

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 vylučnosti – 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

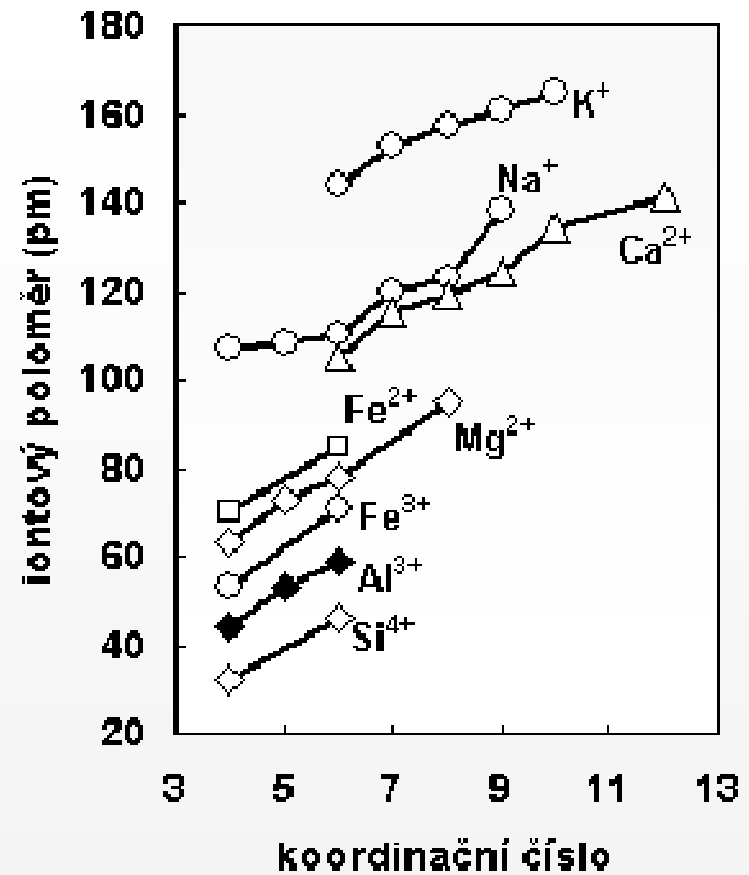
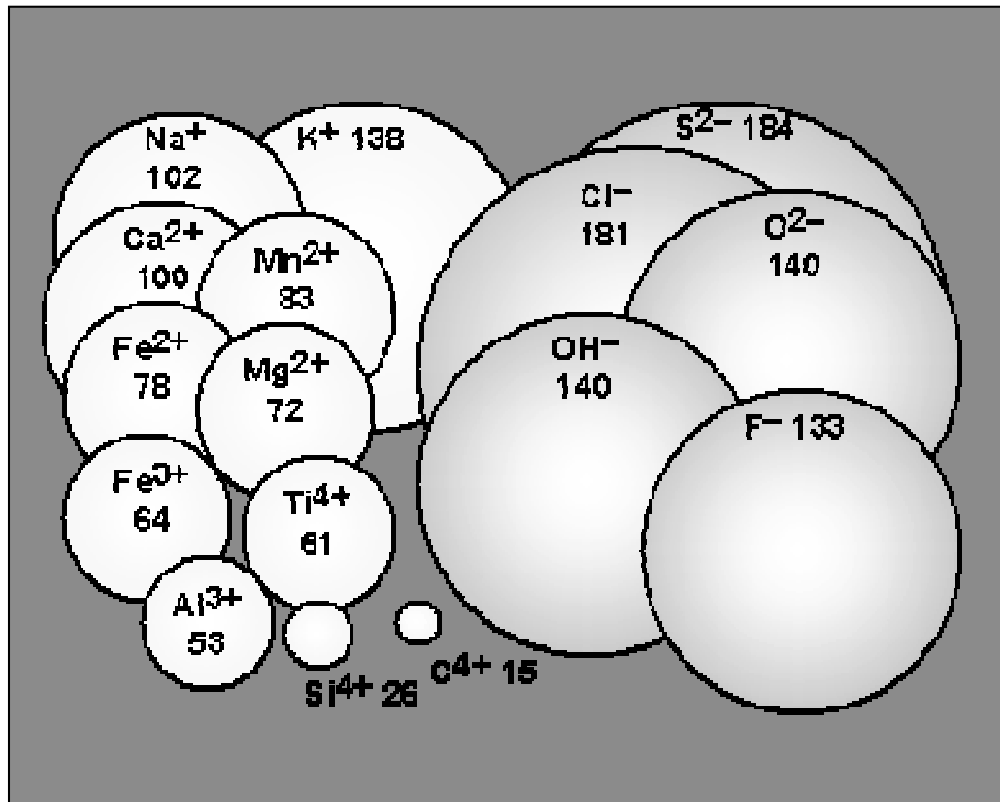
U neutrálních atomů závisí jejich poloměr na atomovém čísle, tedy na počtu elektronů v elektronovém obalu atomu.

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

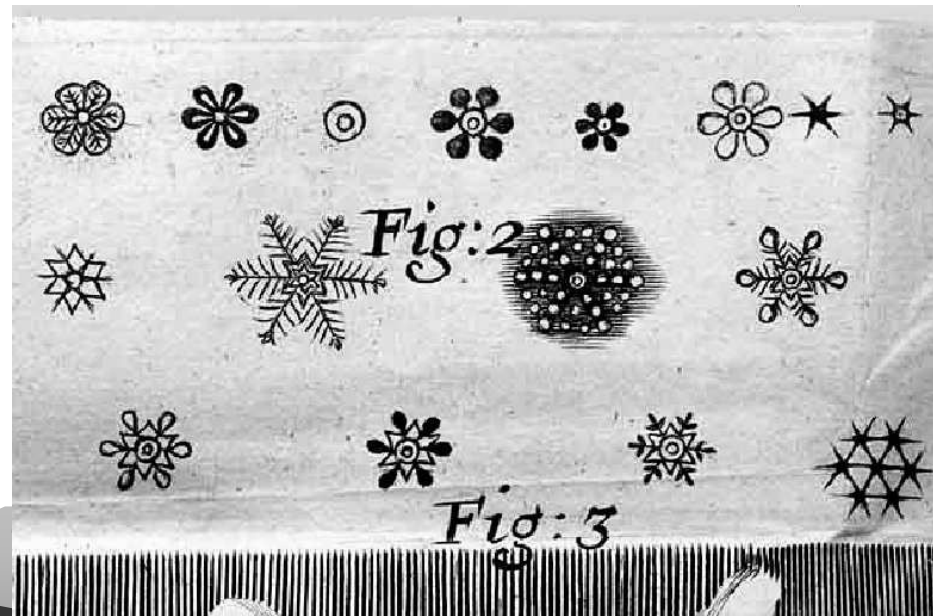
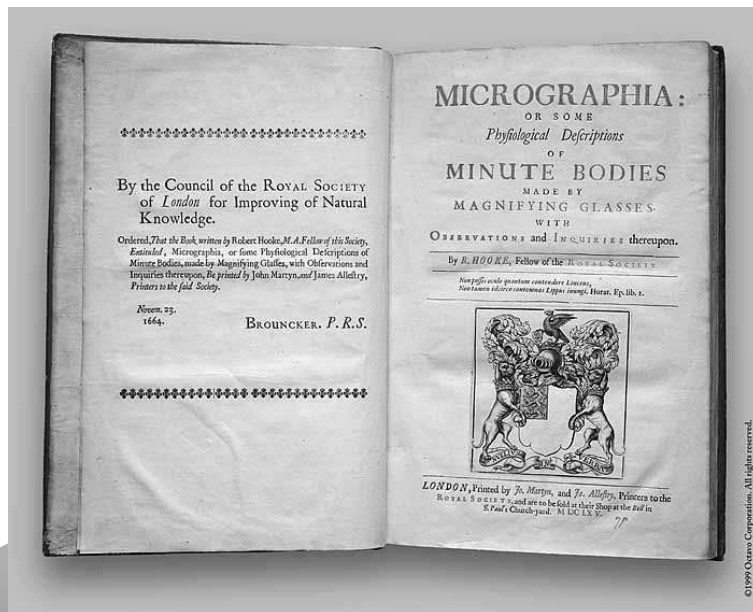


Základy výstavby struktur

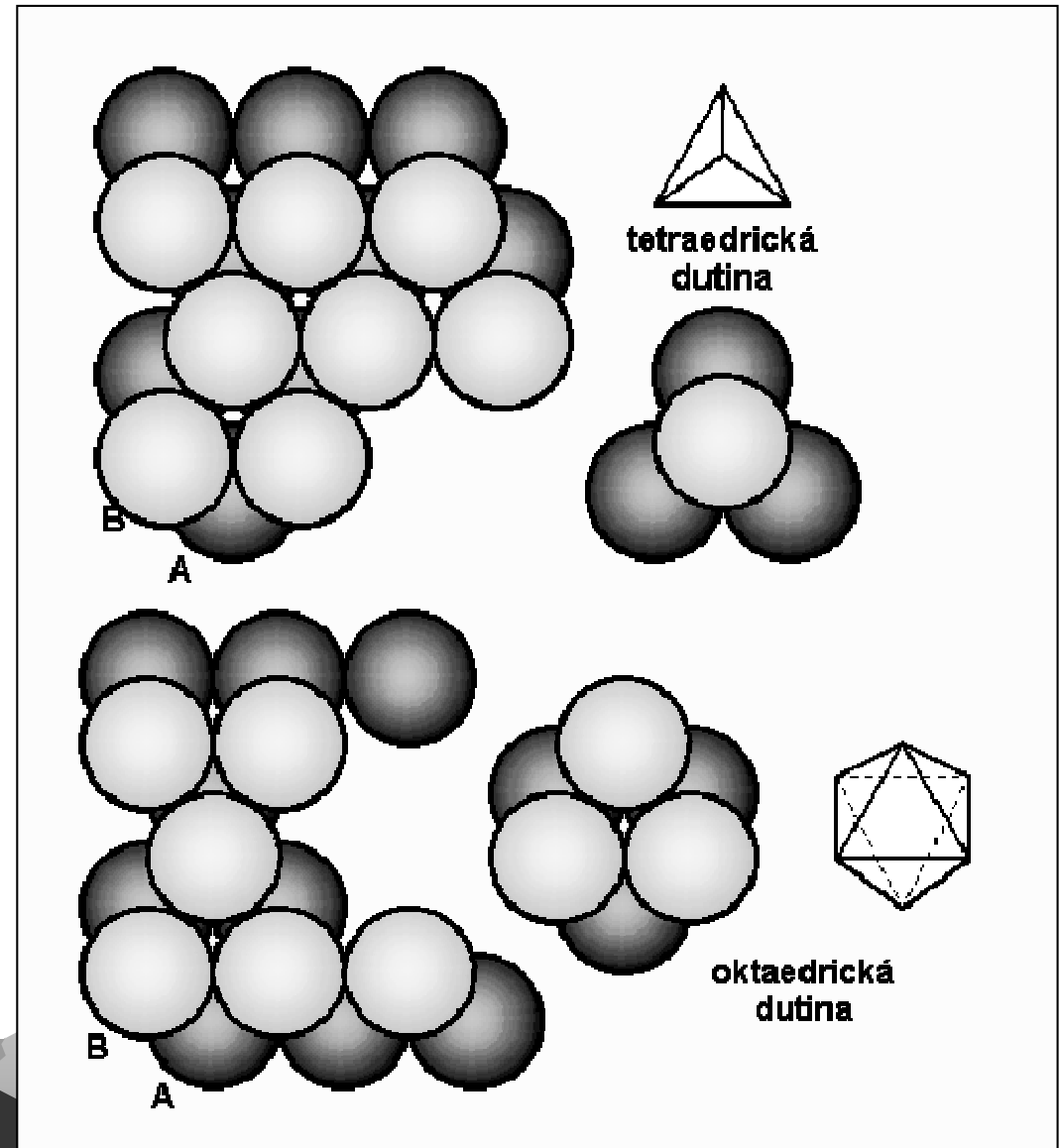
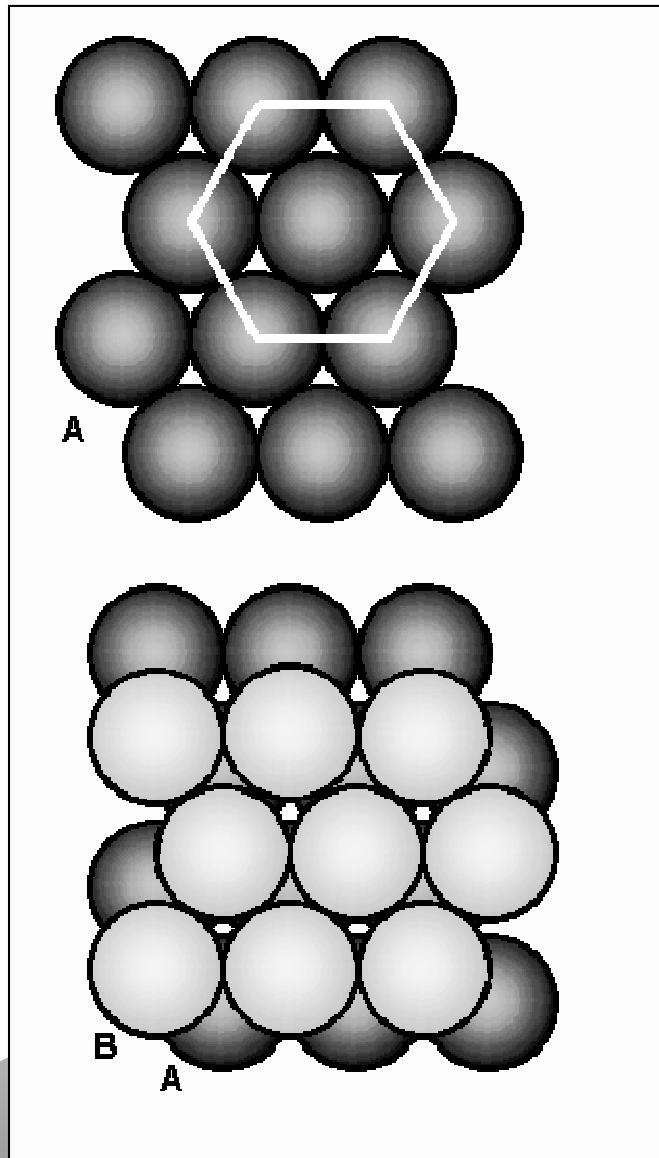
Když se Robert Hook v roce 1665 zamýšlel nad podstatou pravidelných tvarů krystalů, došel k závěru, že je to důsledek pravidelného ukládání malých kulových částic:

„[...] 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 částečky dobře dohromady.“

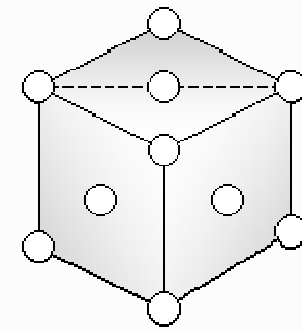
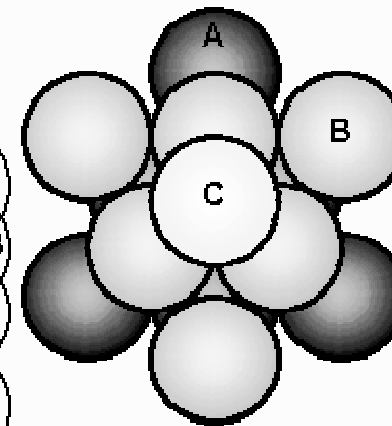
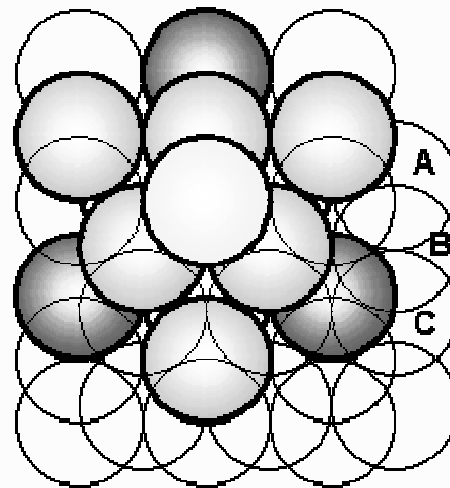
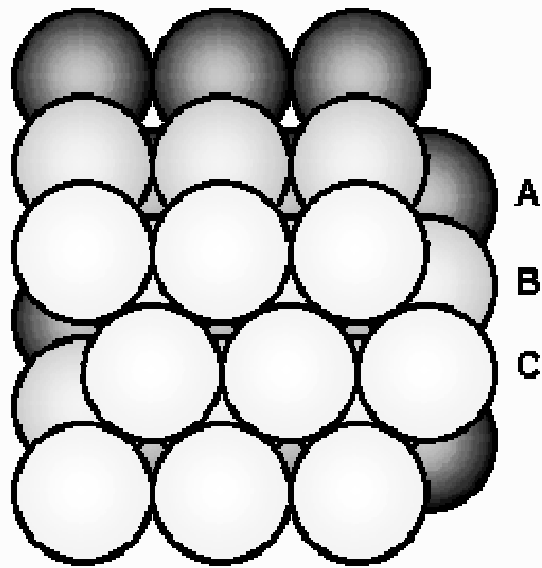
Hook Robert (1665): *Micrographia, or Some physiological Description of Minute Bodies made by Magnifying glasses with observations and Inquiries thereupon*. Jo. Martyn and Ja. Allestry, London.



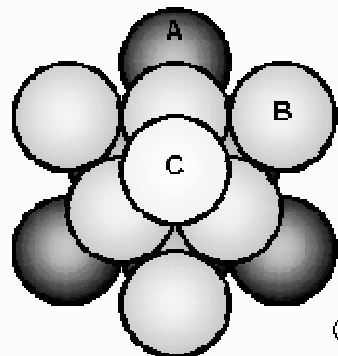
Uspořádání - I



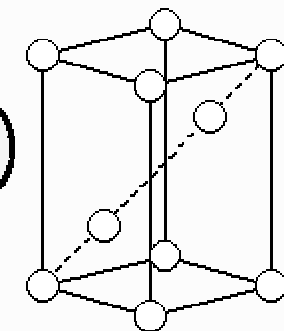
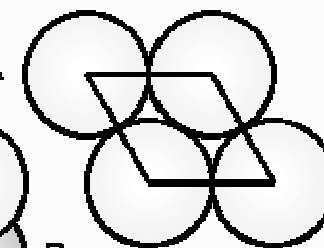
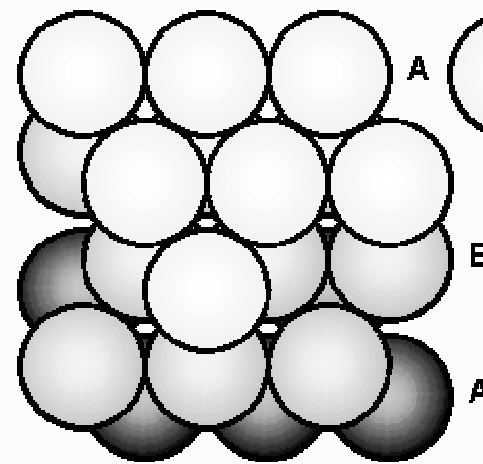
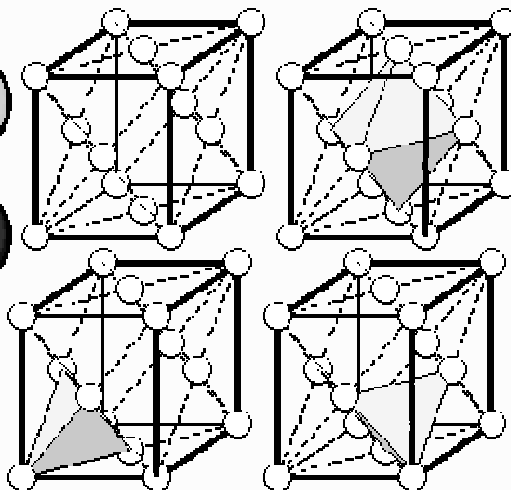
Uspořádání - II



kubická pl. centrovaná



kubická pl. centrovaná

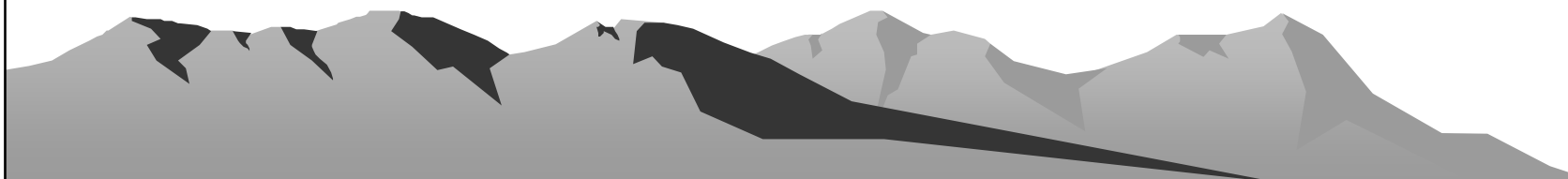
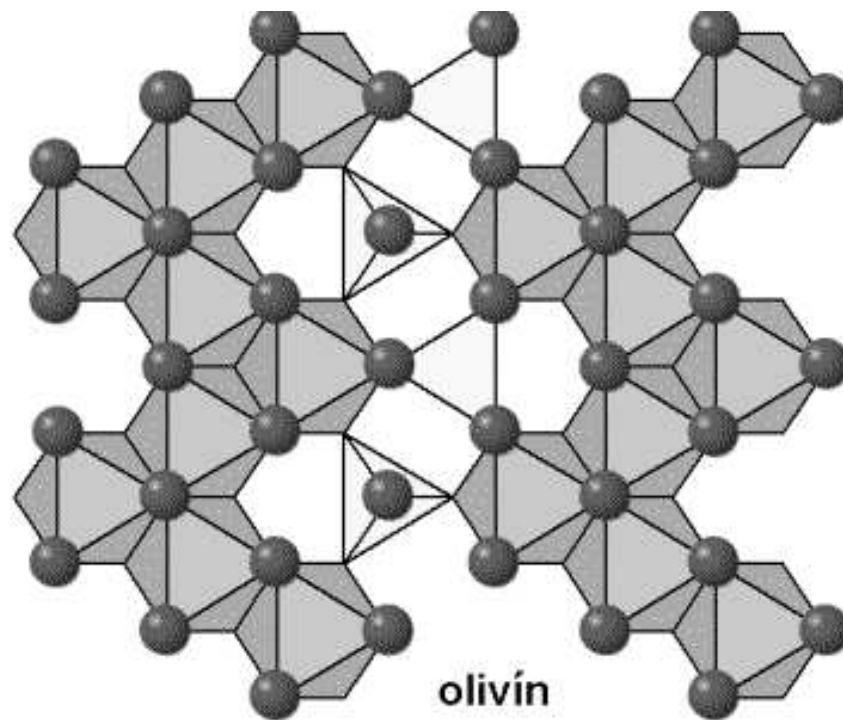
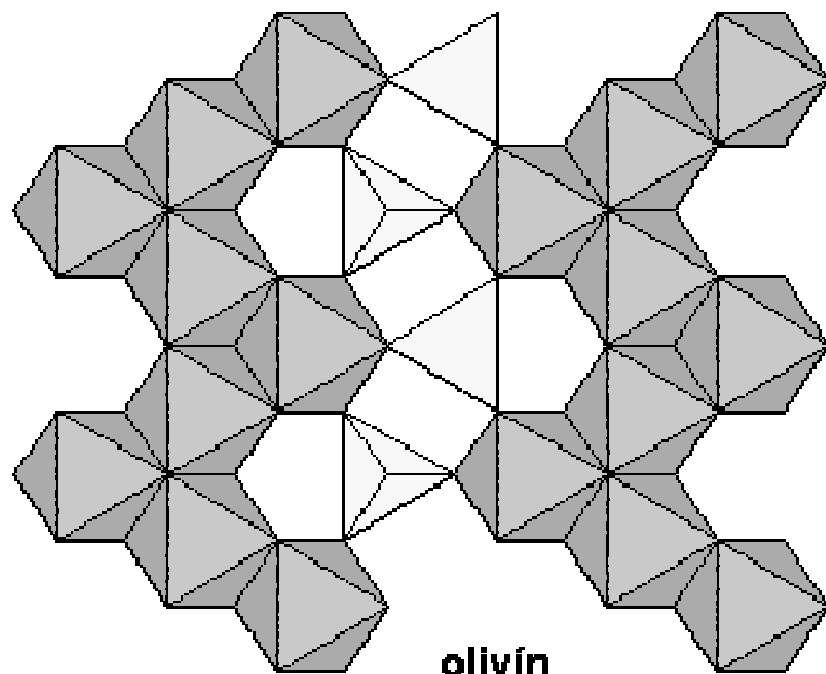


hexagonální

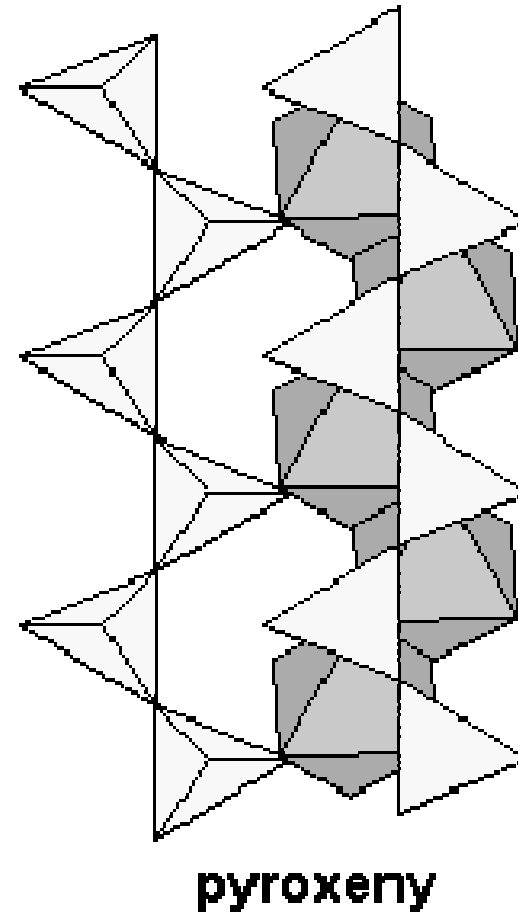
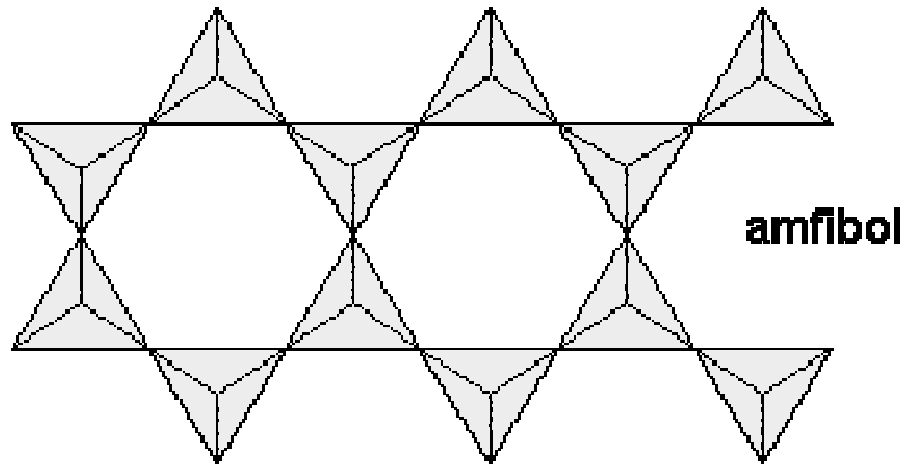
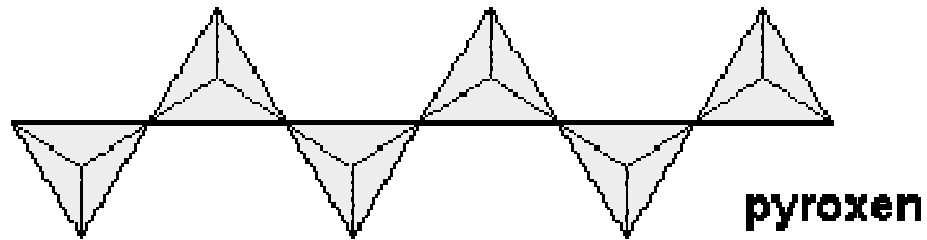
Uspořádání - III

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

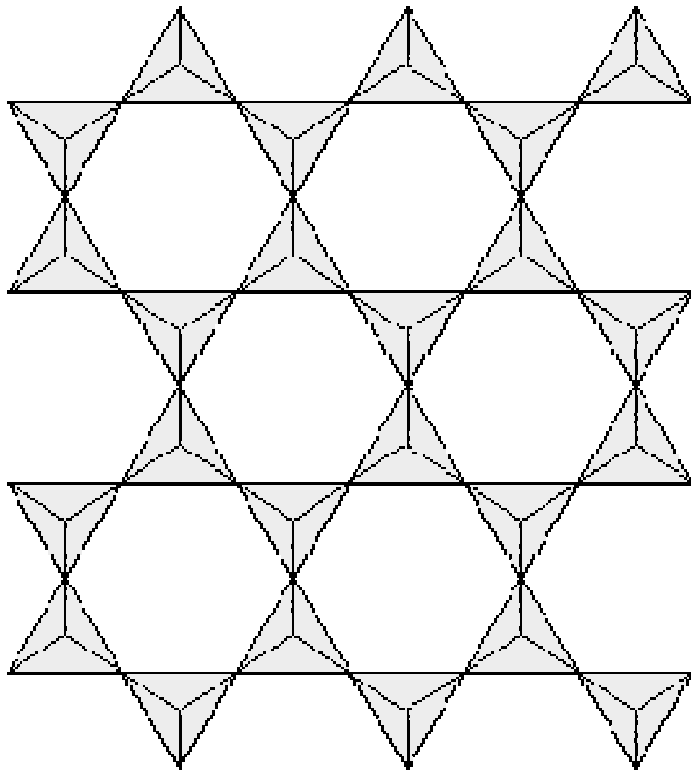
Olivín



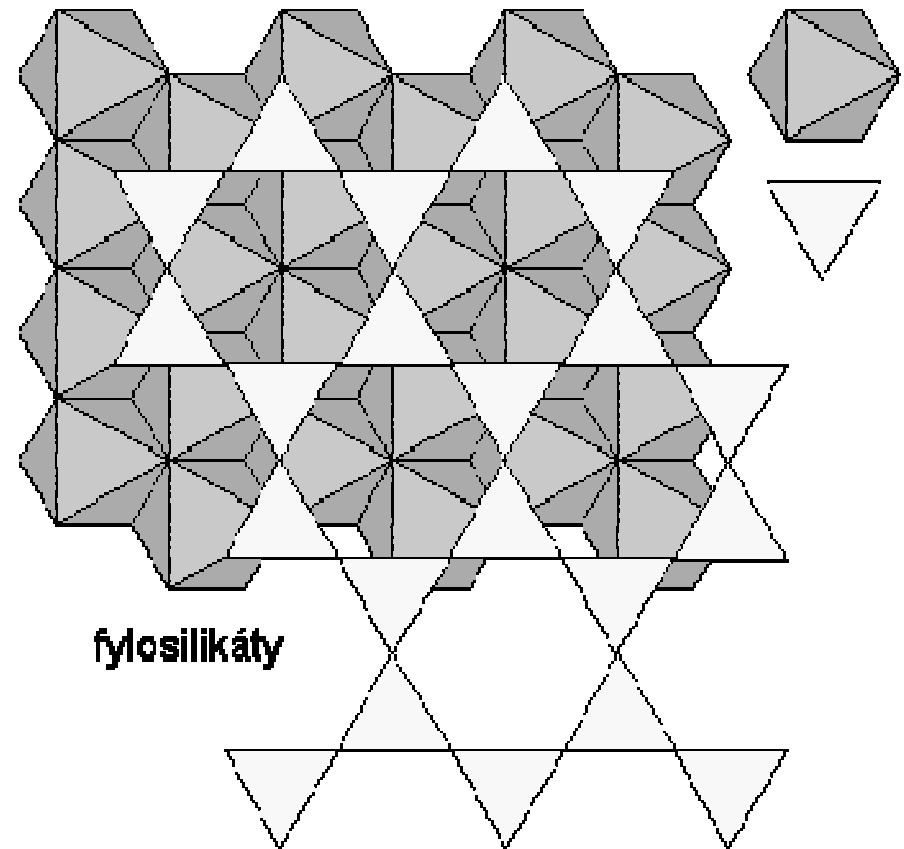
Pyroxeny a amfiboly



Fylosilikáty - princíp



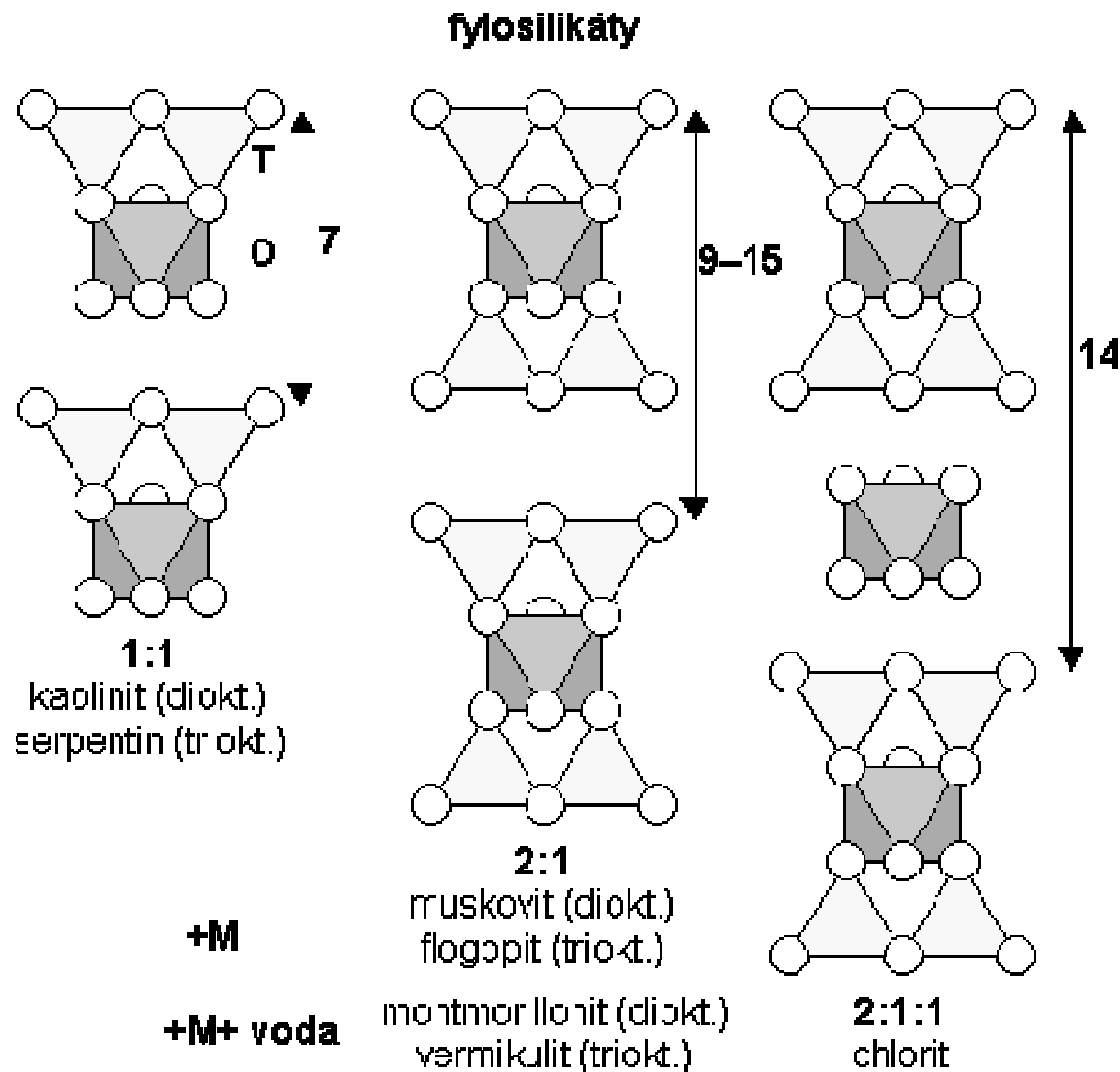
fylosilikát



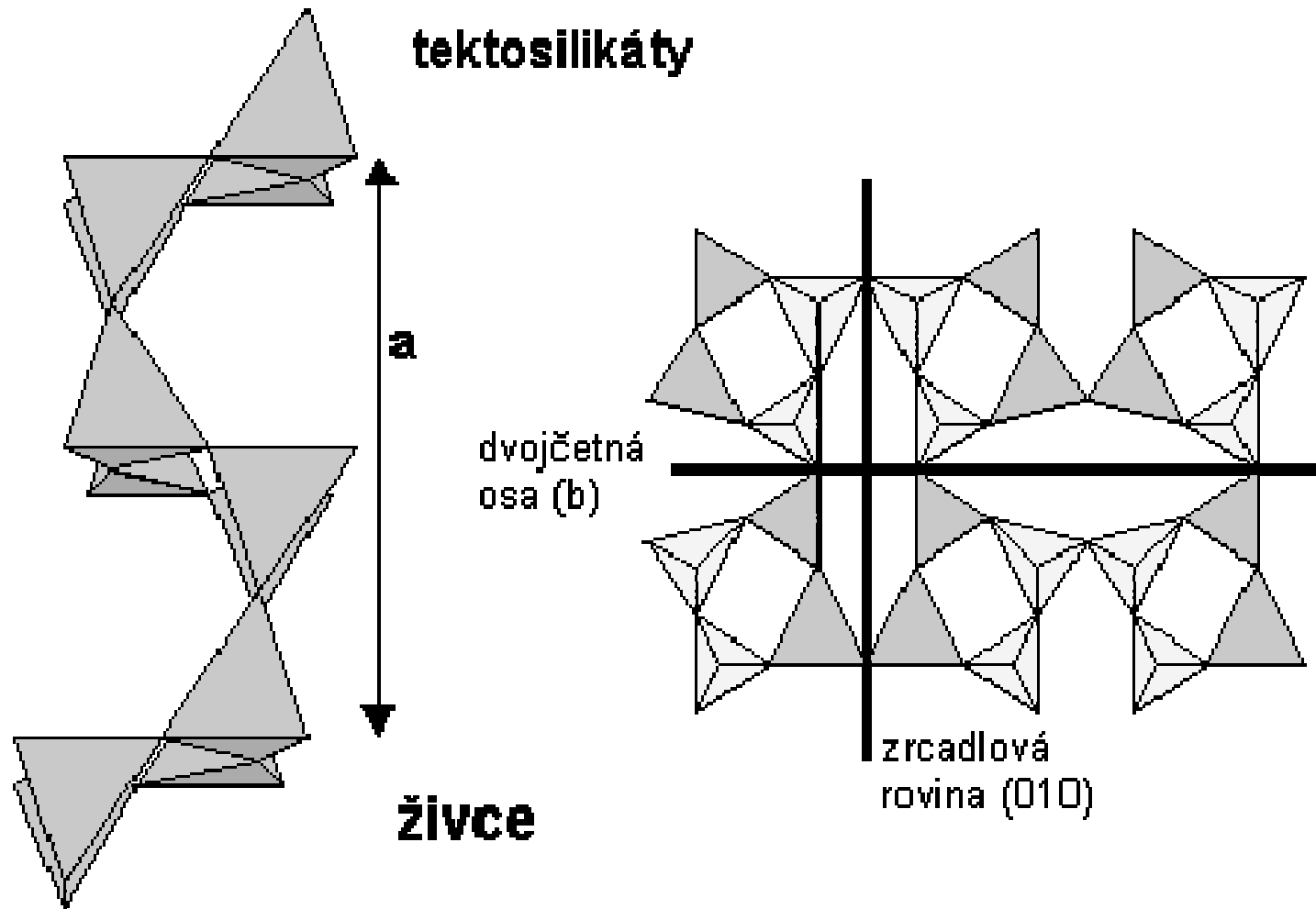
fylosilikáty



Fylosilikáty



Tektosilikáty



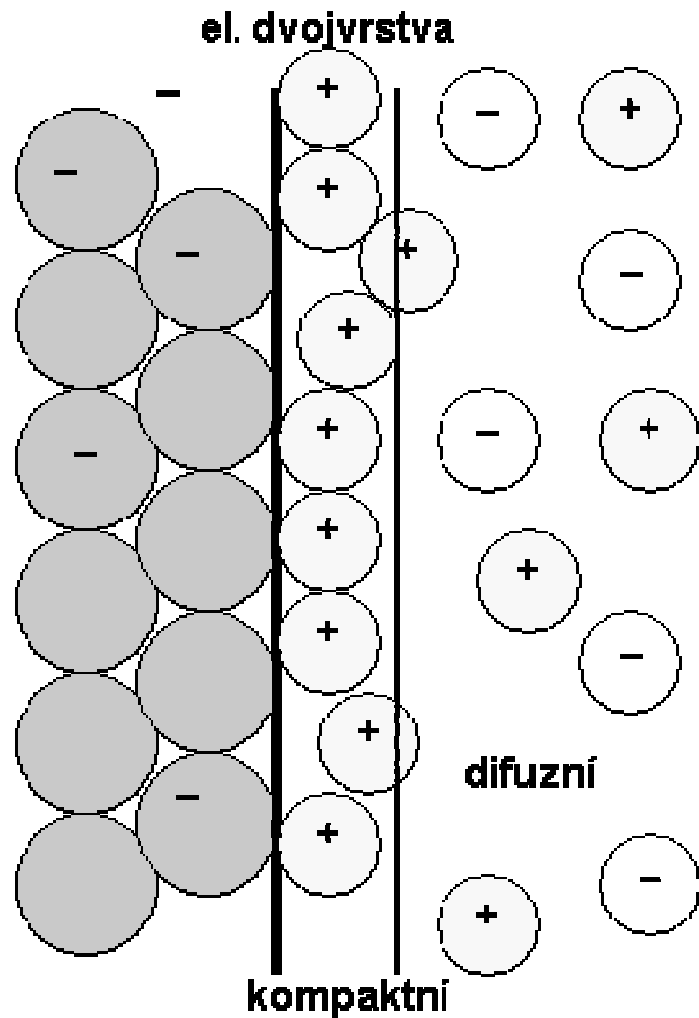
Koordinační čísla

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

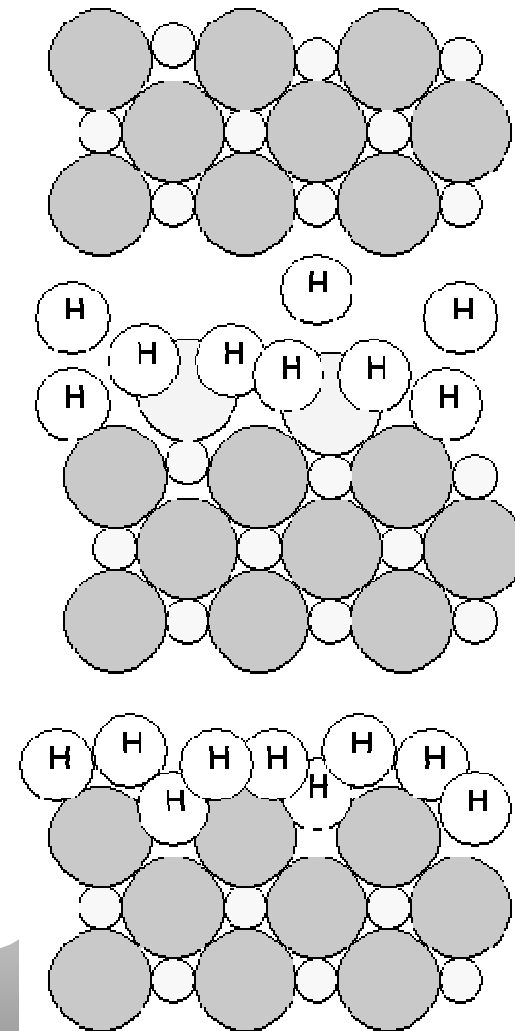
- C^{4+} vždy obsazuje mezery mezi třemi kyslíky (karbonáty)
- Si^{4+} obsazuje pozice v tetraedrických dutinách (může být zastoupen také Al^{3+} – alumosilikáty, výjimečně Ti^{4+} – pyroxeny, amfiboly)
- další ionty (Fe^{3+} , Mg^{2+} , Fe^{2+} , Mn^{2+} , Ca^{2+} , Na^{+}) obsazují oktaedrické dutiny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

Povrchy - dvojvrstva

Elektrická dvojvrstva



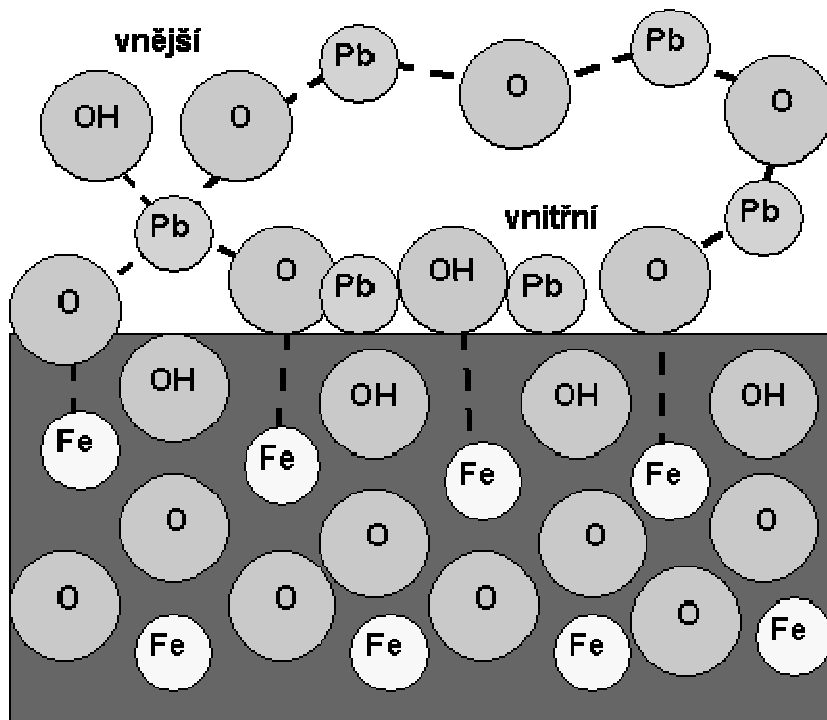
Iontová výměna



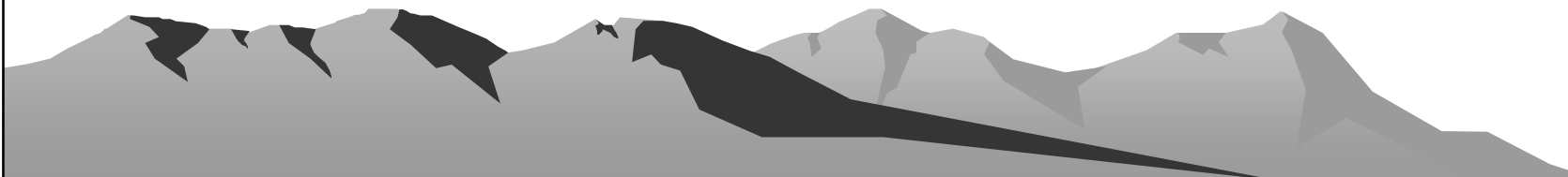
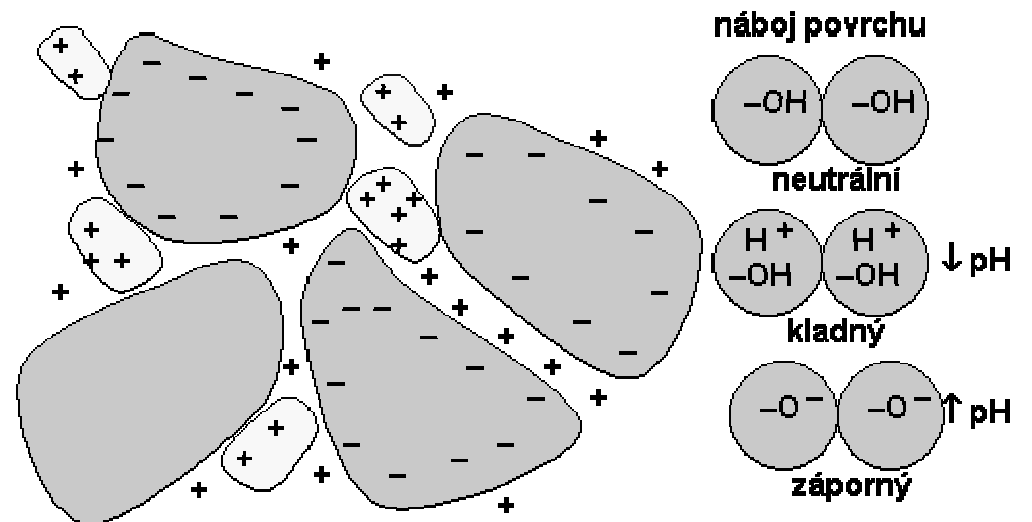
Povrchy – sorpce

Sorpce

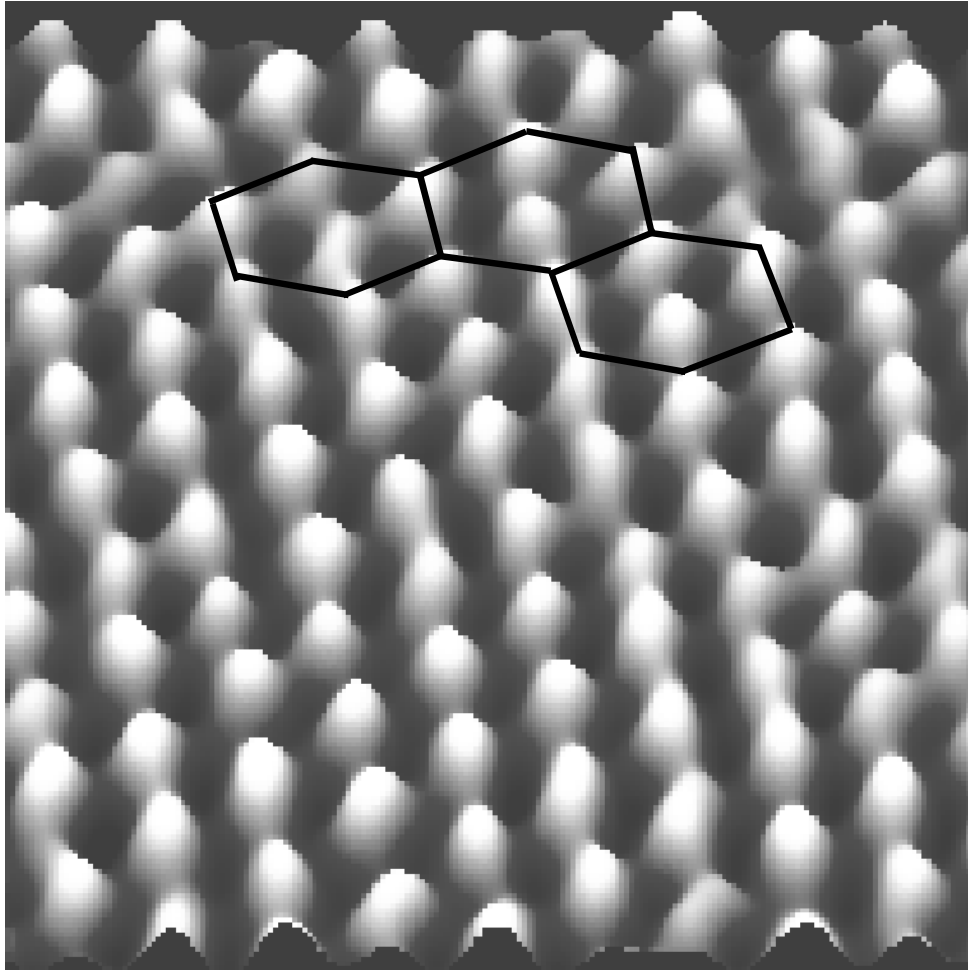
sorpce Pb na goethitu



Koloidy



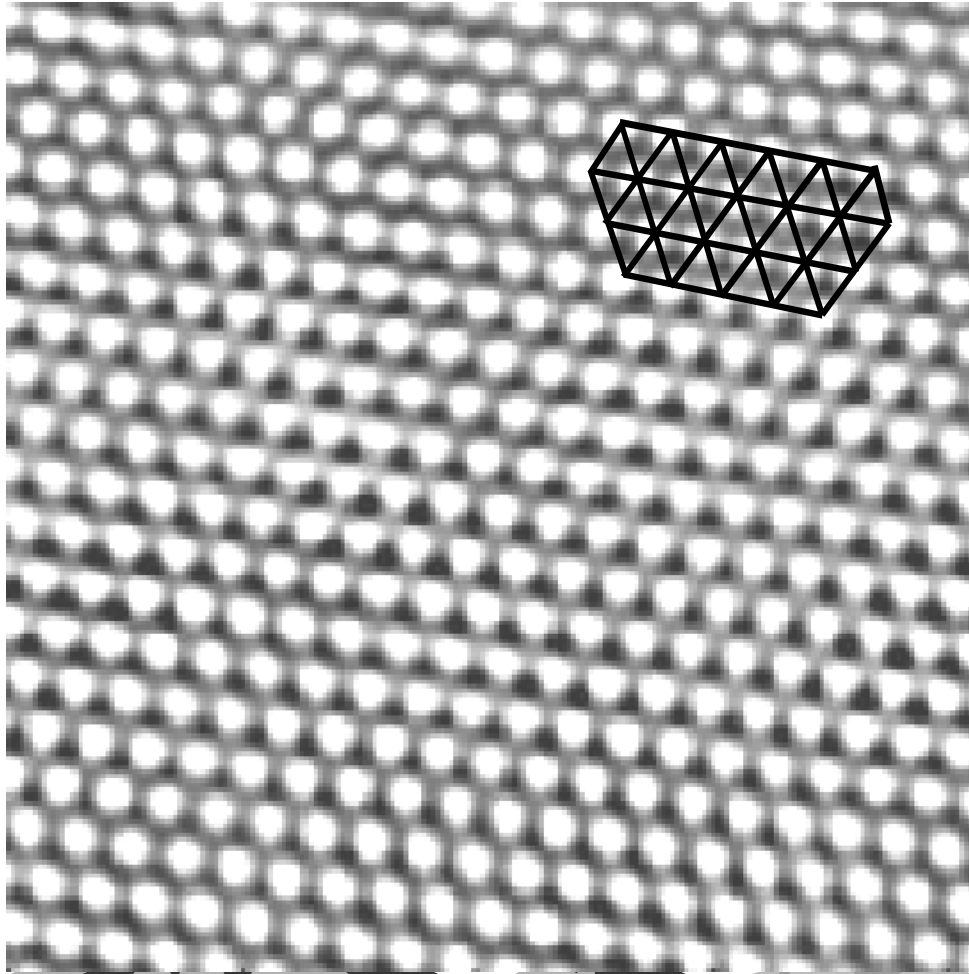
Povrchy – hustoty e STEM



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.

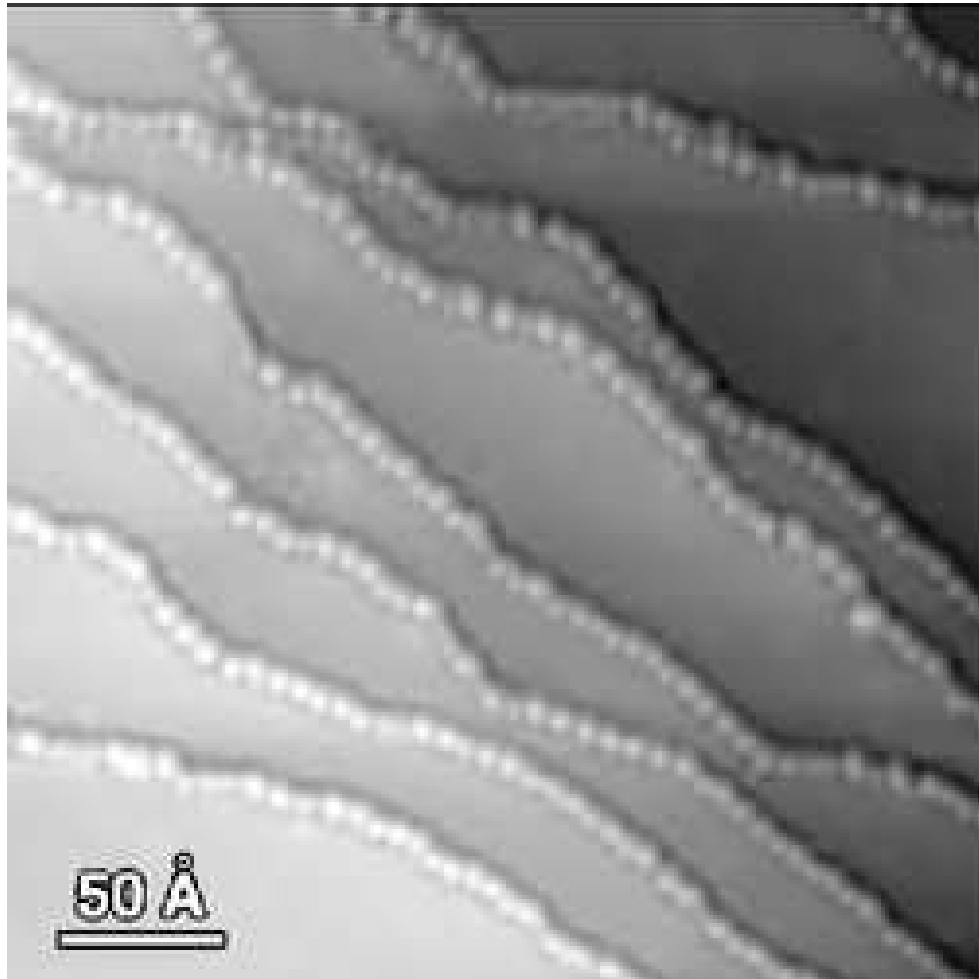


Povrchy – hustoty e STEM



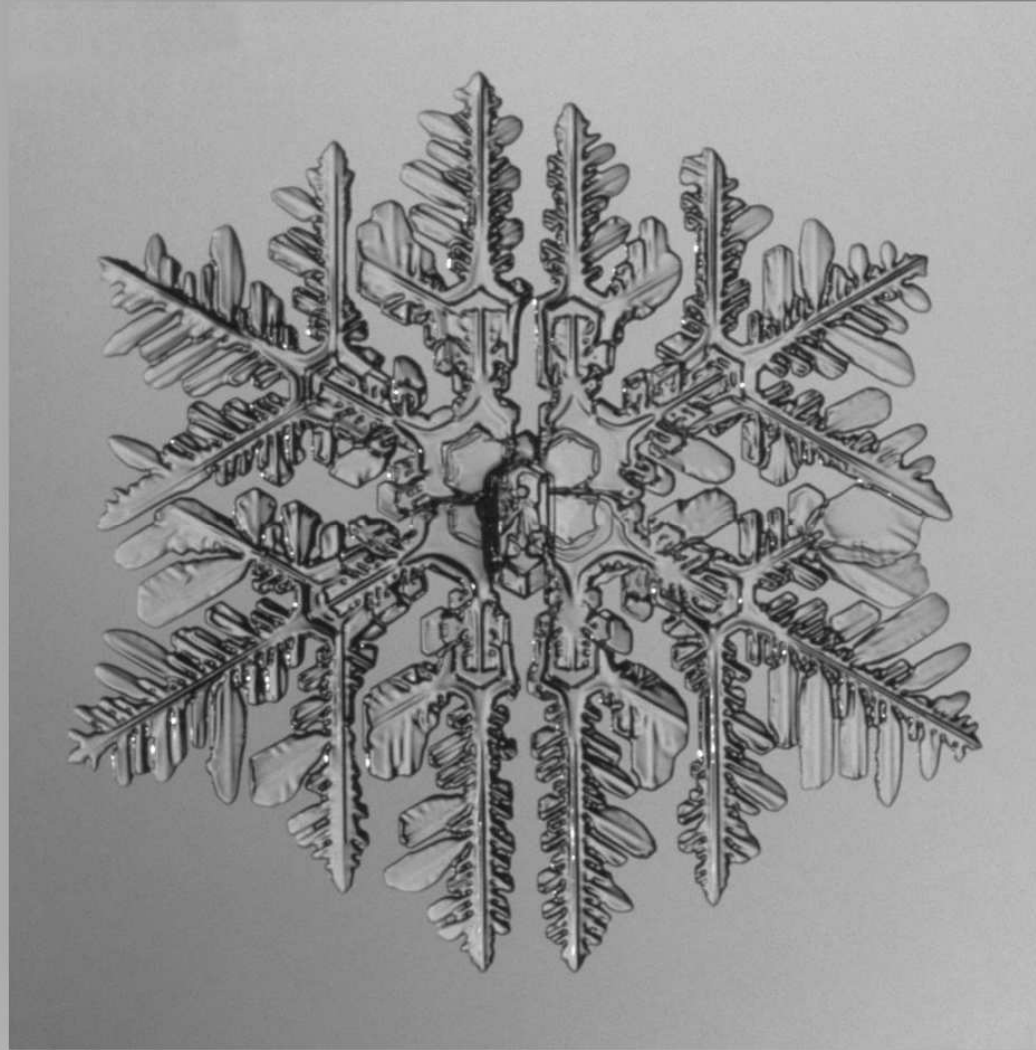
Freshly cleaved mica was attached to a standard microscope slide by double-sided adhesive and mounted onto a standard BioScope sample stage atop a Zeiss Axiovert 135 inverted optical microscope. The mica was imaged in contact mode using standard 450 μm long, single arm, etched silicon probes. Shown is 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



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 molecule (Copyright R.J. Hamers and X. Chen).

Snowflake



Snowflake



Snowflake

