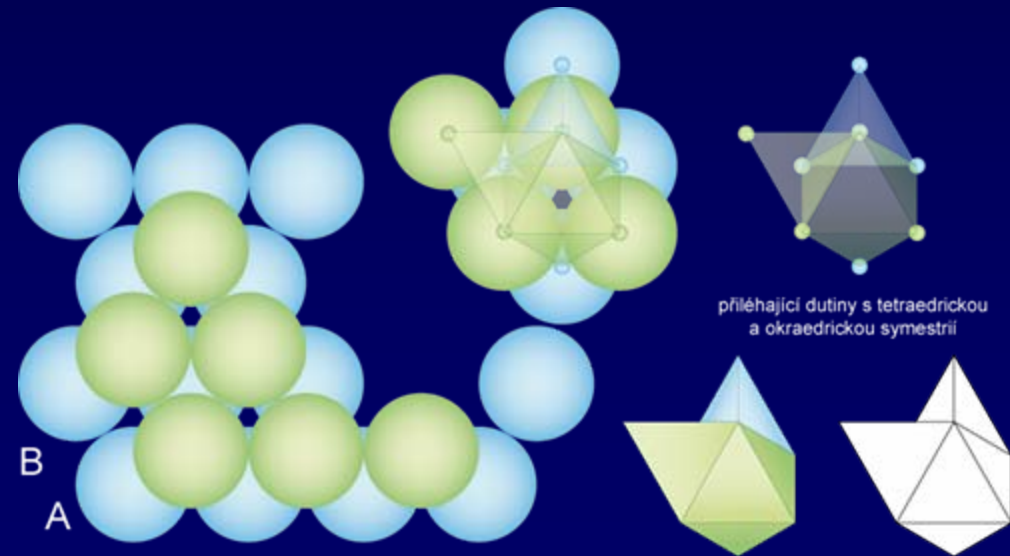
O4 8a



O4 8c

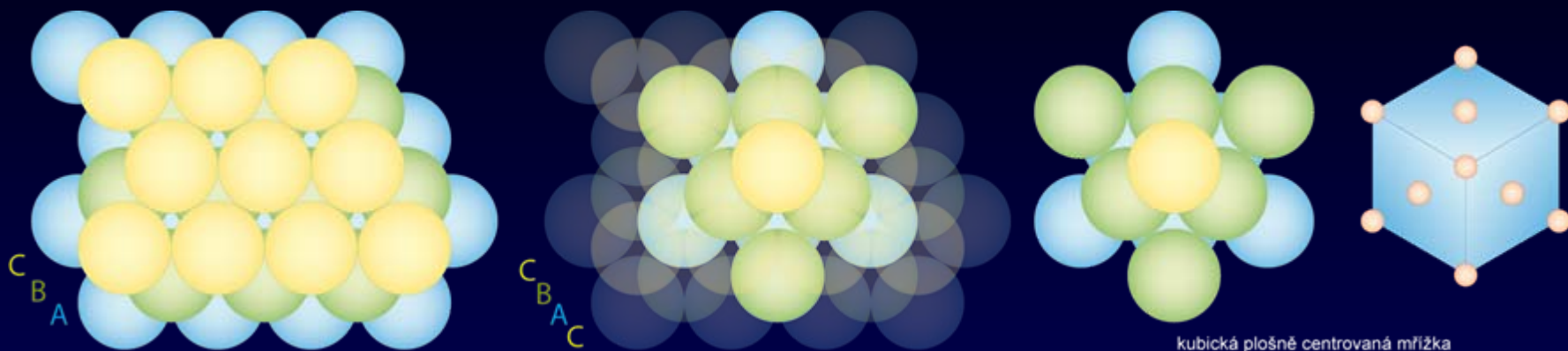


O4 8b

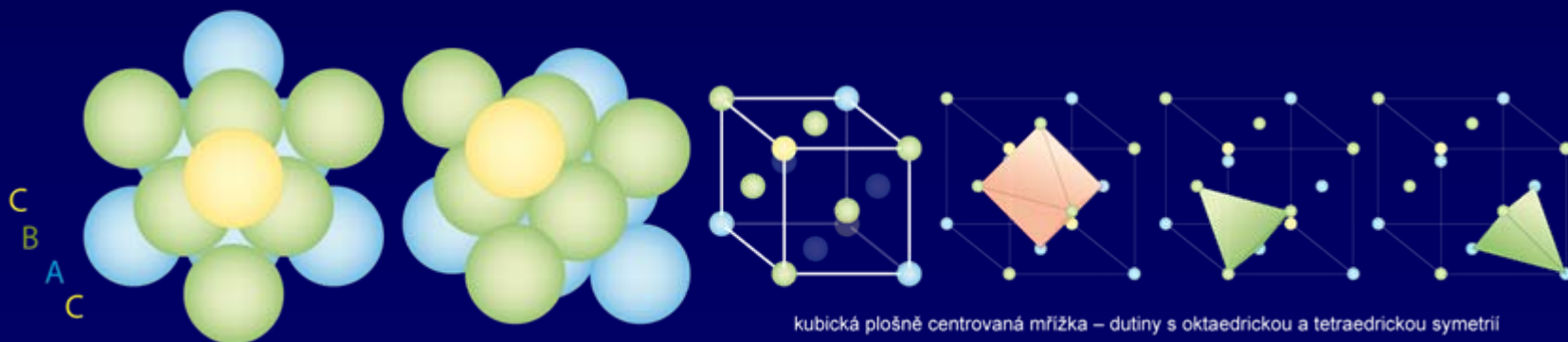


# Uspořádání – 3 vrstvy

O4 9\_10



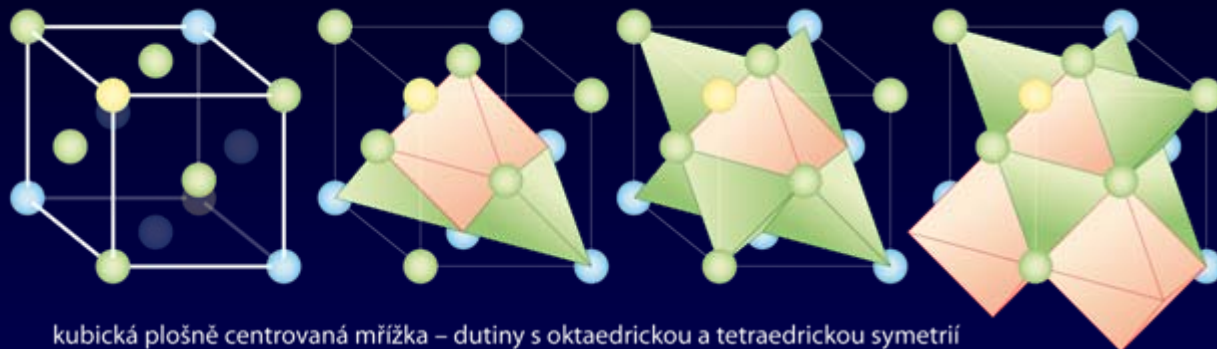
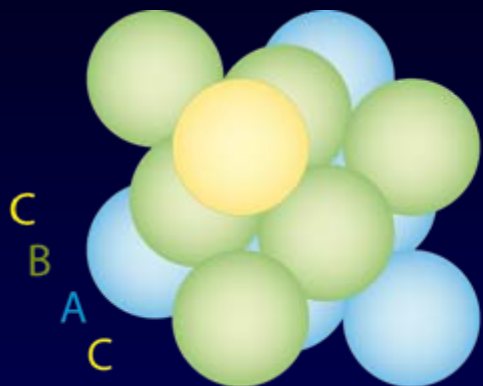
O4 11



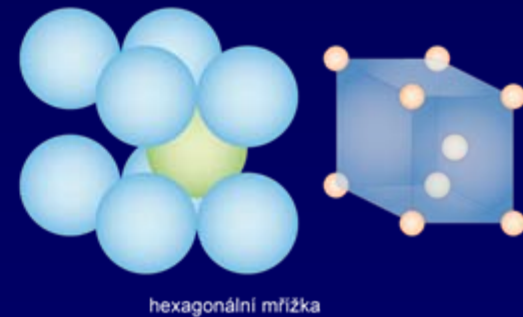
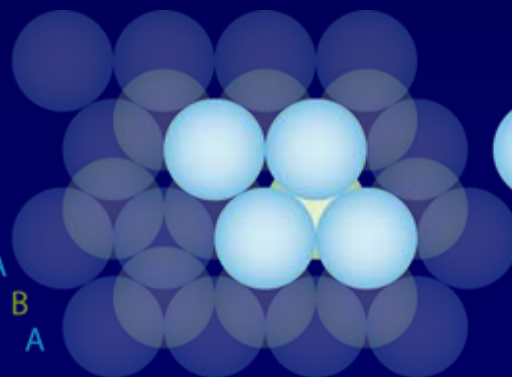
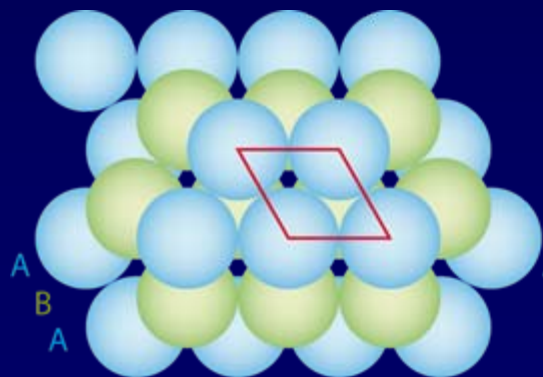


# Uspořádání – 3 vrstvy

O4 11a



O4 12

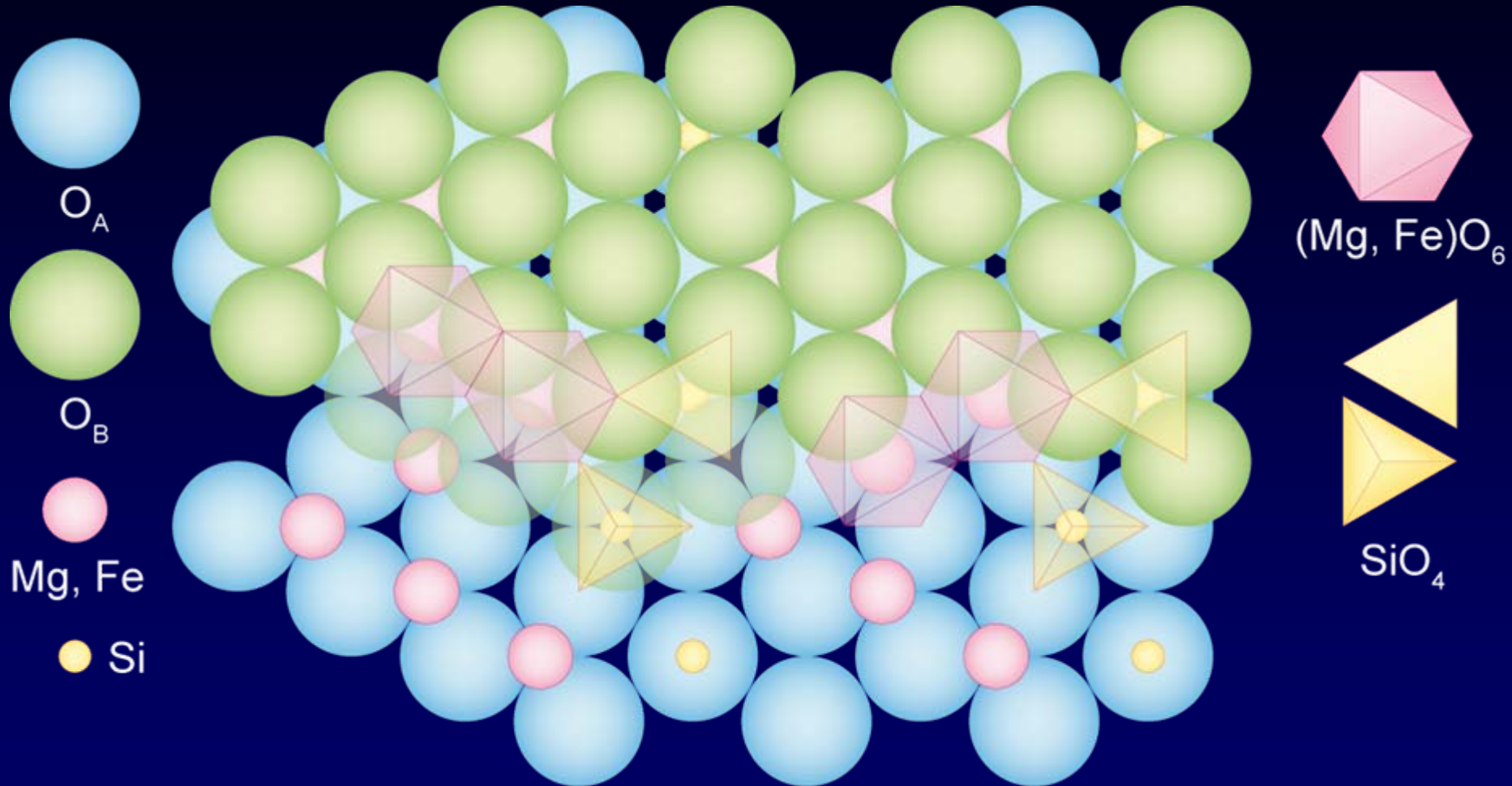


# Uspořádání

skupina	obecný vzorec*	ke křemeni	poměr MO:SiO <sub>2</sub>	minerál	vzorec
	SiO <sub>2</sub>		0 : 1	křemen	SiO <sub>2</sub>
tekto-	MSi <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	Al → Si	1 : 4	anortit	CaSi <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>8</sub>
fylo-	M <sub>3</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>	O → OH → Si	3 : 4	mastek	Mg <sub>3</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>2</sub>
	M <sub>6</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>	O → OH → Si	6 : 4	chlorit	(Mg,Fe,Al) <sub>6</sub> (Si,Al) <sub>4</sub> O <sub>10</sub> (OH) <sub>8</sub>
ino-	MSiO <sub>3</sub>	→ Si	1 : 1	enstatit	MgSiO <sub>3</sub>
			1 : 1	diopsid	CaMgSi <sub>2</sub> O <sub>6</sub>
neso-	M <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	→ Si	2 : 1	olivín	(Fe,Mg) <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>

# Olivín – $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$

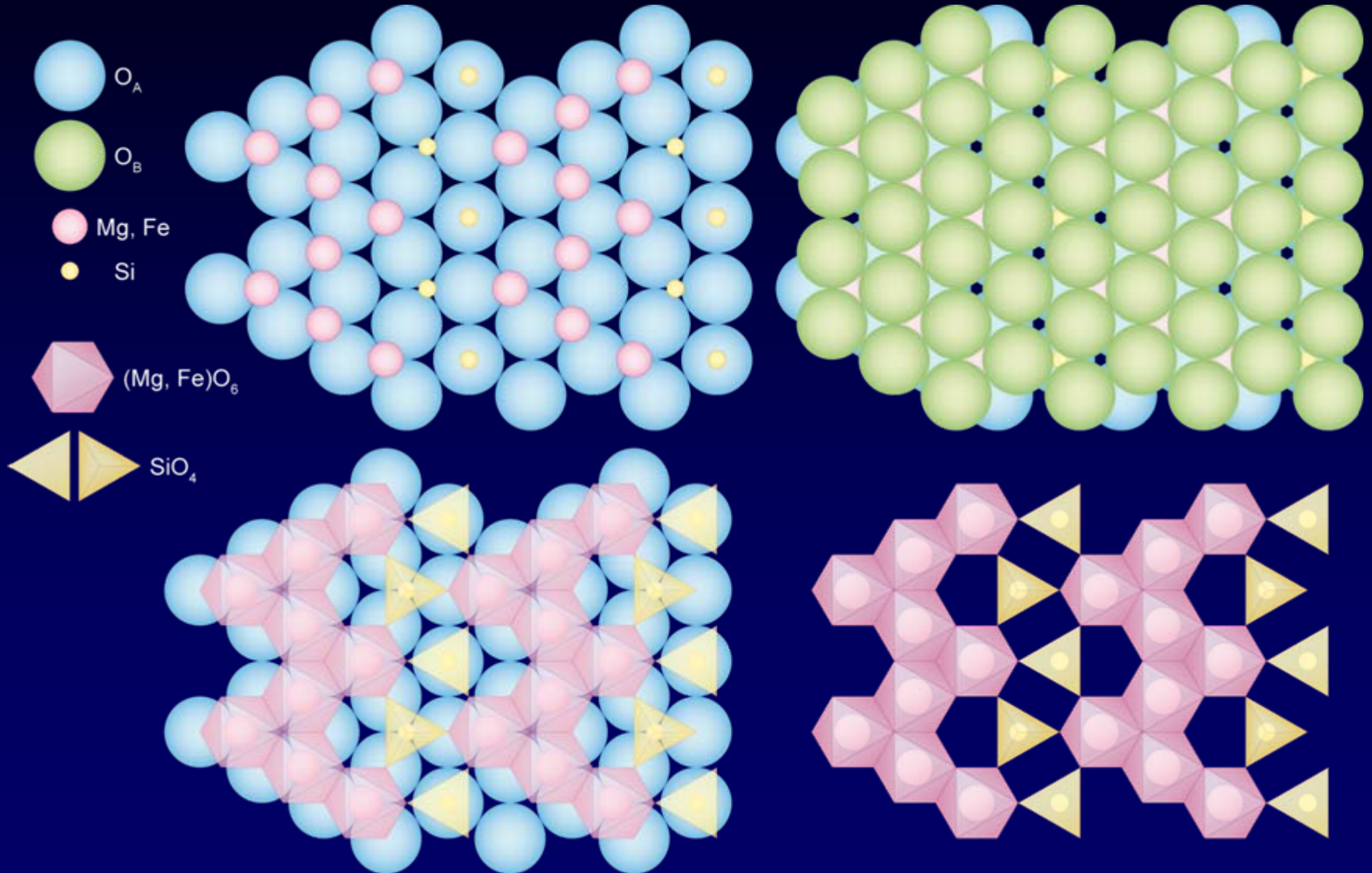
O4 13a



Mezi vrstvou A a B jsou střídavě obsazovány oktaedrické (Mg-Fe) a tetraedrické dutiny (Si).

# Olivín – $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$

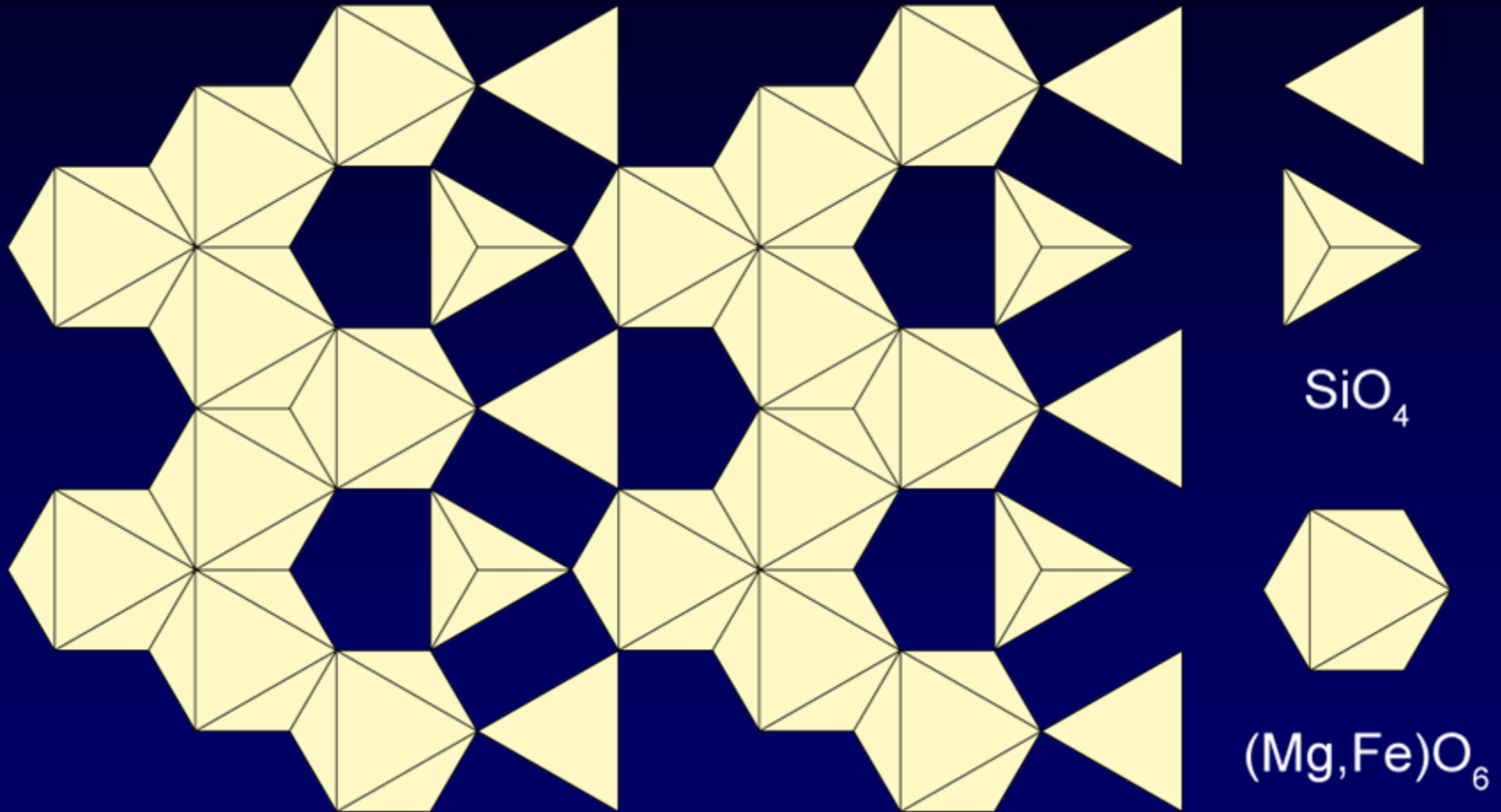
O4 13





# Olivín – $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$

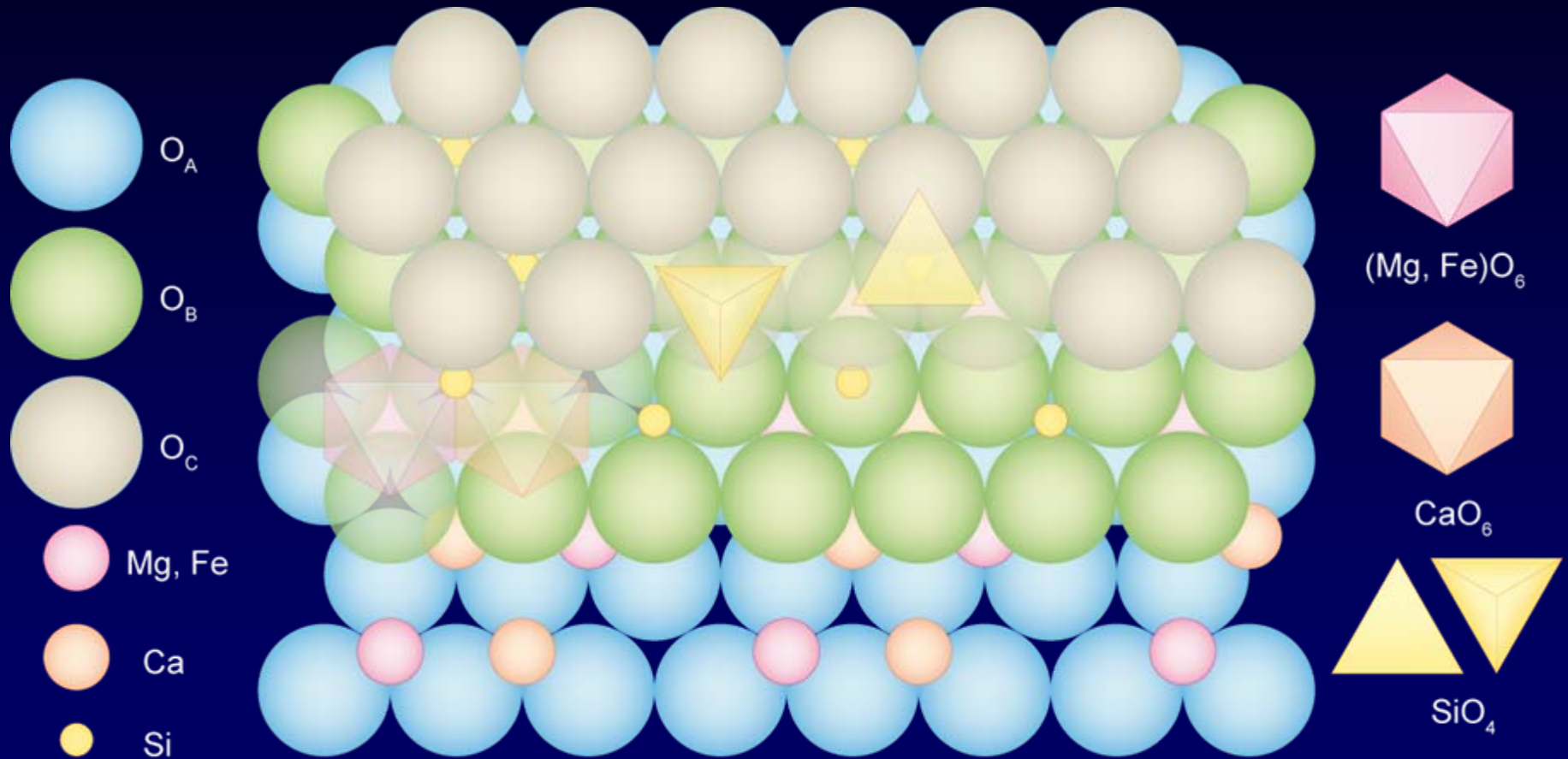
O4 14





# Pyroxeny – diopsid $\text{Ca}(\text{Mg, Fe})\text{Si}_2\text{O}_6$

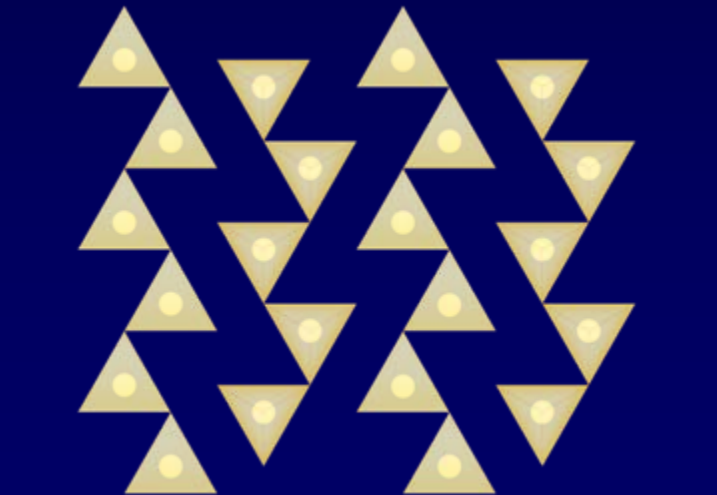
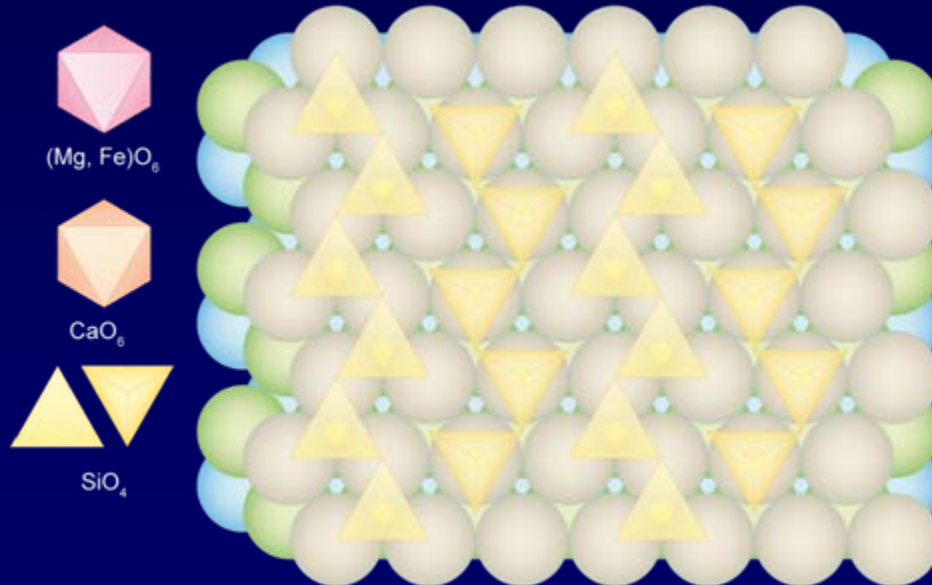
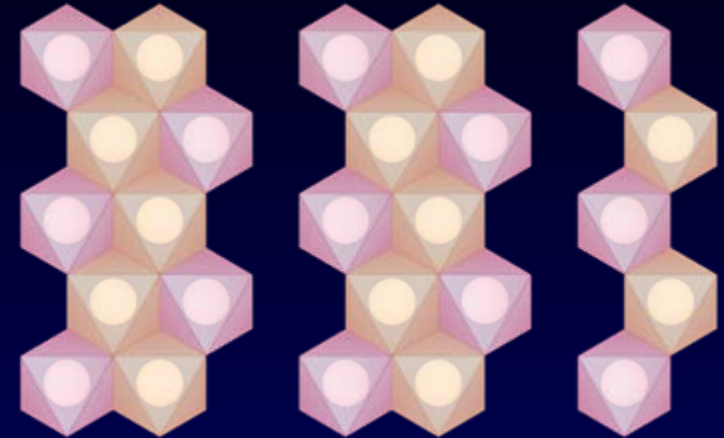
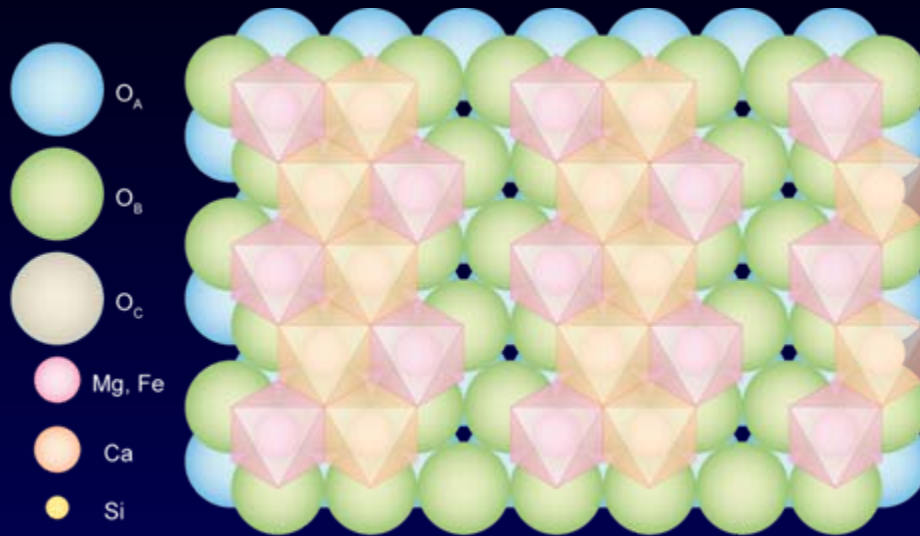
O4 15b



Mezi vrstvou A a B jsou obsazovány jen oktaedrické dutiny (Ca, Mg-Fe),  
mezi vrstvou B a C pouze tetraedrické dutiny (Si).

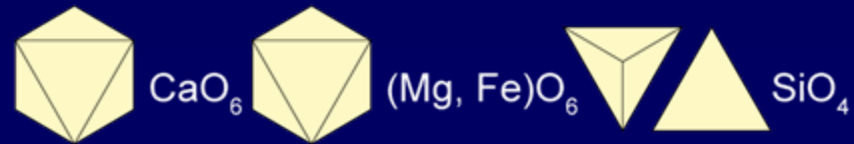
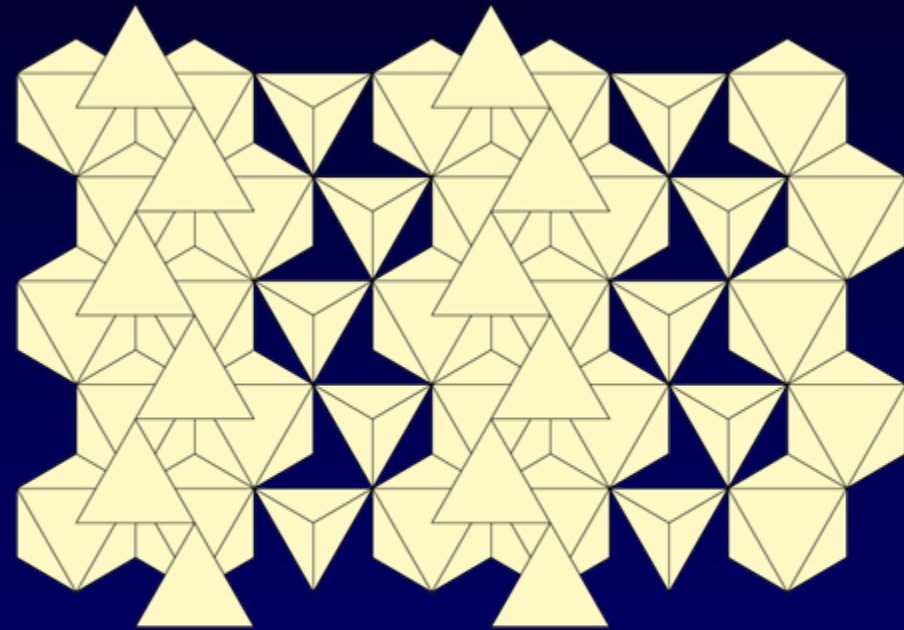
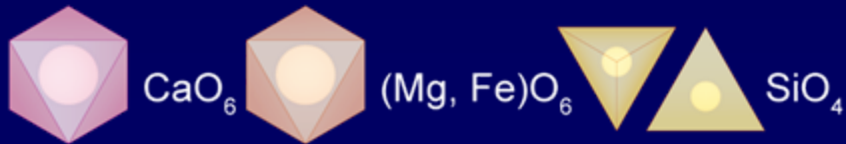
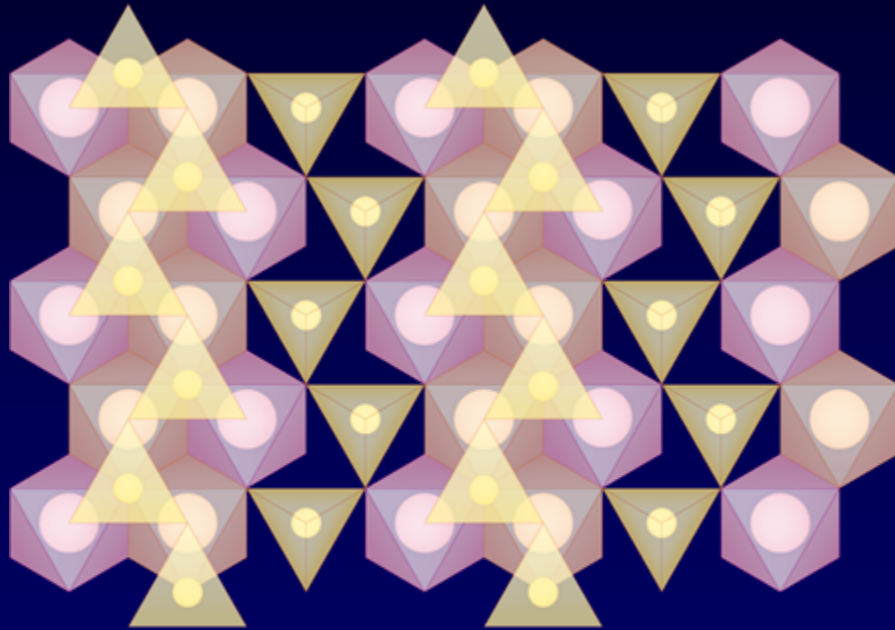
# Pyroxeny – diopsid $\text{Ca}(\text{Mg, Fe})\text{Si}_2\text{O}_6$

O4 15



# Pyroxeny – diopsid $\text{Ca}(\text{Mg, Fe})\text{Si}_2\text{O}_6$

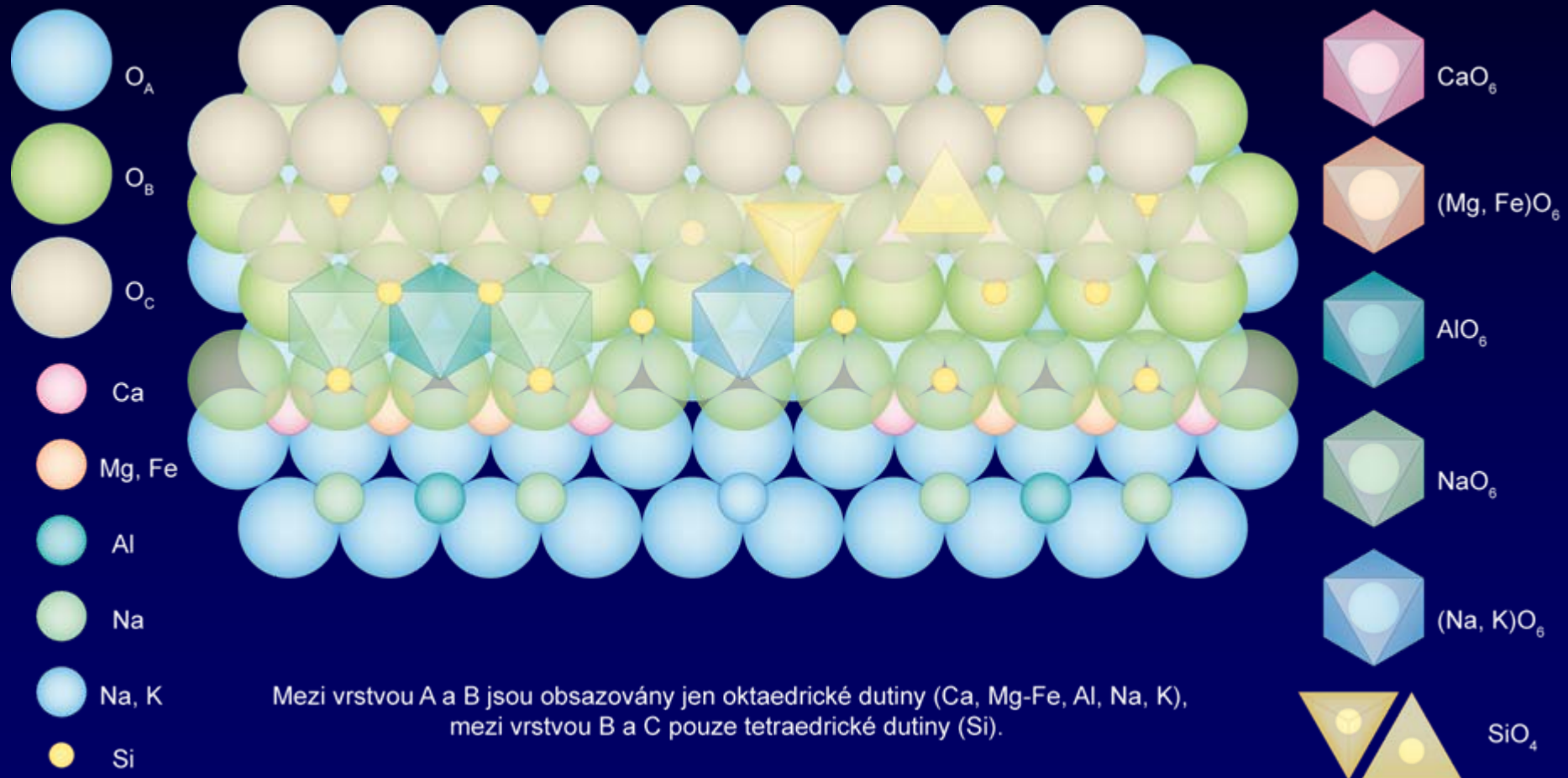
O4 15a





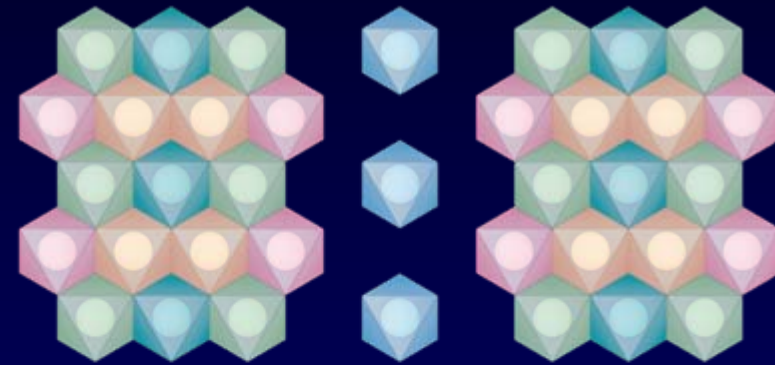
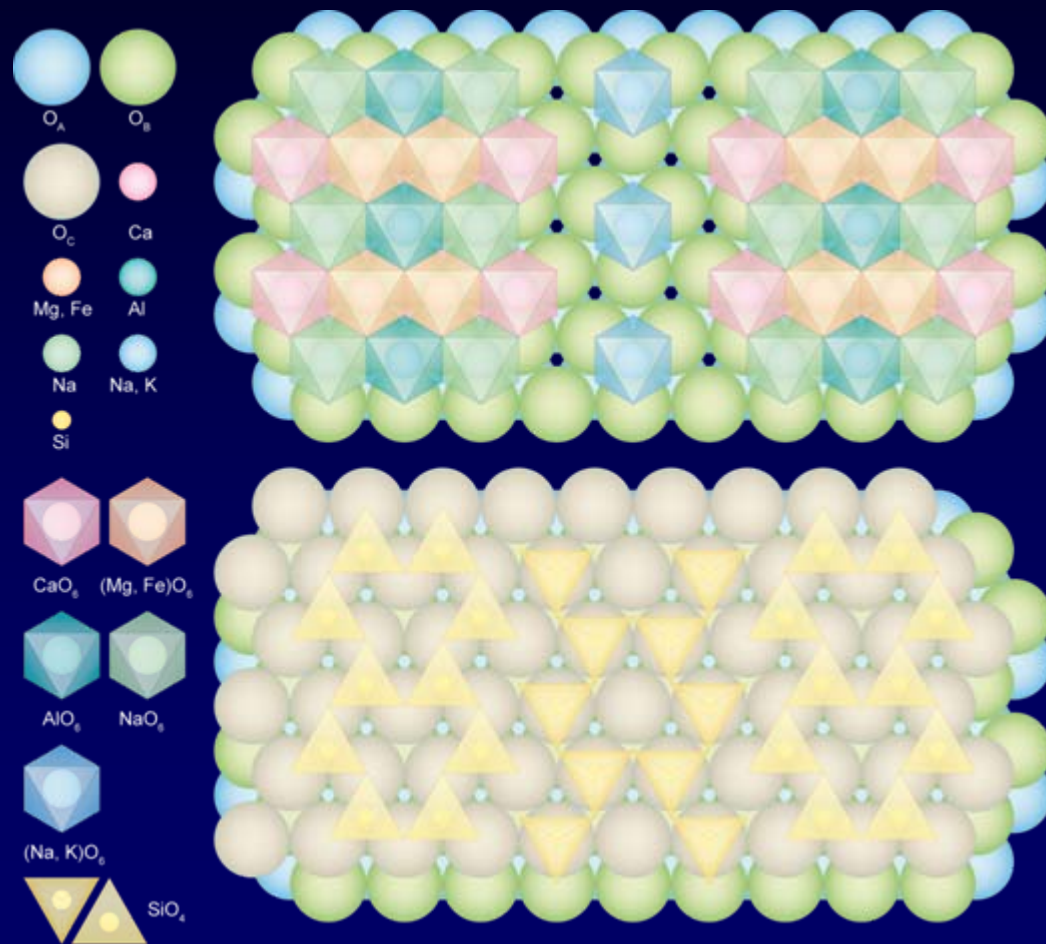
# Amfiboly – $\text{NaCa}_2(\text{Mg, Fe, Al})_5(\text{OH})_2(\text{Si, Al})_8\text{O}_{22}$

O4 16a

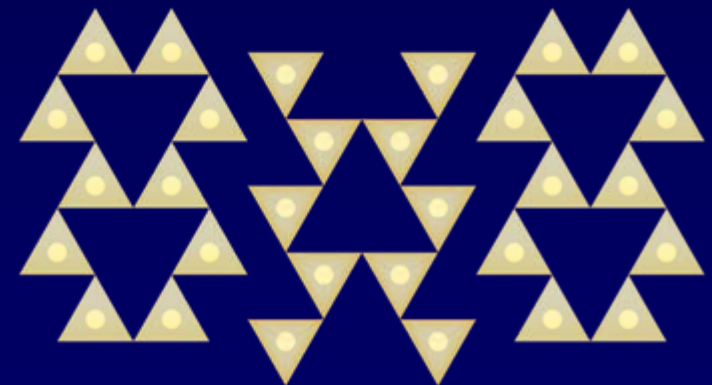


# Amfiboly – $\text{NaCa}_2(\text{Mg, Fe, Al})_5(\text{OH})_2(\text{Si, Al})_8\text{O}_{22}$

O4 16b



Mezi vrstvou A a B jsou obsazovány jen oktaedrické dutiny (Ca, Mg-Fe, Al, Na, K).

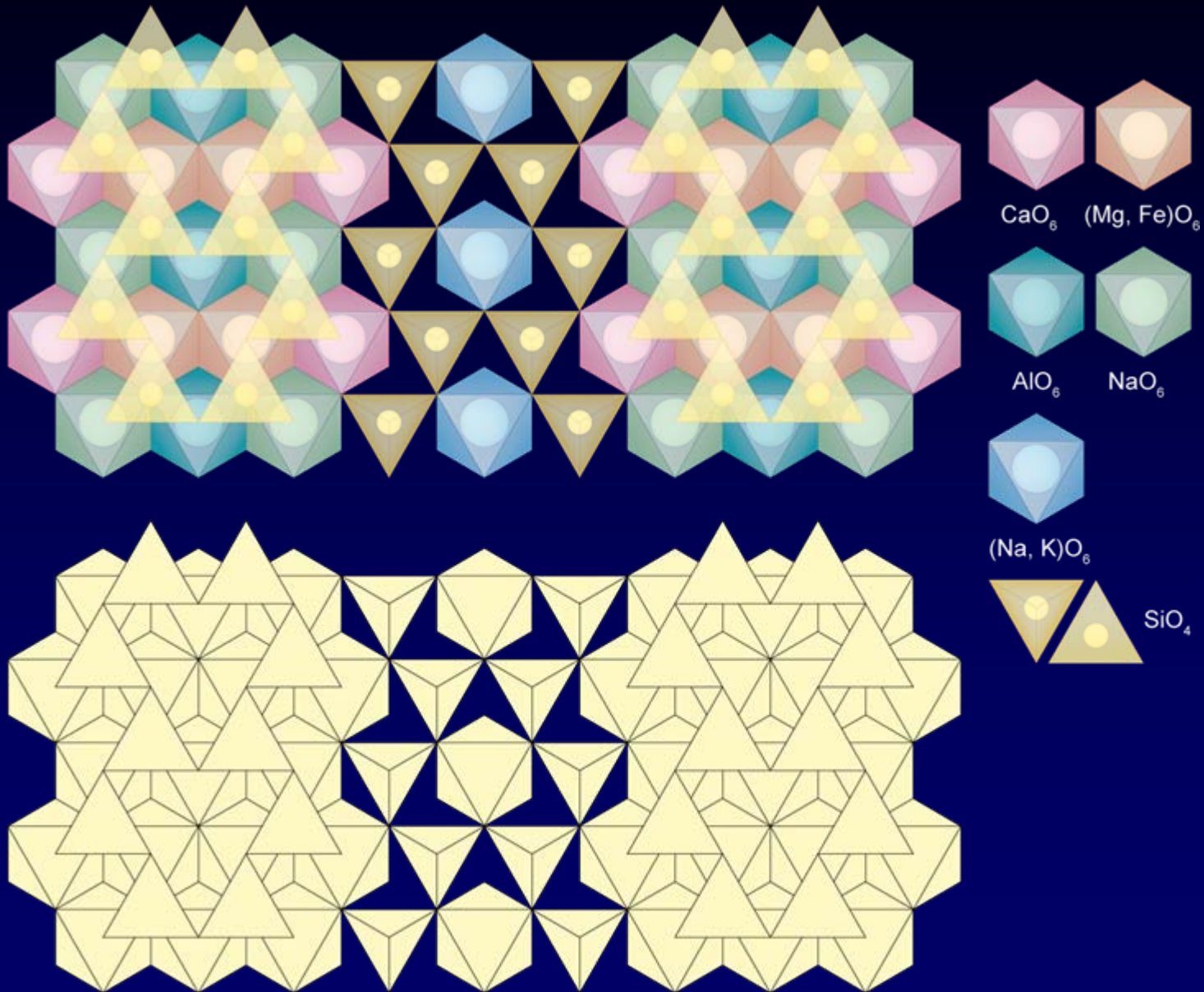


Mezi vrstvou B a C jsou obsazovány pouze tetraedrické dutiny (Si, Al).



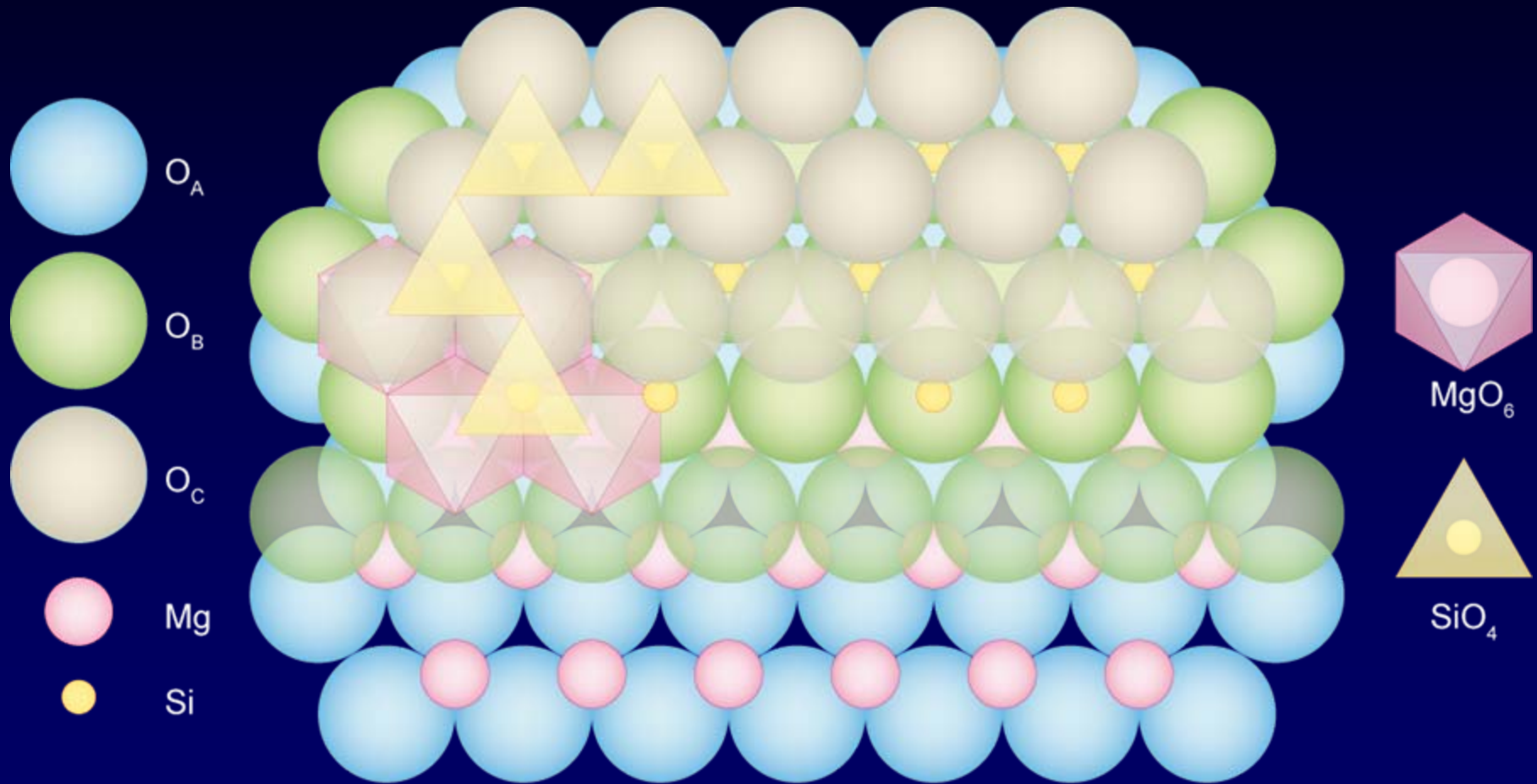
# Amfiboly – $\text{NaCa}_2(\text{Mg, Fe, Al})_5(\text{OH})_2(\text{Si, Al})_8\text{O}_{22}$

O4 16c



# Fylosilikáty – mastek $\text{Mg}_3(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

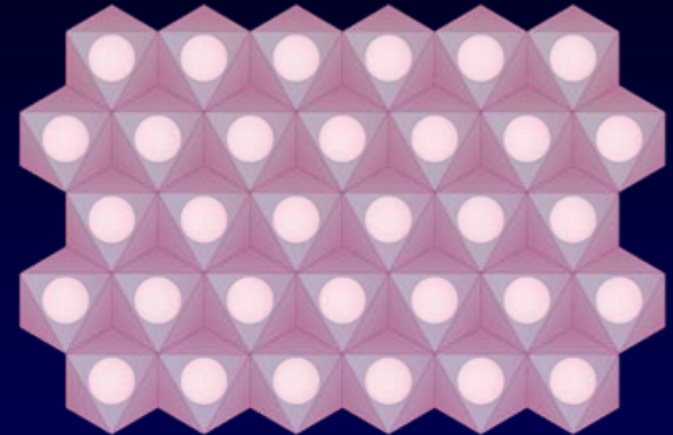
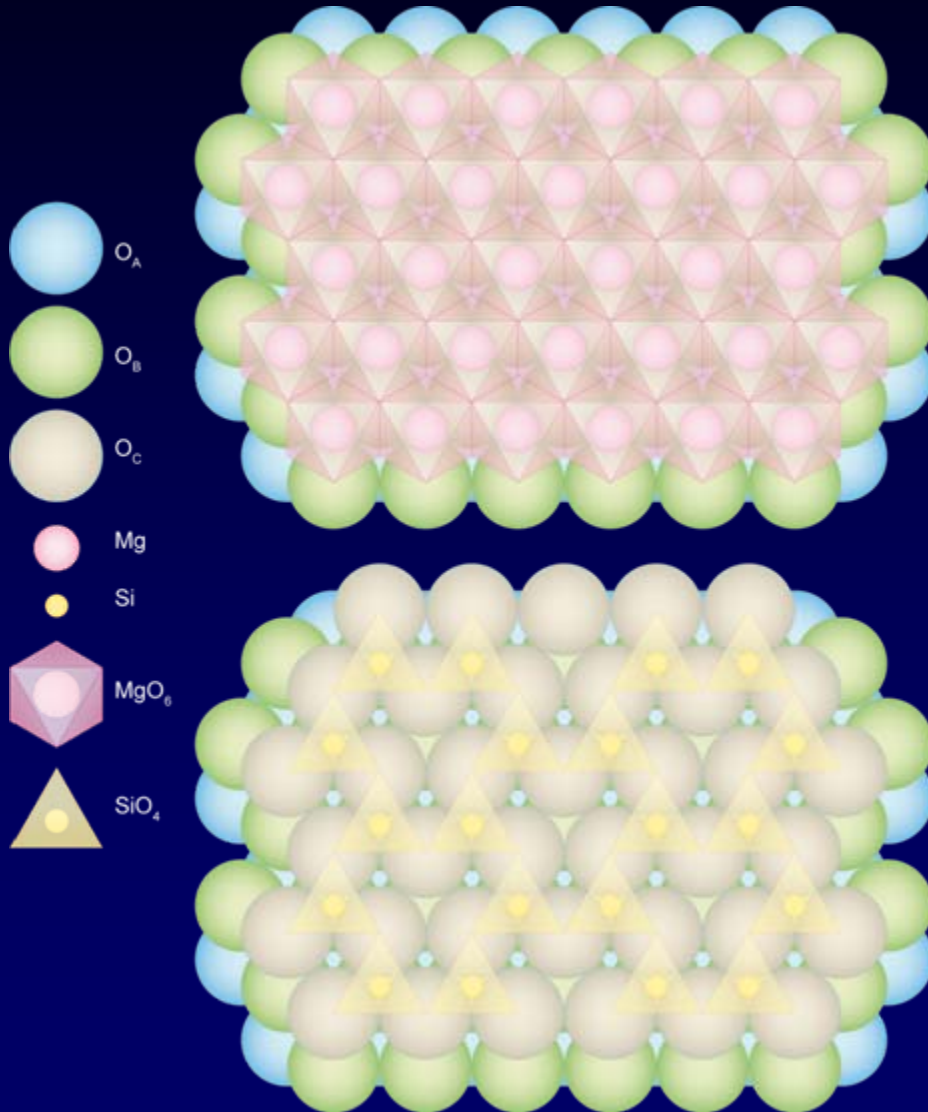
O4 17a



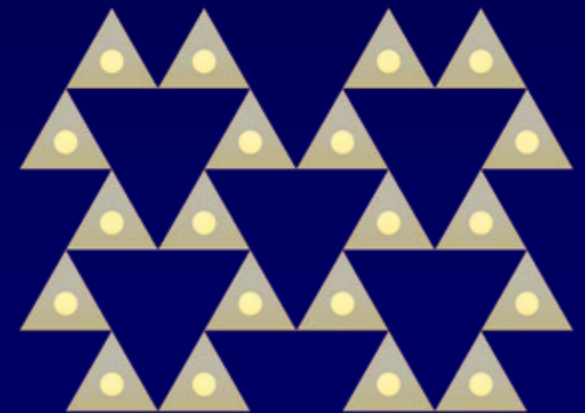
Mezi vrstvou A a B jsou obsazovány jen oktaedrické dutiny (Mg),  
mezi vrstvou B a C pouze tetraedrické dutiny (Si).

# Fylosilikáty – mastek $\text{Mg}_3(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

O4 17b



Mezi vrstvou A a B jsou obsazovány všechny oktaedrické dutiny (Mg).

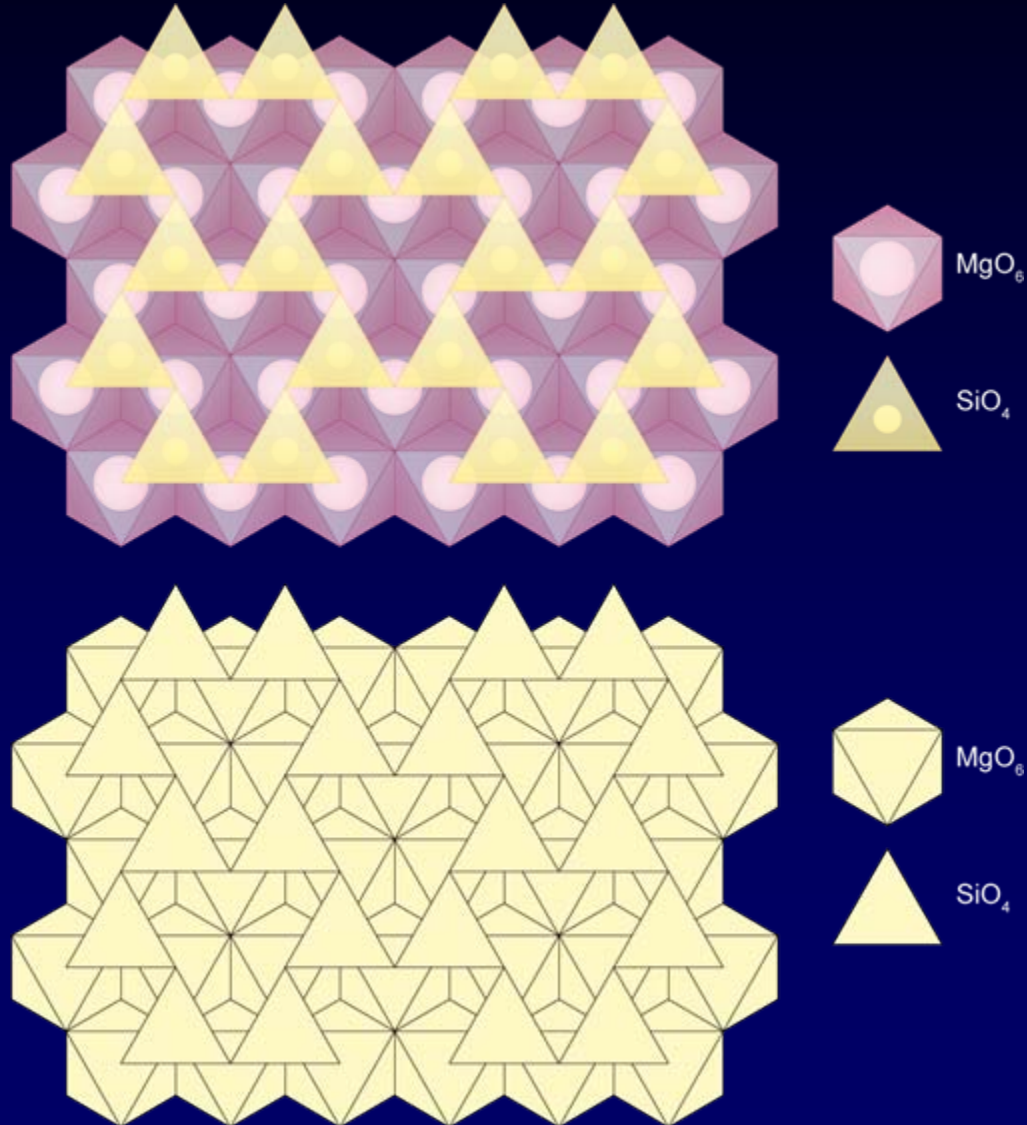


Mezi vrstvou B a C jsou obsazovány pouze tetraedrické dutiny (Si).



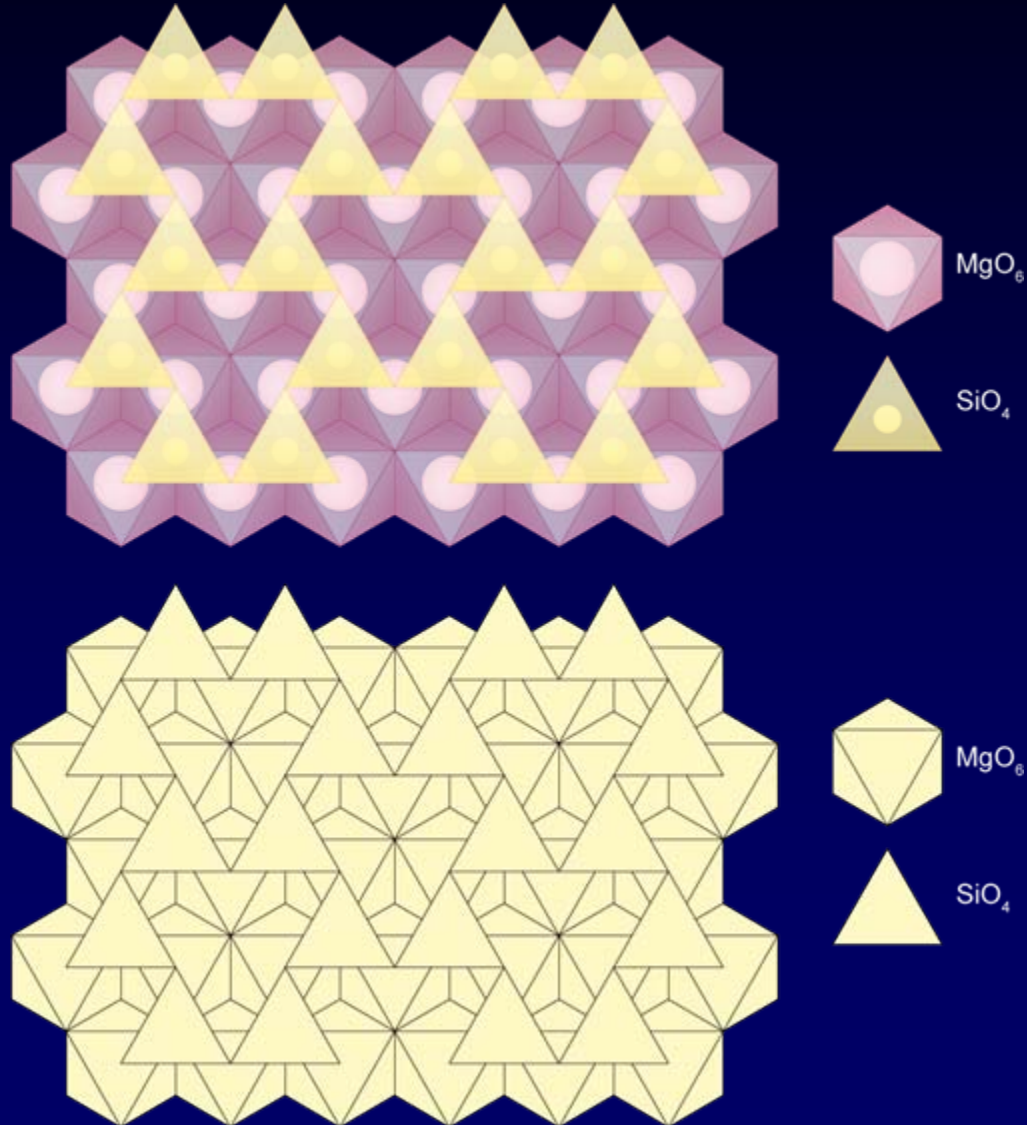
# Fylosilikáty – mastek $\text{Mg}_3(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

O4 17c



# Fylosilikáty – mastek $\text{Mg}_3(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

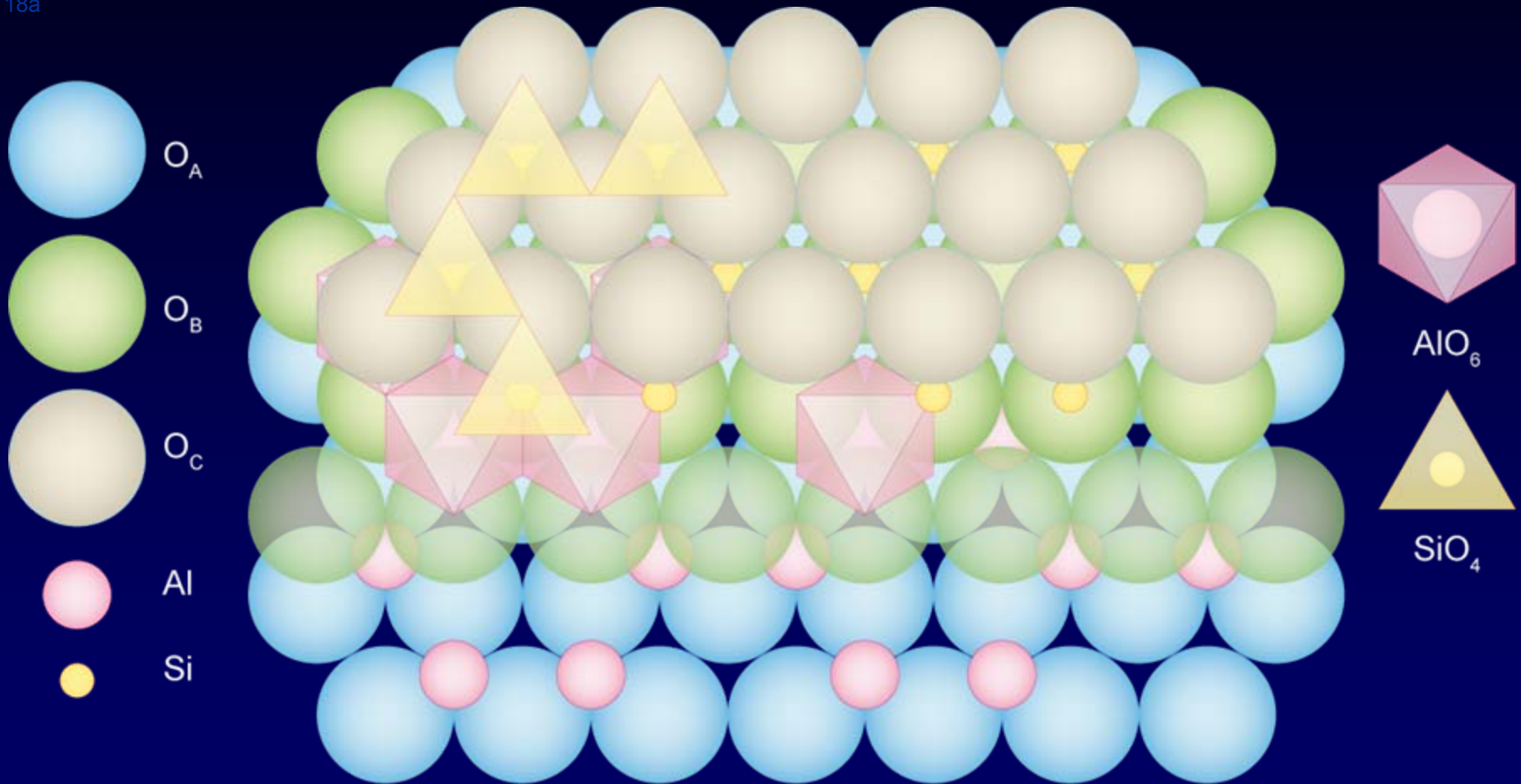
O4 17c





# Fylosilikáty – pyrofillit $\text{Al}_2(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

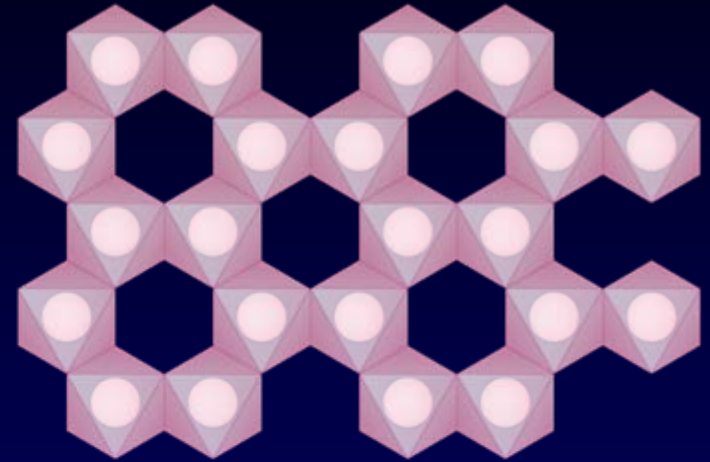
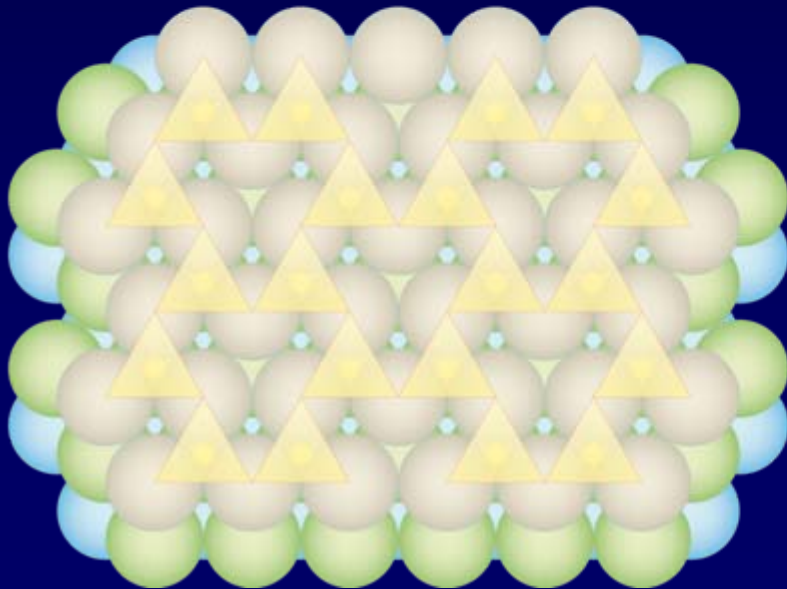
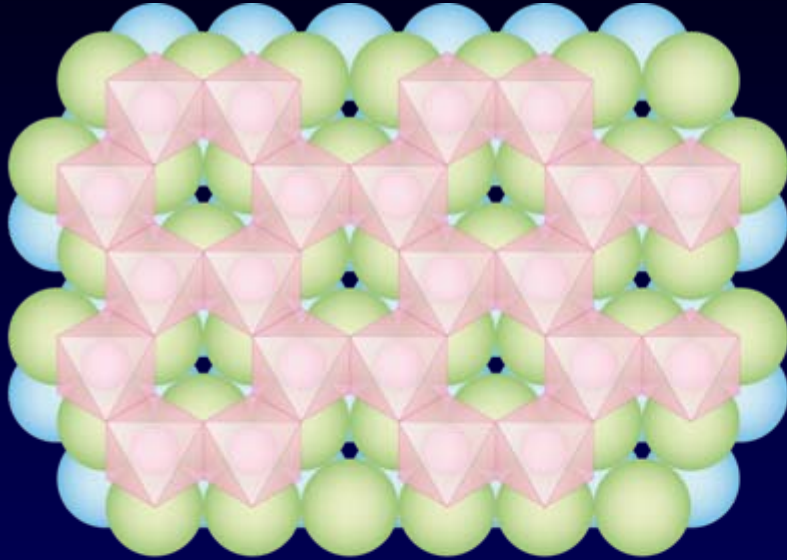
O4 18a



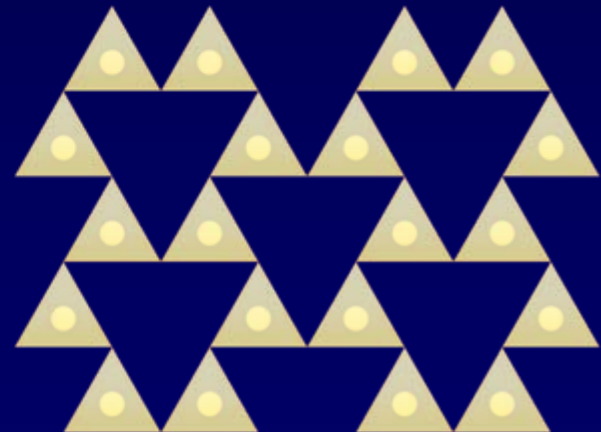
Mezi vrstvou A a B jsou obsazeny 2/3 oktaedrických dutin (Al),  
mezi vrstvou B a C jsou obsazovány pouze tetraedrické dutiny (Si).

# Fylosilikáty – pyrofillit $\text{Al}_2(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

O4 18b



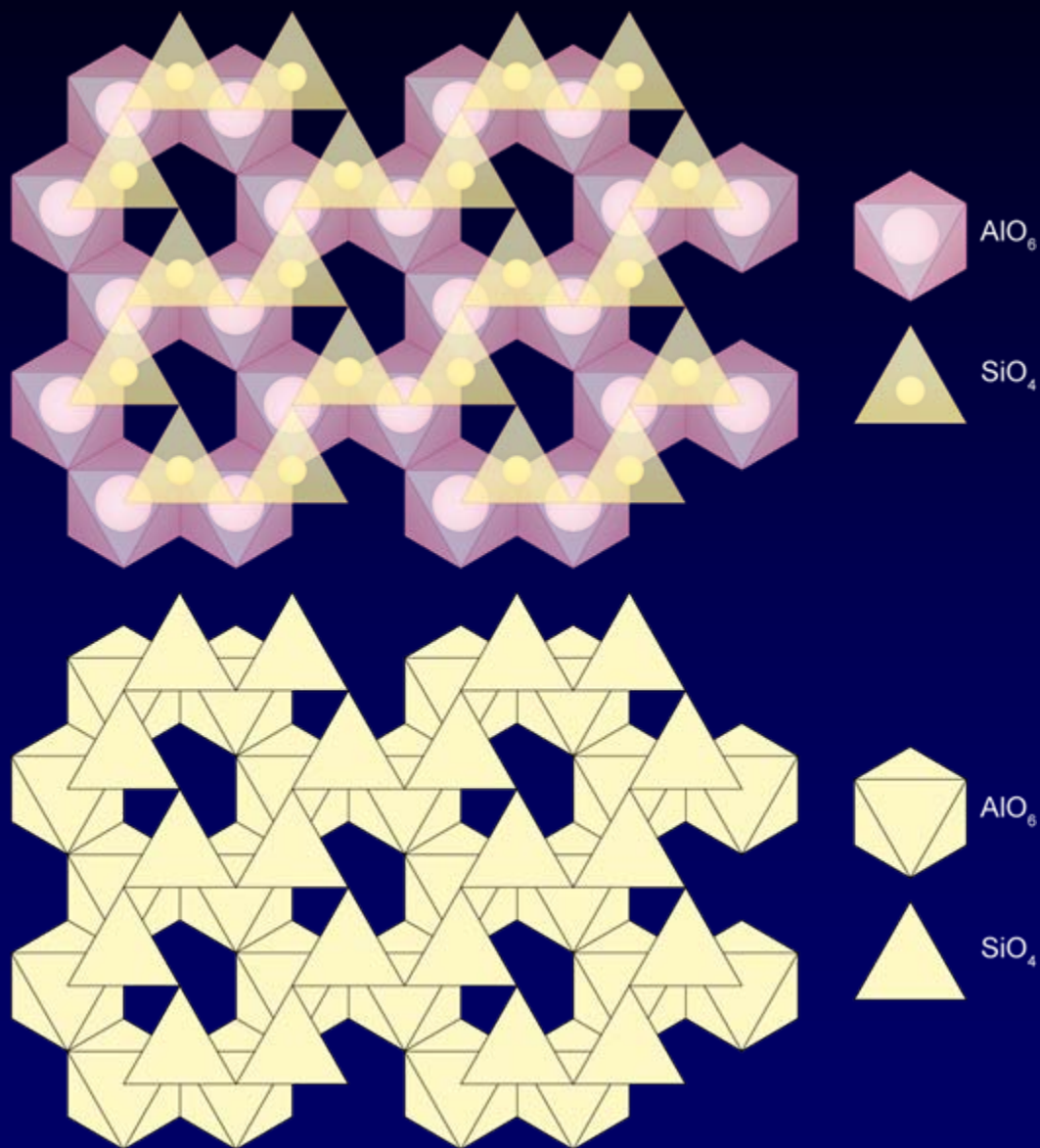
Mezi vrstvou A a B jsou obsazeny 2/3 oktaedrických dutin (Al),  
jedná se pak o dioctaedrické fylosilikáty.



Mezi vrstvou B a C jsou obsazovány pouze tetraedrické dutiny (Si).

# Fylosilikáty – pyrofillit $\text{Al}_2(\text{OH})_2\text{Si}_4\text{O}_{10}$

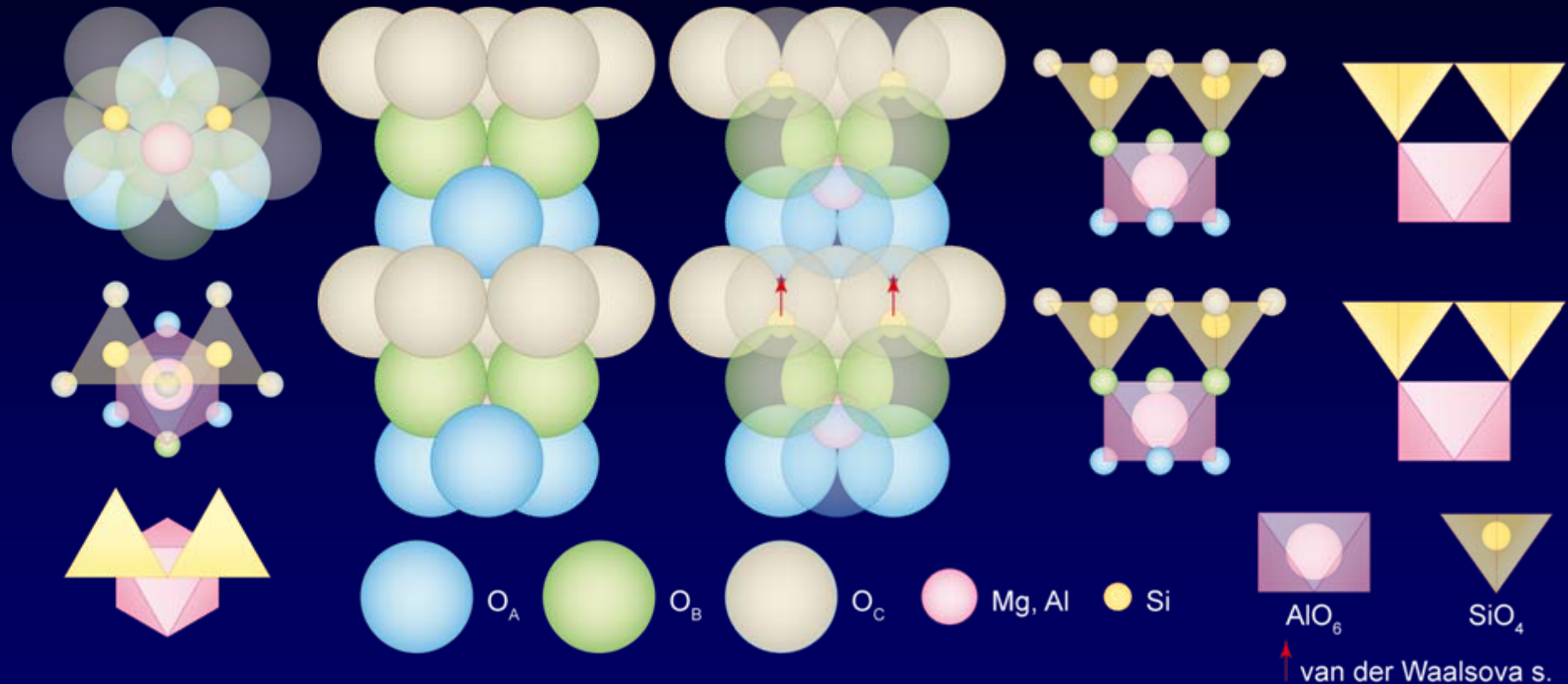
O4 18c



# Fylosilikáty

O4 19 1a

O4 19a



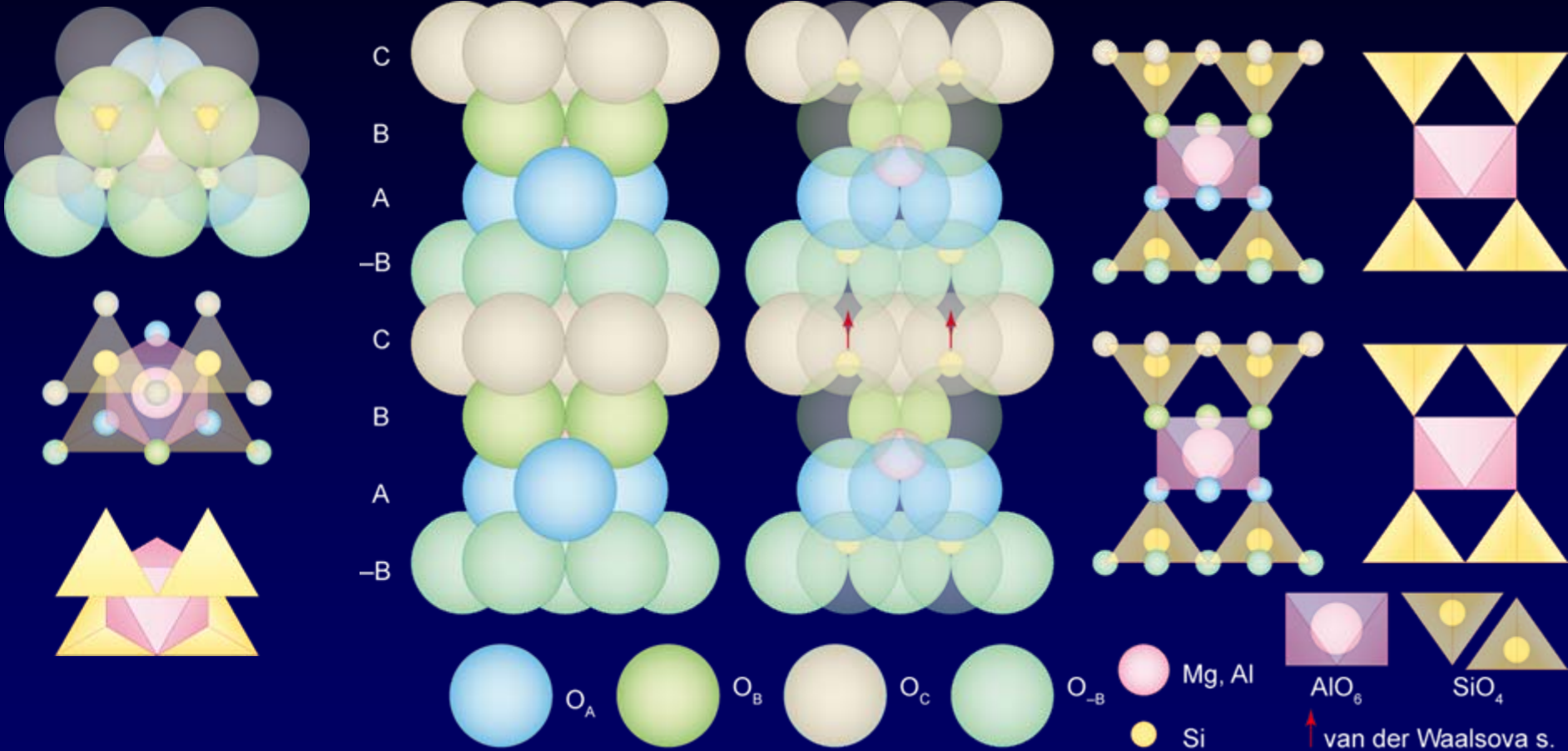
kaolinit  $Al_4(OH)_8Si_4O_{10}$  (dioktaedrický), serpentín  $Mg_6(OH)_8Si_4O_{10}$  (trioktaedrický)



# Fylosilikáty

O4 19 1b

O4 19b

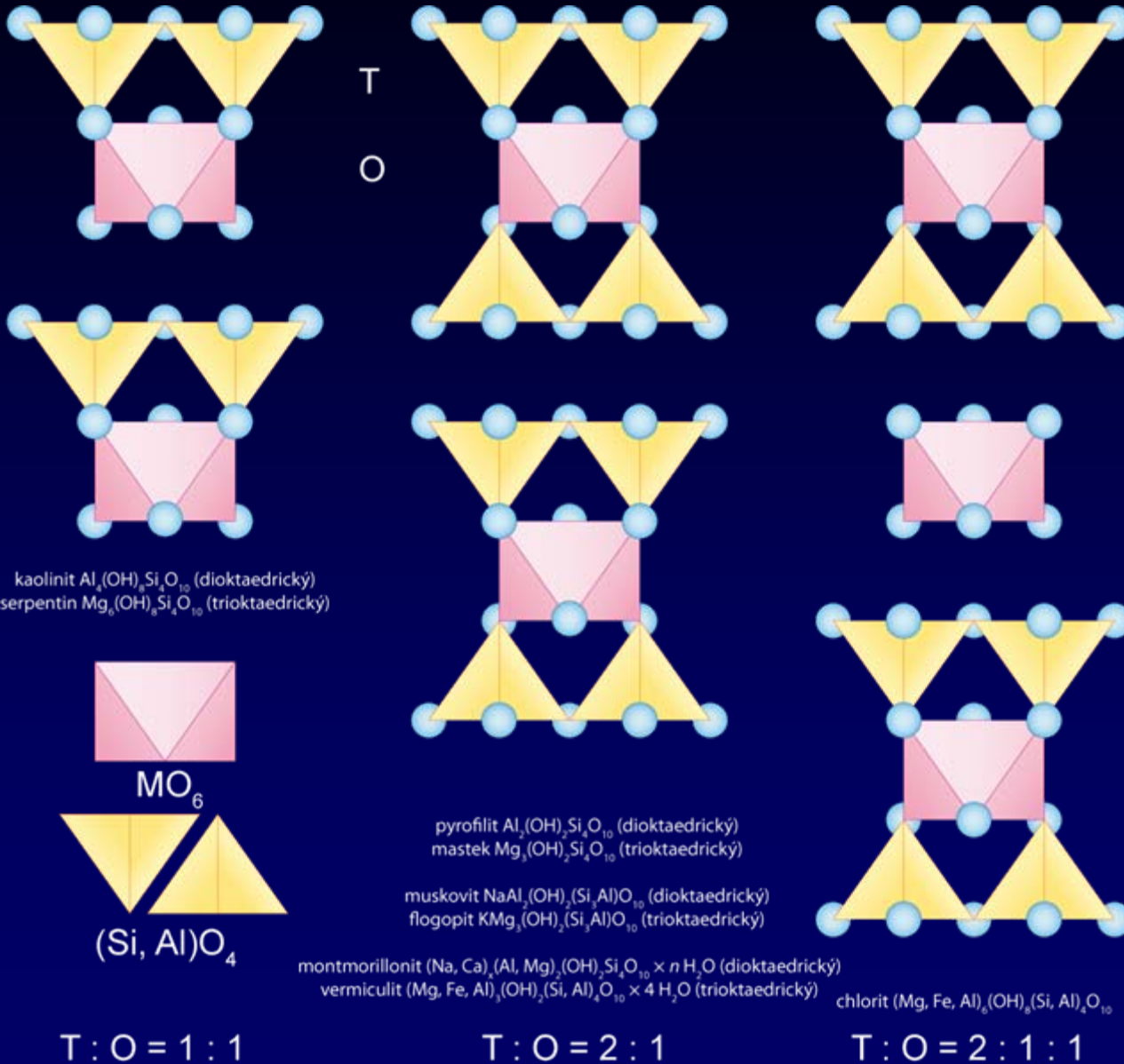


pyrofilit  $Al_2(OH)_2Si_4O_{10}$  (dioktaedrický), mastek  $Mg_3(OH)_2Si_4O_{10}$  (trioktaedrický)



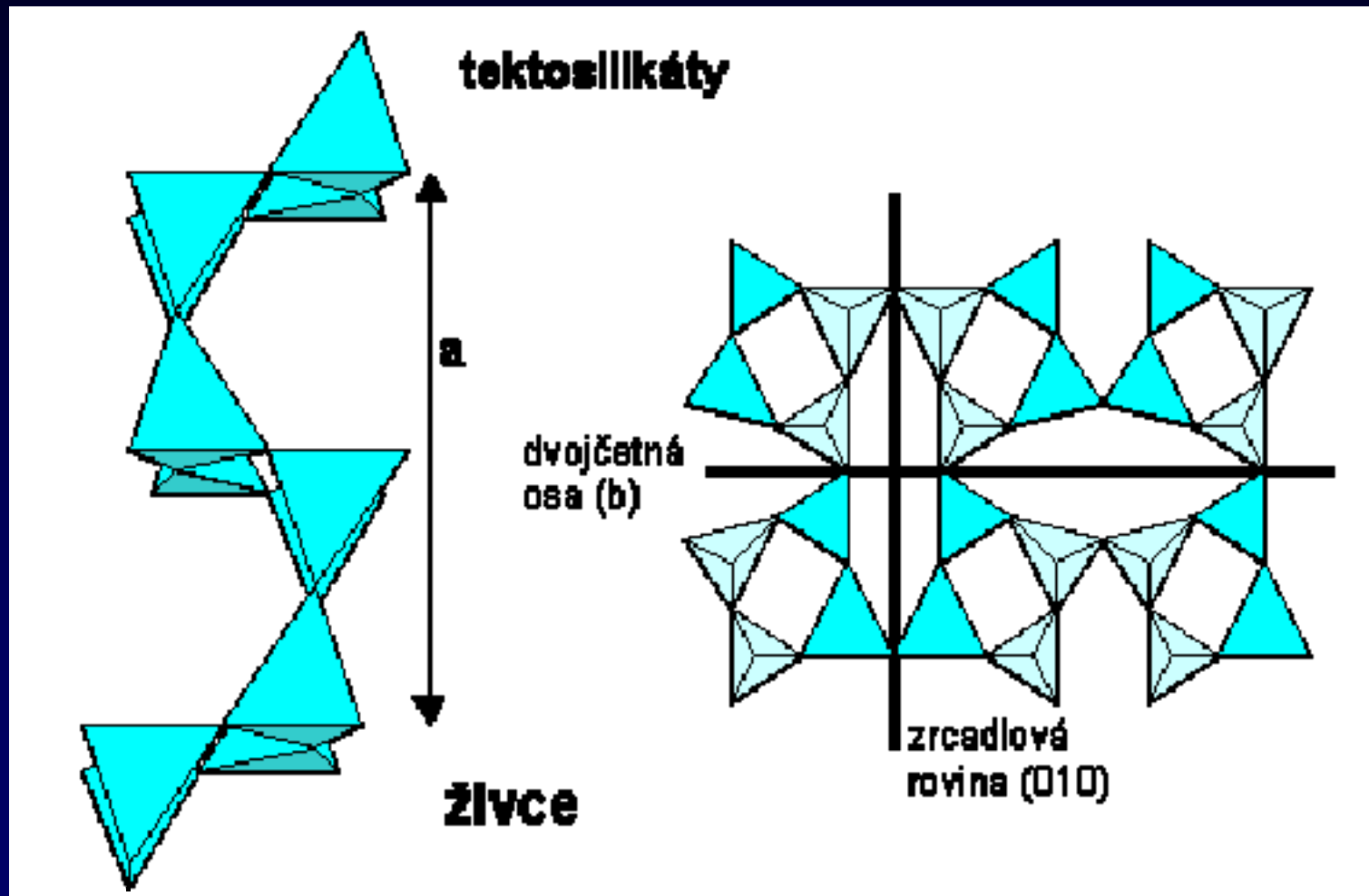
# Fylosilikáty

O4 19



# Tektosilikáty

O4 20



# Koordinační čísla

poměr $r_{\text{kat}}/r_{\text{O}2}$	koordinační číslo	koord. polyedr
1	12	středy hran krychle
0,73 – 1	8	hexaedr
0,41 – 0,73	6	oktaedr
0,22 – 0,41	4	tetraedr
0,15 – 0,22	3	uprostřed trojúhelníka

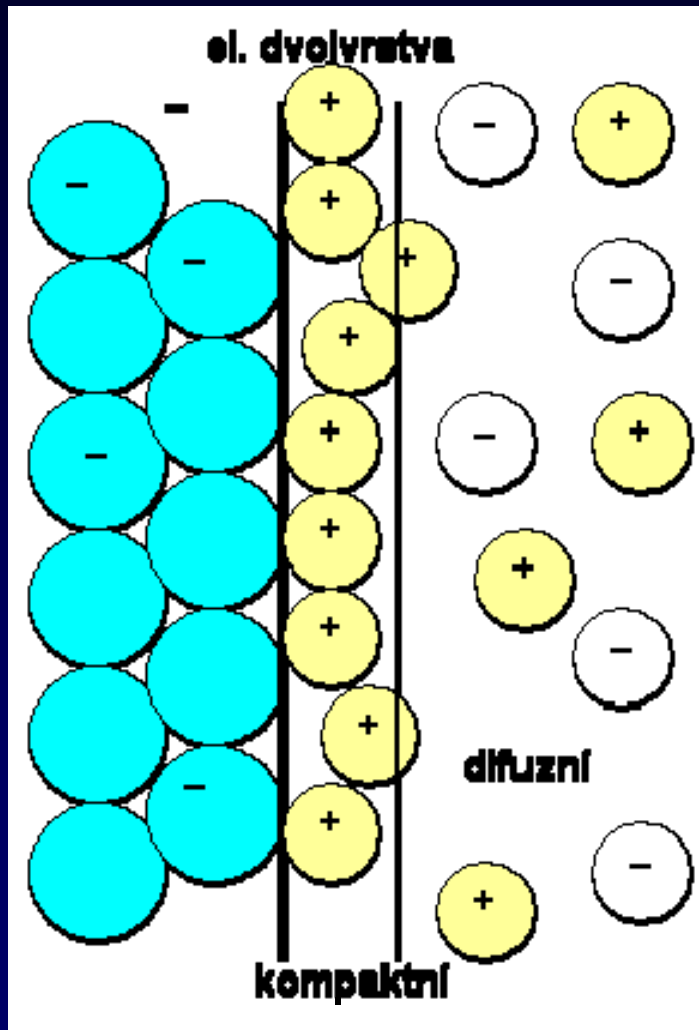
- $\text{C}^{4+}$  vždy obsazuje mezery mezi třemi kyslíky (karbonáty)
- $\text{Si}^{4+}$  obsazuje pozice v tetraedrických dutinách (může být zastoupen také  $\text{Al}^{3+}$  – alumosilikáty, výjimečně  $\text{Ti}^{4+}$  – pyroxeny, amfiboly)
- další ionty ( $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Na}^{+}$ ) obsazují oktaedrické dutiny v nejtěsnějším uspořádání kyslíků, přičemž se ve strukturách dobře zastupují (obsazují strukturálně stejné pozice):  $\text{Fe}^{3+}$ – $\text{Mg}^{2+}$ – $\text{Fe}^{2+}$ – $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ – $\text{Na}^{+}$
- $\text{K}^{+}$  obsazuje pozice kyslíků, stejně jako skupiny  $\text{OH}^{-}$

# Povrchy - dvojvrstva

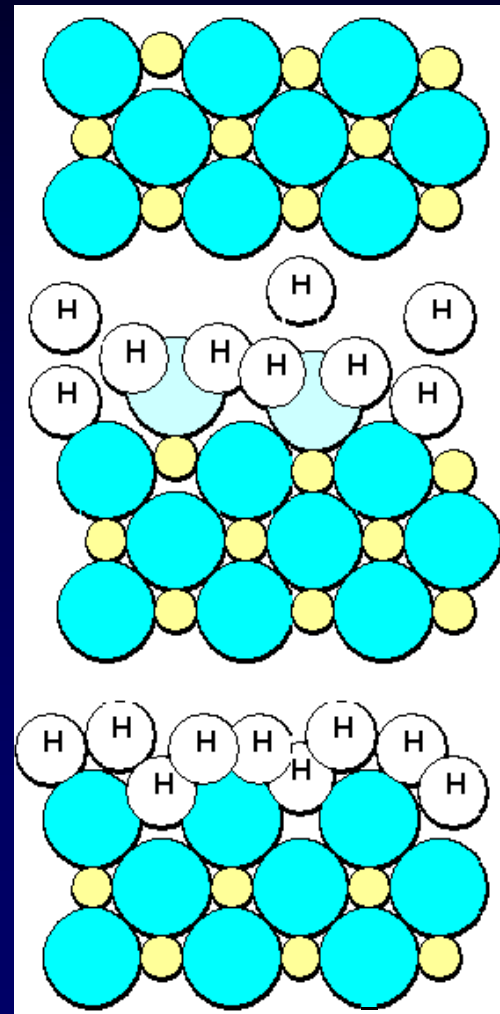
O4 21

O4 22

## Elektrická dvojvrstva



## Ionová výměna





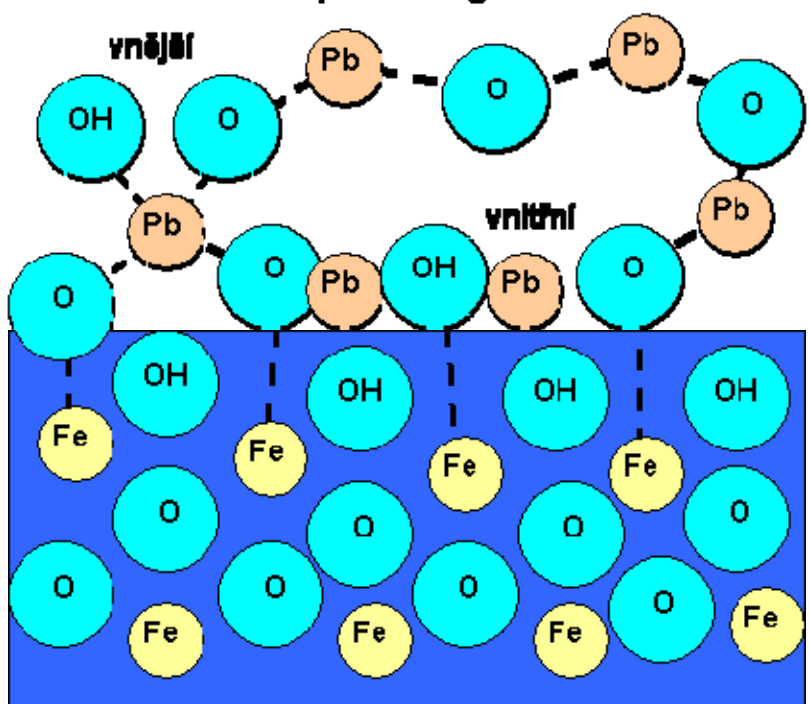
# Povrchy – sorpce

O4 23

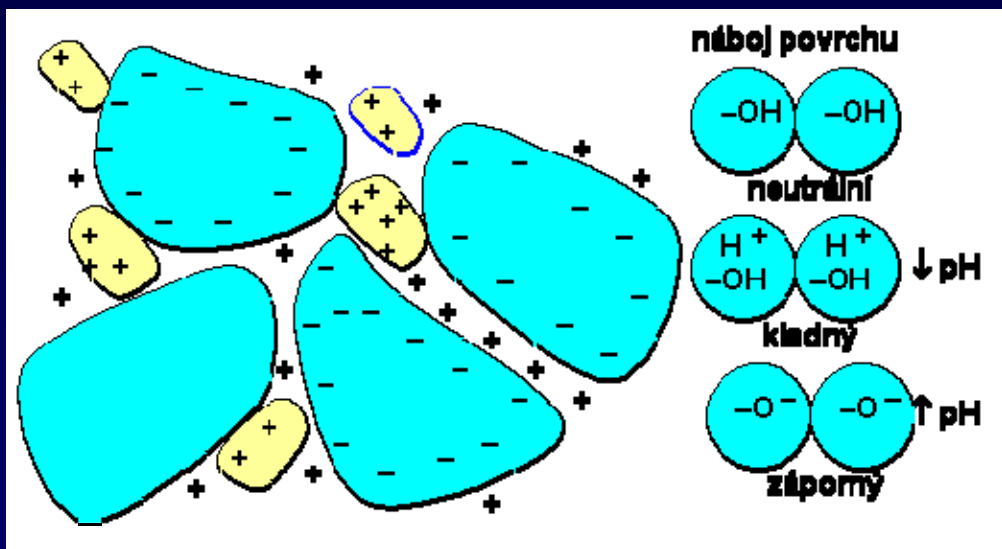
O4 24

## Sorpce

sorpce Pb na goethitu

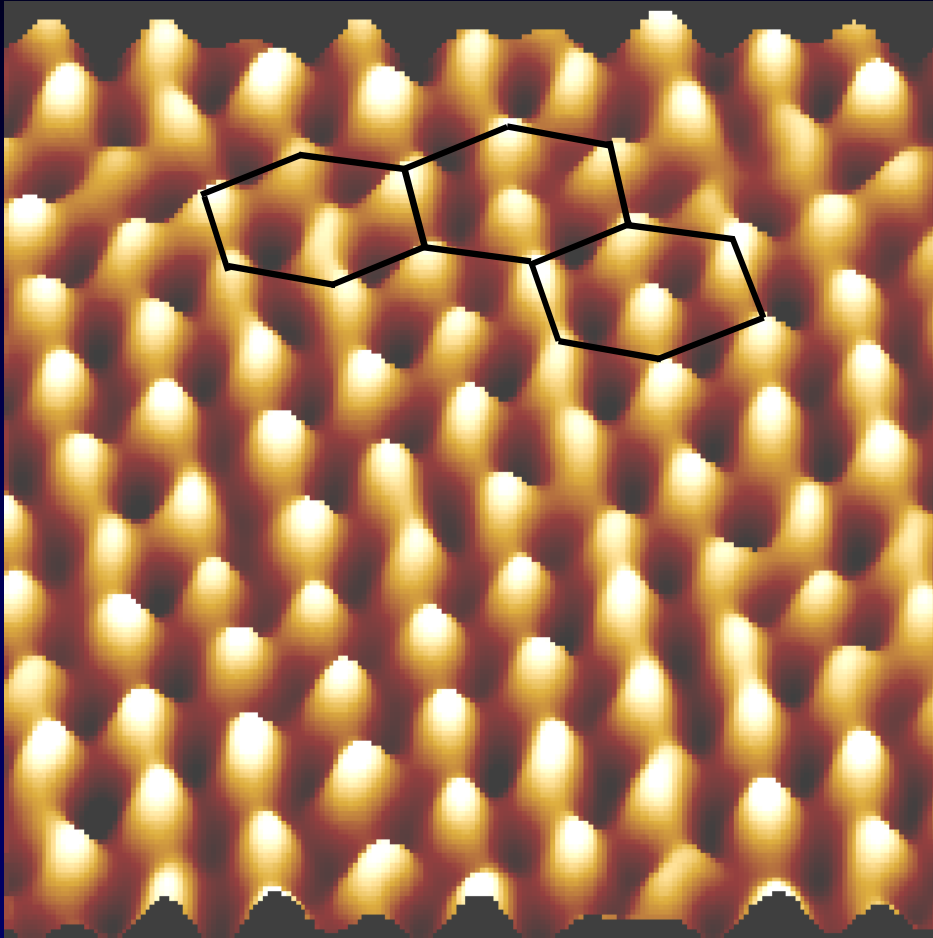


## Koloidy



# Povrchy – hustoty e STEM

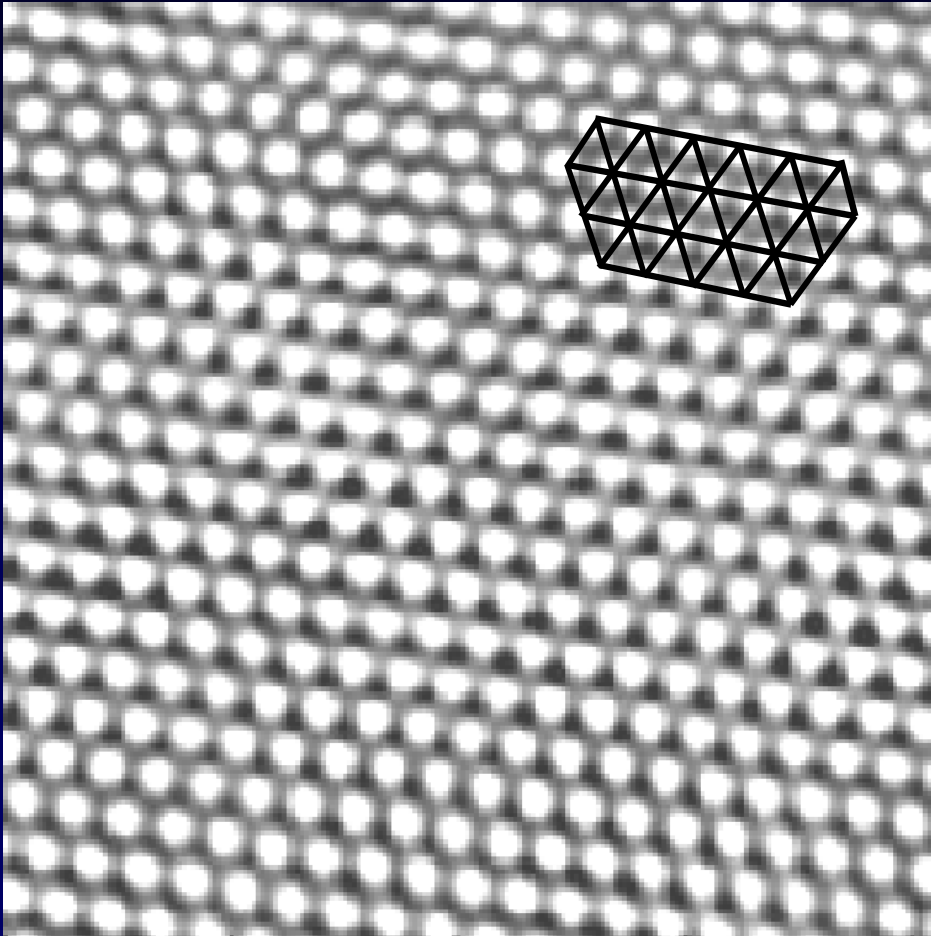
O4 25



Atomic-scale imaging of mica is one of the standard resolution tests for ambient SPMs. Even though the SPM tip is many atoms wide, atomic-scale resolution is possible due to the periodic arrangement of the atoms. Images were taken in air in constant-height mode using Microlevers. Purdue University.

# Povrchy – hustoty e STEM

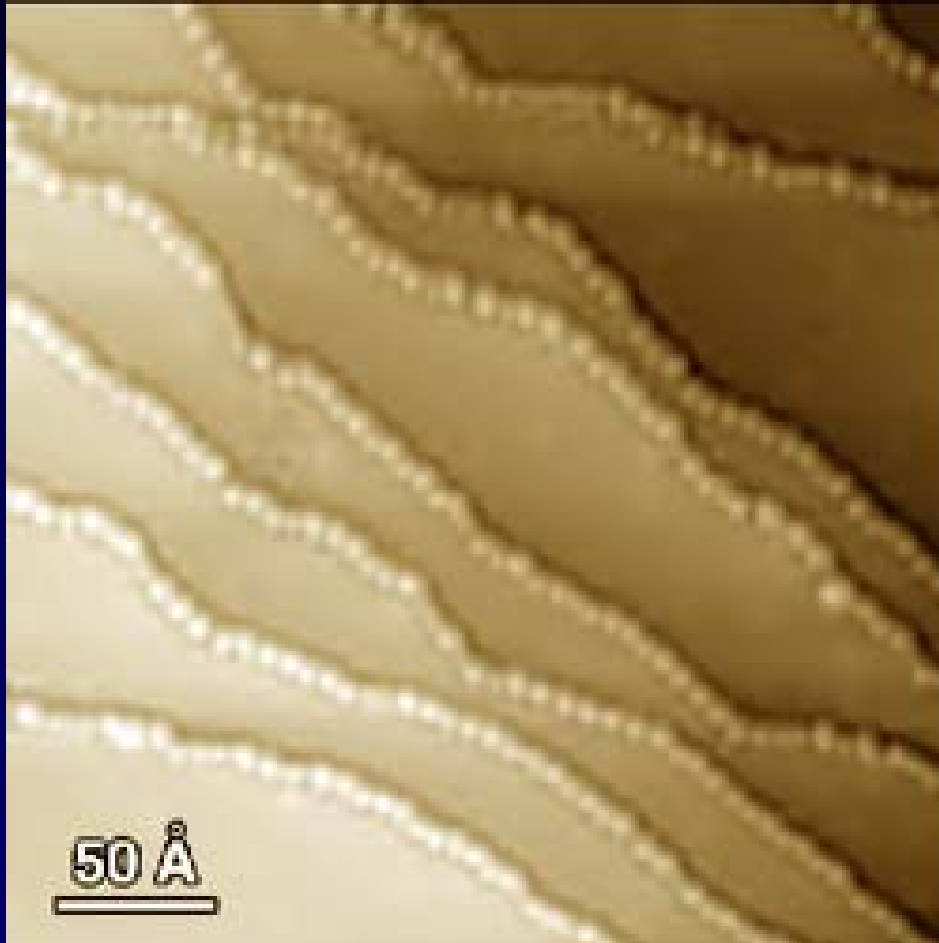
O4 26



Freshly cleaved mica was attached to a standard microscope slide by double-sided adhesive and mounted onto a standard BioScope sample stage atop a Zeiss Axiovert 135 inverted optical microscope. The mica was imaged in contact mode using standard 450 $\mu$ m long, single arm, etched silicon probes. Shown is a deflection image taken at a scan rate of 24.4Hz with integral gain set to 0.665 and proportional gain set to 0.176. Purdue University.

# Povrchy – sorpce STEM

04 27



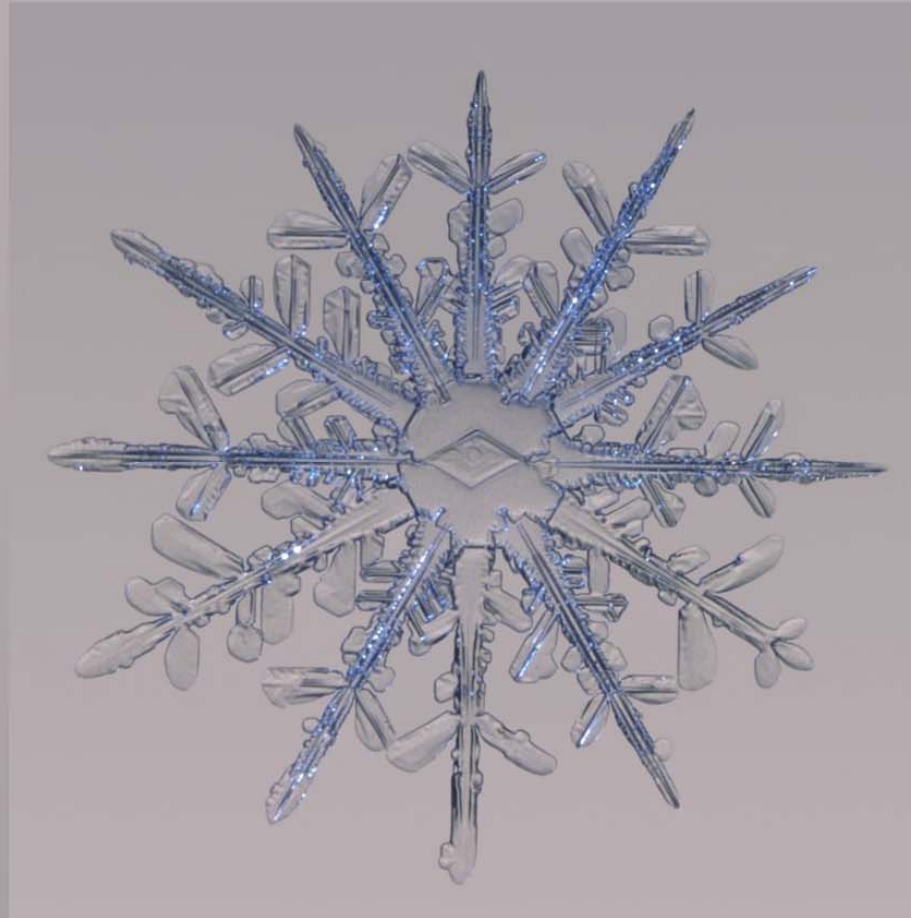
STM image of cyclopentene molecules on Ag(111) surface. It has long been thought that inhomogeneities such as defects and/or steps on metal surfaces act as sites for preferential chemical reactivity. This image shows a silver surface which has been exposed to cyclopentene. The cyclopentene molecules clearly adsorb almost exclusively along specific lines. These lines coincide with the locations of steps on the underlying silver surface. In this image, each round ball is a single cyclopentene molecules (Copyright R.J. Hamers and X. Chen).



# Sněhová vločka



# Sněhová vločka



# Sněhová vločka

