

1.1.1. Kristályos szerkezet, koordináció, izomorfia, elegykristályok

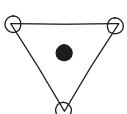
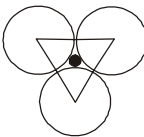
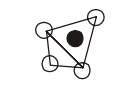
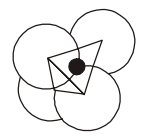
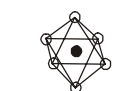
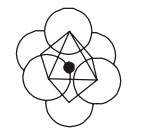
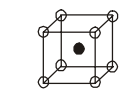
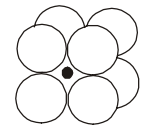
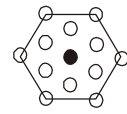
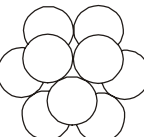
A kristályos anyagok térrács szerkezettel jellemezhetők, melynek rácspontjaiban meghatározott irányban és távolságban helyezkednek el az adott kristályos anyagot felépítő kémiai részecskék. Az ionos/kovalens/fémes és másodlagos kötések által kialakult kristályos anyagok kémiai felépítésükben rendszerint homogének, fizikai, kémiai tulajdonságaiban *anizotrópok*. A rácsot felépítő részecskék ion/atom rádiuszainak hányadosa határozza meg valamely tömegpont közvetlen szomszédainak számát, amit *koordinációs számnak* (általában 2, 3, 4, 6, 8, 12) nevezünk. Ezen alapul a rácsban bekövetkező ioncserék (pl. $\text{Fe}^{\text{VI}} \rightarrow \text{Mg}^{\text{VI}}$; $\text{Si}^{\text{IV}} \rightarrow \text{Al}^{\text{IV}}$, $\text{Mg}^{\text{VI}}\text{Si}^{\text{IV}} \rightarrow \text{Al}^{\text{VI}}\text{Al}^{\text{IV}}$) lehetősége, valamint azonos alakú, de eltérő összetételű kristályok (pl. CaCO_3 , MgCO_3 , FeCO_3 , MnCO_3) kialakulása (*izomorfia*), s így az elegykristály [pl. $(\text{Fe}, \text{Mg})_2\text{SiO}_4$] képződés is.

A legfontosabb kationok

Méret Å	Név	
1.46	K^+	8/12
1.1	Na^+	6/8
1.08	Ca^{2+}	6/8
0.91	Mn^{2+}	6
0.86	Fe^{2+}	6
0.8	Mg^{2+}	6
0.73	Fe^{3+}	6
0.69	Ti^{4+}	6
0.61	Al^{3+}	4/6
0.34	Si^{4+}	4
0.15	C^{4+}	3

A legfontosabb anionok

S^{2-} 1.72	Cl^- 1.72	O^{2-} 1.32	OH^- 1.32	F^- 1.25
-------------------------	-----------------------	-------------------------	-----------------------	----------------------

			<u>kation rádiusz</u> <u>anion rádiusz</u>
3			0.155
	háromszög		
4			0.255
	tetraéder		
6			0.414
	oktaéder		
8			0.731
	hexaéder		
12			kb.1
	kubooktaéder		

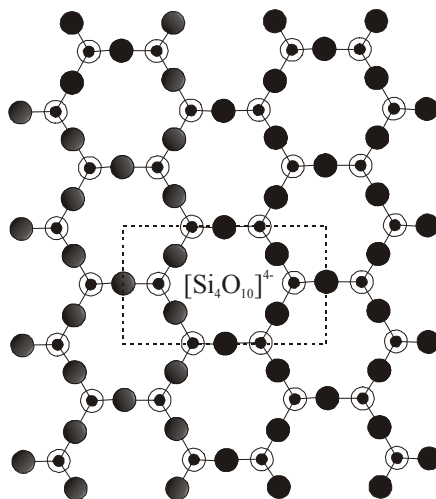
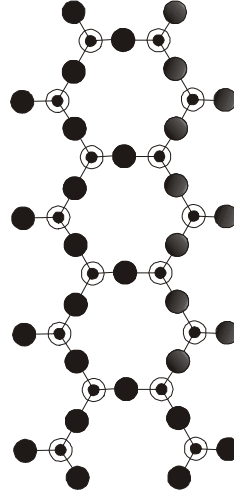
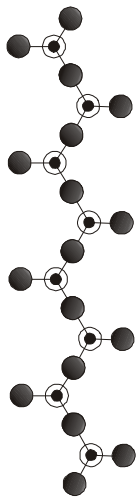
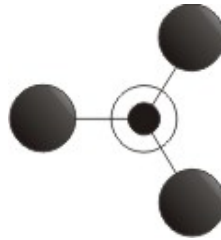
Vegyület	Kation-rádiusz	Vegyület	Kation-rádiusz	Rácstípus, koord. szám
MgCO ₃	0,78			} kalcit-típus koord. szám: 6 trigonális
FeCO ₃	0,83			
ZnCO ₃	0,83			
MnCO ₃	0,91	LiNO ₃	0,78	
CdCO ₃	1,03	NaNO ₃	0,98	
CaCO ₃	1,06	KNO ₃	1,33	
CaCO ₃	1,06	KNO ₃	1,33	} aragonit-típus koord. szám.: 9 rombos
SrCO ₃	1,27			
PbCO ₃	1,32			
BaCO ₃	1,43			

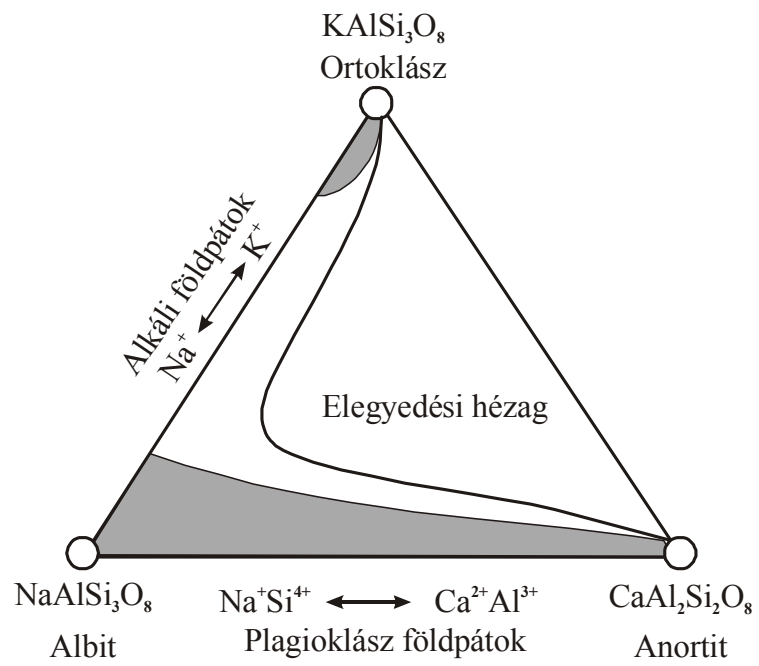
1.1.2. Ionrácok, izo-, mezo-, anizodezmikus szerkezetek

Az ionrácok rácspontjaiban ellentétes töltésű ionok helyezkednek el olyan módon, hogy a rács „kifelé” elektrosztatikusan semleges legyen. Három fő típusát szokás elkülöníteni, a rács különböző pontjaiban fellépő ionos kötés erősségét kifejező *elektrosztatikus vegyérték* (Z/K , ahol Z a központi kation töltése, K a koordinációs szám) és a koordináló anion töltésének (A) viszonya alapján. Ha $Z/K > A/2$, az *anizodezmikus* ionrácban komplex ionok alakulnak ki (pl. CO_3^{2-} , SO_4^{2-} , PO_4^{3-}). A $Z/K = A/2$ esetben kialakuló *mezodezmikus* szerkezetekben az anion azonos erővel kapcsolódik két szomszédos kationhoz, ezáltal megteremtve a polimerizáció lehetőségét (pl. SiO_4 , BO_3). A $Z/K < A/2$ esetben *izodezmikus* rács jön létre, melyben komplex ionok nem alakulhatnak ki (pl. NaCl , CaTiO_3).

1.1.3. A szilikátok felépítése, rendszere

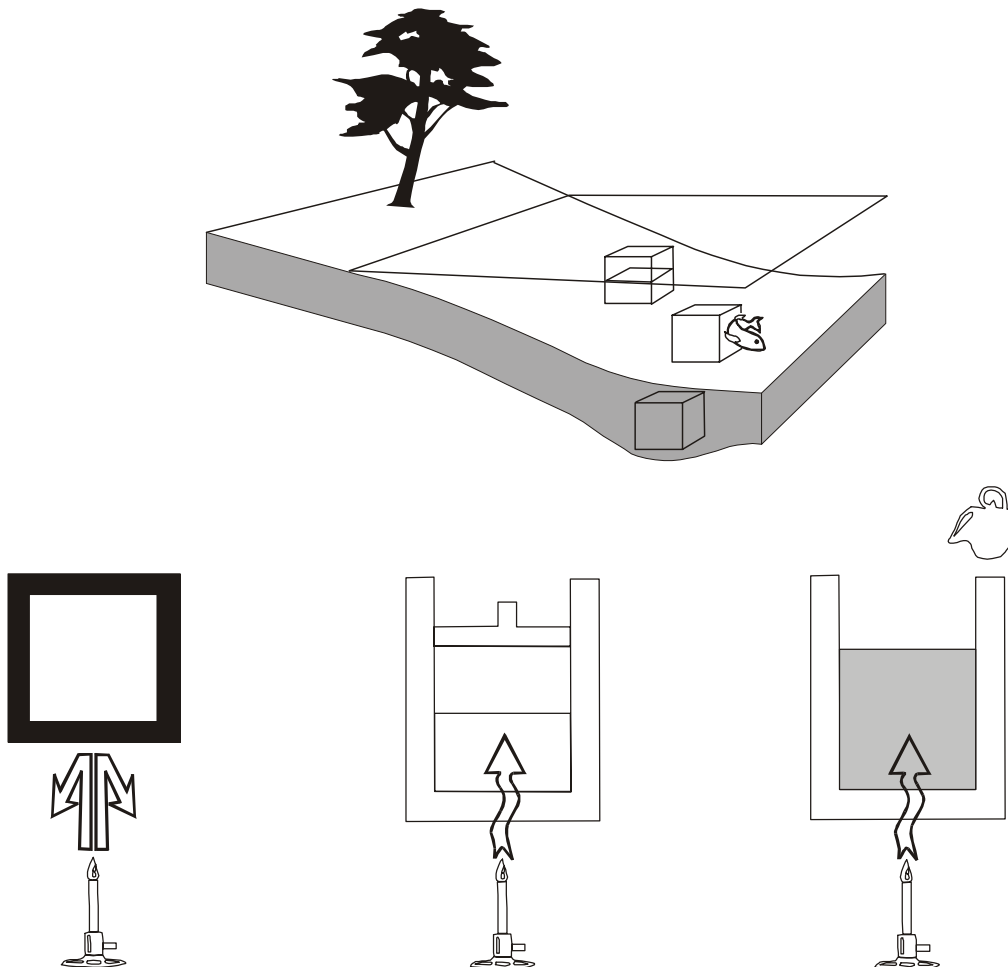
A szilikátok alap építőeleme az $[\text{SiO}_4]^{4-}$ tetraéder, illetve az ebből közös oxigéneken keresztül kialakult összetett ionok, melyeket a rácsban másodlagos kationok kötnek össze. A legfontosabb szilikát polimer típusok a nezo- $[\text{SiO}_4]^{4-}$, a szoro- $[\text{Si}_2\text{O}_7]^{6-}$, a ciklo- pl. $[\text{Si}_3\text{O}_9]^{6-}$, az ino- pl. $[\text{Si}_2\text{O}_6]^{4-}$, $[\text{Si}_4\text{O}_{11}]^{6-}$, a fillo- pl. $[\text{Si}_4\text{O}_{10}]^{4-}$, valamint a tektoszilikátok $[\text{SiO}_2]^0$. A szilikátok esetében a legfontosabb *elsődleges* kationok a tetraédes koordinációjú Si^{4+} és Al^{3+} . Fontos *másodlagos* kationok az oktaédes koordinációjú Al^{3+} , Fe^{3+} , Ti^{4+} , Fe^{2+} , Mg^{2+} , Mn^{2+} , Ca^{2+} , Na^+ , a hexaédes koordinációjú Ca^{2+} , Na^+ , vagy a kubo-oktaédes koordinációjú K^+ , Na^+ (az oxigénre vonatkoztatva).





1.2.1. Kémiai rendszer, nyílt rendszer, zárt rendszer

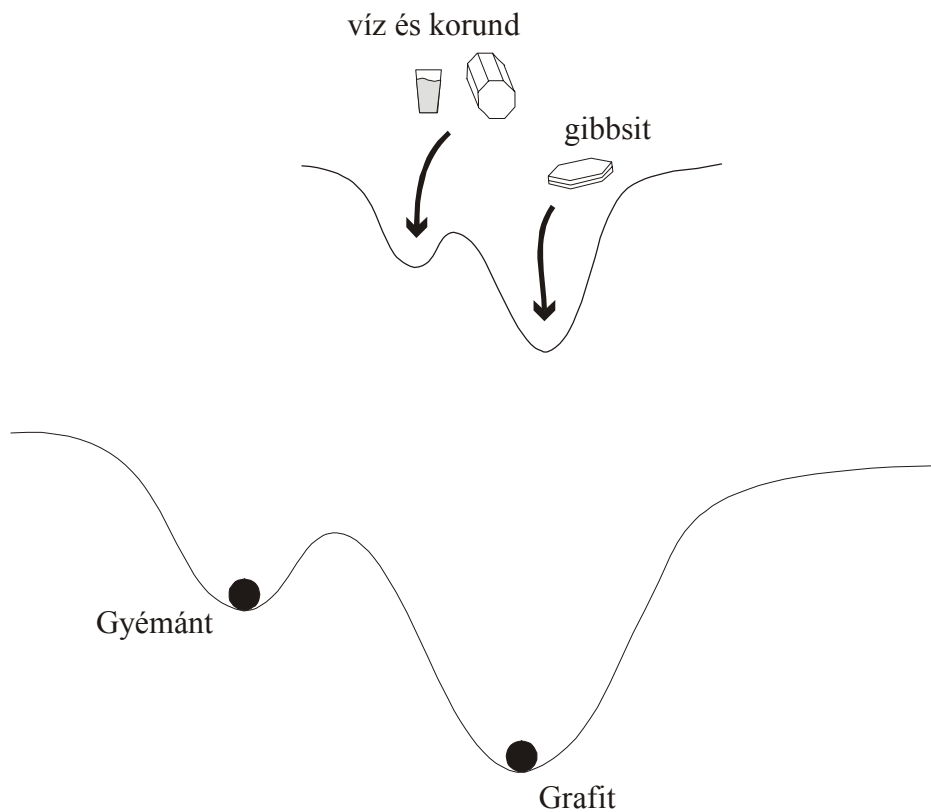
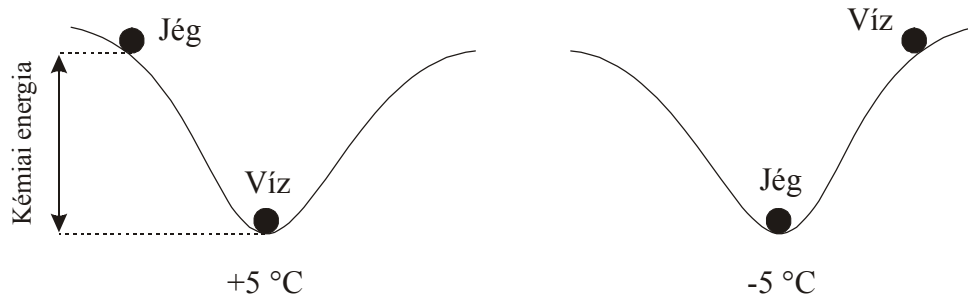
Közettani (általában természettudományos) vizsgálataink során célszerű az univerzumnak csak az adott probléma szempontjából lényeges összetevőire, azok kapcsolatrendszerére koncentrálnunk; ezt *rendszernek* nevezzük. A rendszer a rendkívül összetett valóság egyszerűsítése, definíciója mindig a problémától függ, ami egyúttal meghatározza a rendszert leíró változókat is. A közeteket rendszerint kémiai rendszerként vizsgáljuk. Termodinamikai szempontból a természetes rendszerek *nyíltak*, azaz a határon energia és anyagáramlás történik. A közettani modellekben gyakran használt *zárt* rendszer esetén nincs anyagáramlás, azaz; az *izolált* rendszer határán sem energia, sem anyagáramlás nincs.



1.2.2. Energia, Gibbs energia

A természetben a spontán változások mindig az energiatartalom csökkenés irányába hatnak (a labda legurul a lejtőn, a jég $+3\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on megolvad, míg $-3\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on a víz megfagy, stb.). Míg számos ásvány reakció során megváltozik a rendszer belső energiája is, más esetekben az

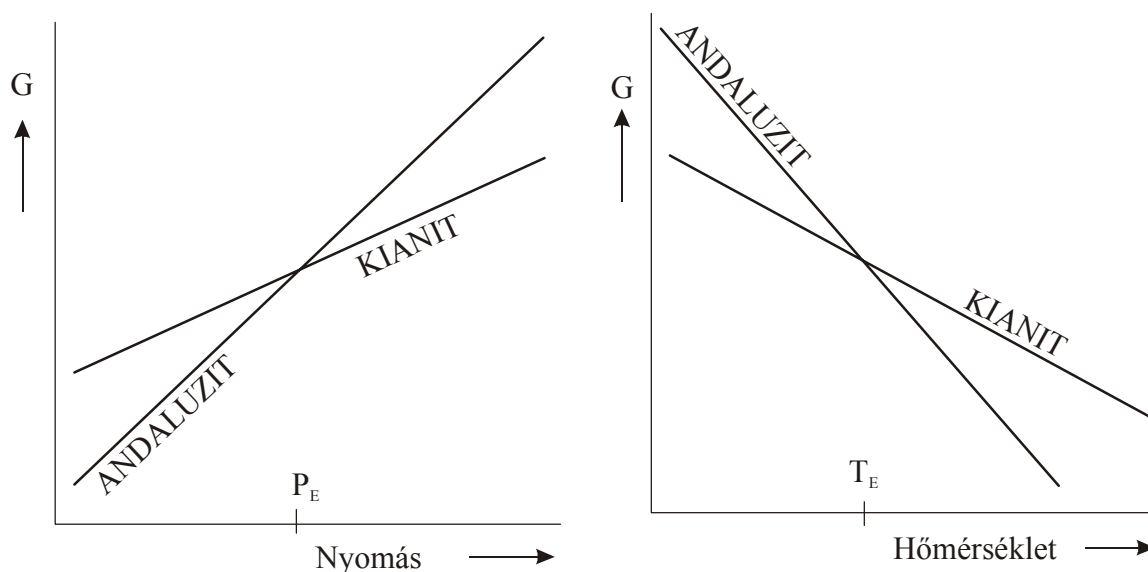
energia csökkenését kizárólag az *entrópia* növekedése okozza (pl. gázok keveredése, elegykristályok képződése). Kőzettani rendszerek vizsgálata során célszerű a rendszer *Gibbs energiáját* vizsgálni, lévén $G=G(P,T)$.



1.2.3. Egyensúly, a reakciók iránya

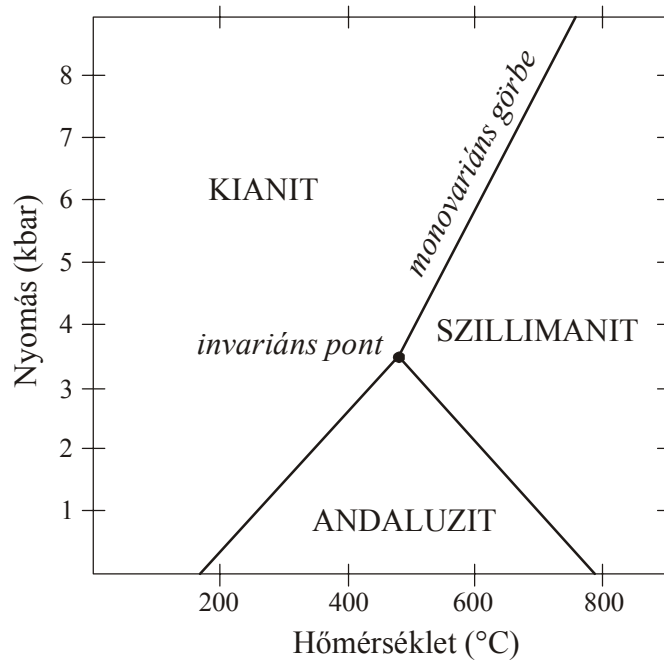
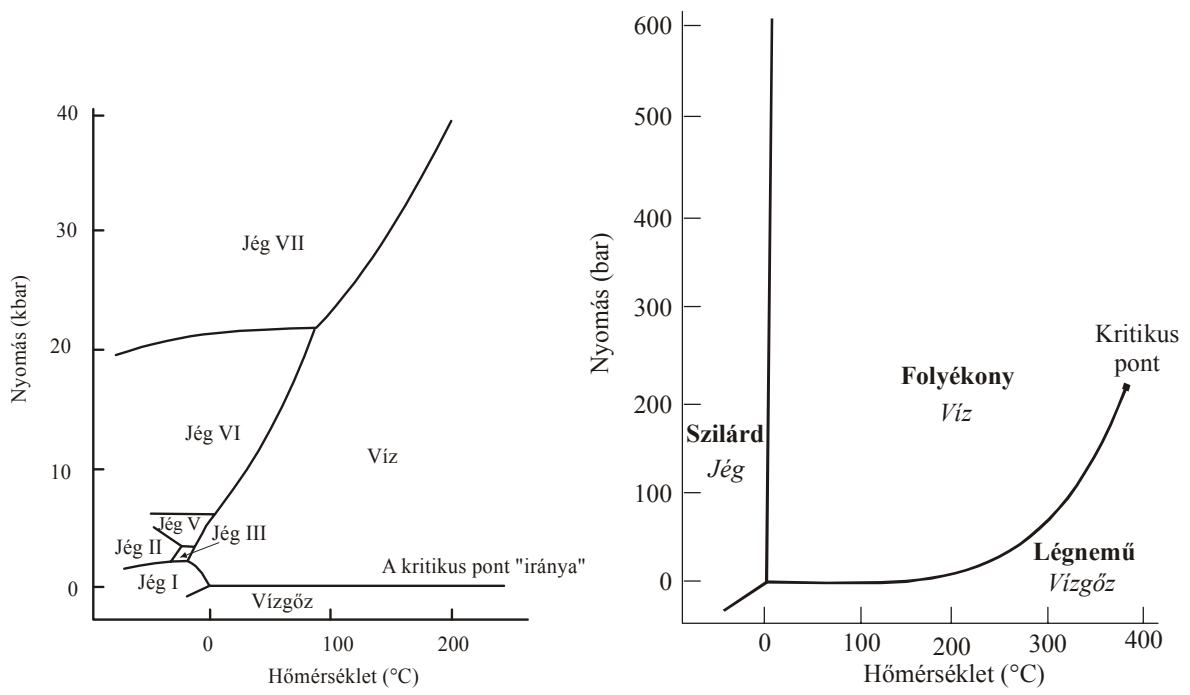
Egyensúlyban a rendszert leíró változók időben változatlanok, illetve kismértékű változást követően visszaállnak eredeti állapotukba. A legalacsonyabb energiájú egyensúlyi állapot a *stabil egyensúly* (pl. a grafit felszínen), a többi *metastabil egyensúlyi* állapotnak (pl. gyémánt felszínen) nevezzük. Egyéb esetekben a rendszer *instabil* állapotban van. Egyensúlyi állapotban a rendszert jellemző változók (pl. hőmérséklet, nyomás, térfogat, tömeg, stb.) az

állapothatározók. A mennyiségtől független állapotváltozókat (pl. koncentráció, viszkozitás, stb.) *intenzív*, a mennyiséggel arányos változókat (pl. térfogat) *extenzív* változóknak nevezzük. Utóbbiakat célszerű normálni (pl. mol tömeg). A kőzetekben leggyakrabban használt állapotváltozók a nyomás (P), a hőmérséklet (T), a pH, és a koncentráció (aktivitás, fugacitás).



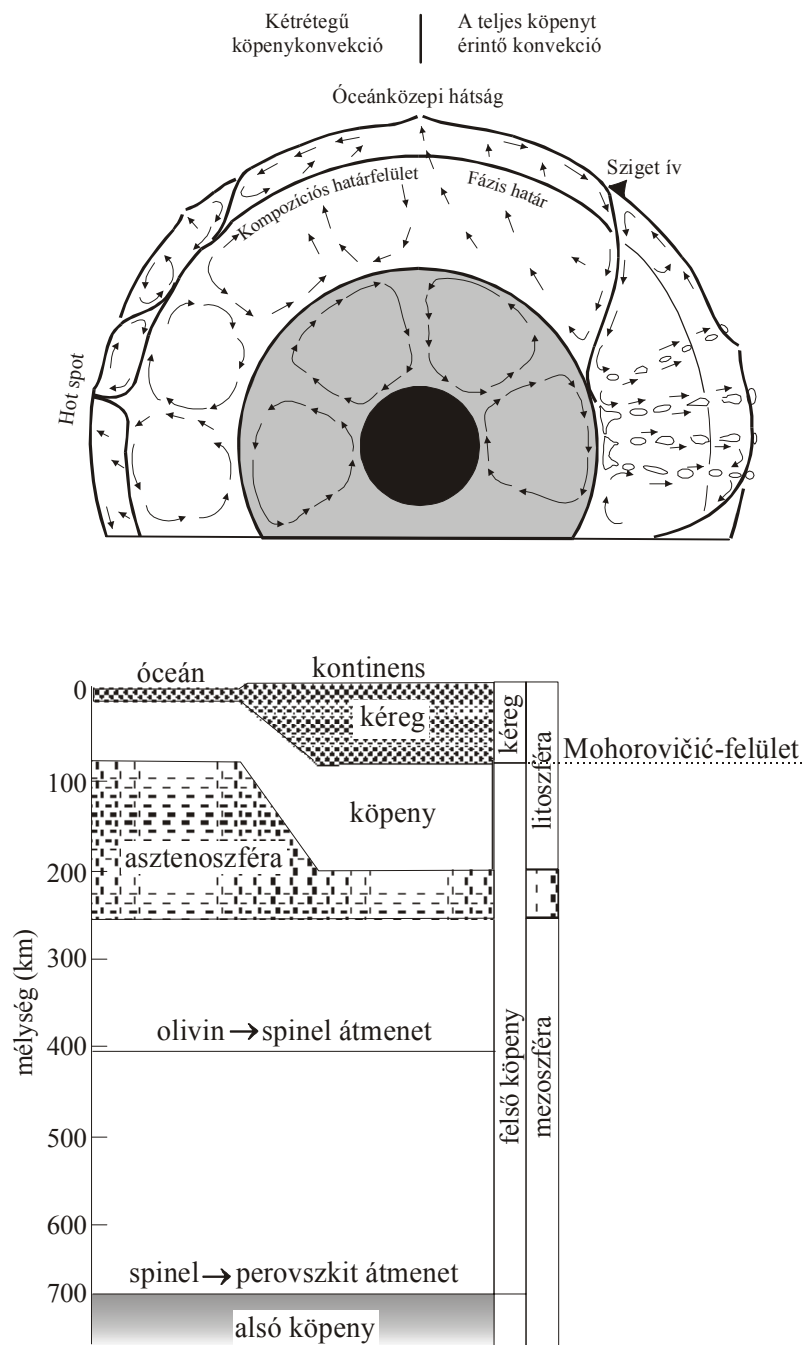
1.2.4. A fázis szabály, fázis diagramok, polimorfia

Bár a kőzeteket jellemző kémiai rendszerekben általában viszonylag kicsi a fázisok száma (*komponens* = K), ezekből igen sokféle ásvány (*fázis* = F) képes kialakulni. A (*Gibbs-féle*) *fázis-szabály* szerint ugyanakkor egyensúlyban lévő rendszerekben teljesül az $F + Sz = K + 2$ egyenlőség [*Sz* = *szabadsági fok*, a rendszert egyértelműen meghatározó állapotváltozók száma, pl. nyomás (P), hőmérséklet (T)], tehát az adott kémiai összetételű kőzetben egyszerre jelenlévő (*koegzisztens*) ásványok száma korlátozott. Adott kémiai rendszer koegzisztens fázisait az állapotváltozók függvényében *fázis-diagramokon* ábrázolhatjuk. Azokat a vegyületeket, amelyeket eltérő PT viszonyok mellett más-más kristályszerkezet jellemez, *polimorf* anyagoknak nevezzük (pl. kalcit – aragonit – CaCO_3 ; andaluzit – kianit – szillimanit – Al_2SiO_5 , stb.).



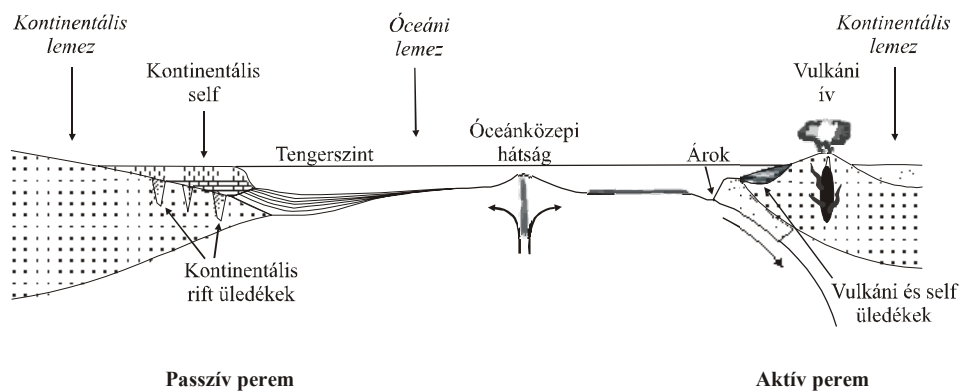
1.3.1. A Föld gömbhéjas szerkezete, kéreg-köpeny, ill. litoszféra-asztenoszféra, Mohorovičić-felület

A földrengés hullámok terjedési sebességének vizsgálata azt bizonyítja, hogy a Föld gömbhéjas szerkezetű; kéreg, köpeny és mag különböztethető meg. A kéreg és a köpeny határát a *Mohorovičić-felület* definiálja. A kéreg, és a köpeny legkülső zónája alkotja a *litoszférát*, amely a *lemeztektonikai* folyamatok során mechanikai egységet alkot. Alatta találjuk az *asztenoszférát*. A külső mag kivételével a teljes Föld szilárd halmazállapotú.



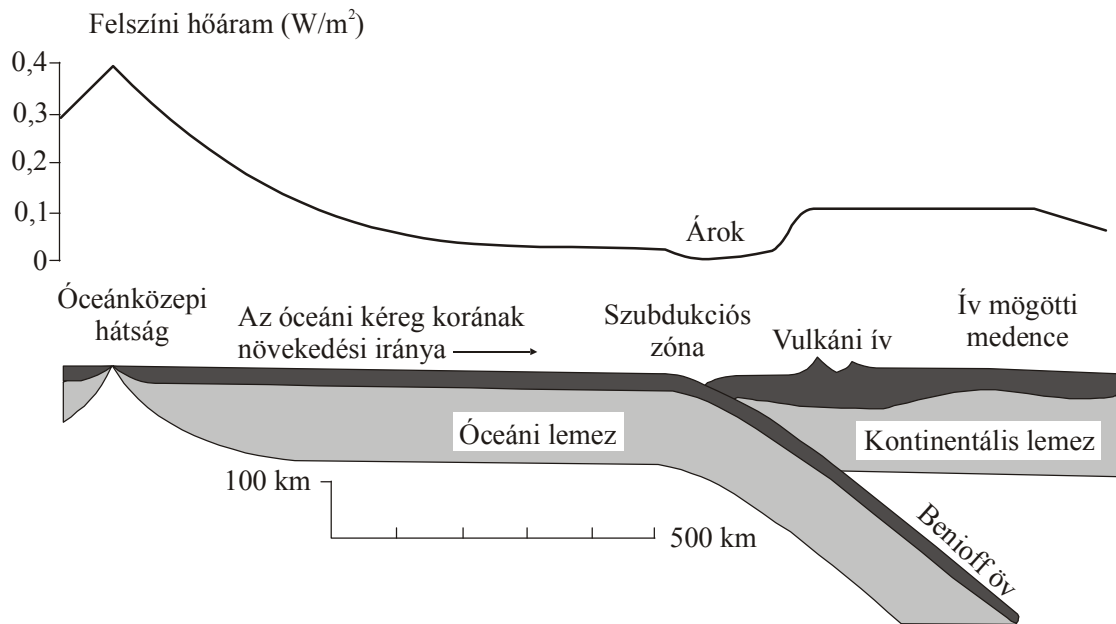
1.3.2. Óceáni lemez, kontinentális lemez, lemezvándorlás

Eltérő felépítésük alapján megkülönböztetünk óceáni és kontinentális típusú litoszférát. A köpeny litoszféra és a kéreg legalsó, „bazaltos” összetételű egysége építi fel az előző típust, míg a kontinentális litoszféra kialakításában ezek fölött a „granitoid” összetételű kéreg is részt vesz. A litoszféra több merev lemezből áll, melyek egymáshoz képest állandó mozgásban vannak. A kontinentális lemezek horizontális mozgásával („kontinensvándorlás”) egyidejűleg, a közöttük lévő óceáni lemezek a lemezhatárokon újra keletkeznek, illetve felemésztnődnek.



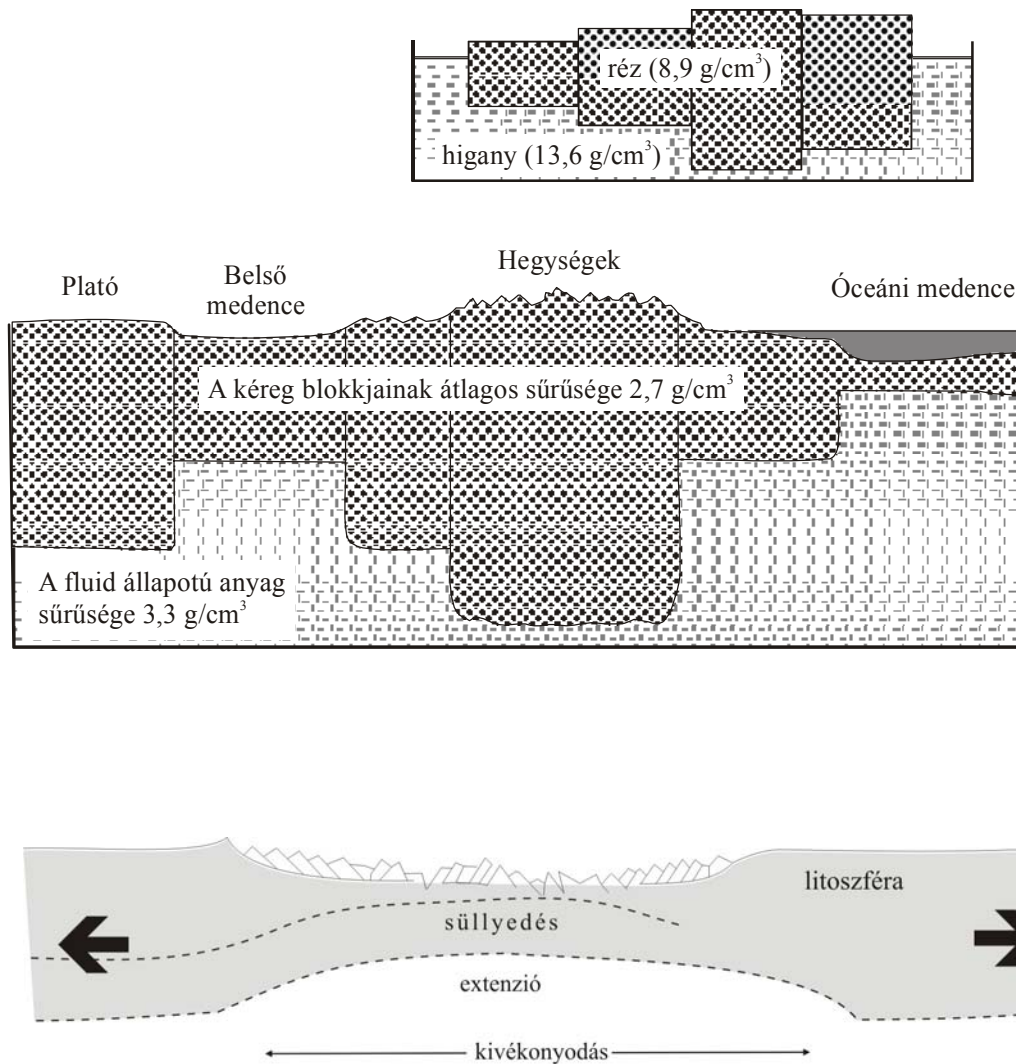
1.3.3. Passzív perem, aktív perem, rift, szubdukció

Azokon a lemezhatárokon, ahol a két szomszédos lemez azonos irányban és sebességgel mozog, új litoszféra nem keletkezik, és nem is emésztnődik fel; ezek a *passzív* peremek. Az *aktív*, távolodó (*divergens*) lemezhatárok a Föld azon zónái, ahol az asztenoszféra megolvadó anyagából új óceáni lemez keletkezik (*rift zónák*). Az aktív, közeledő (*konvergens*) lemezhatárok területén, az egyik lemez a másik alá, az asztenoszférába bukik, s így felemésztnődik (*szubdukciós zóna*).



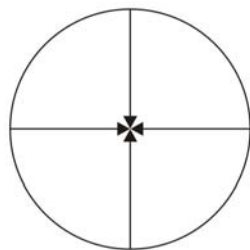
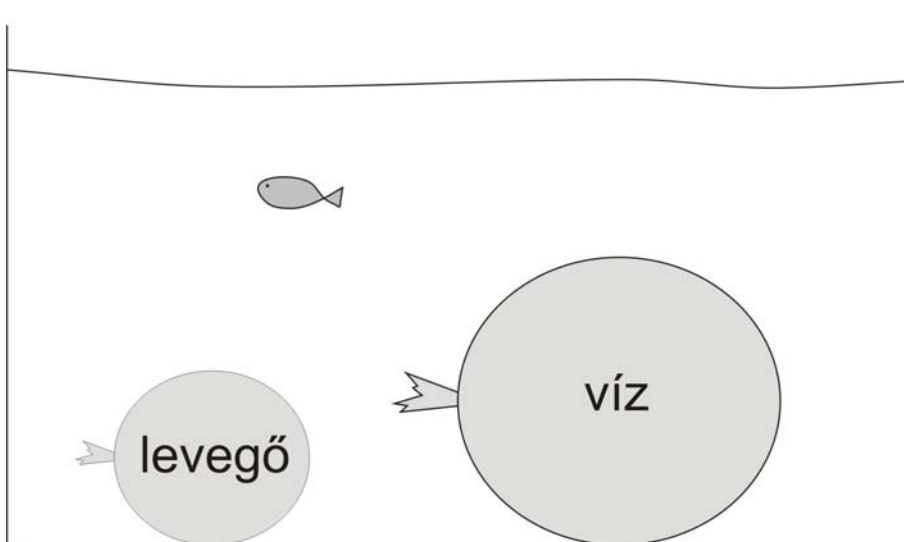
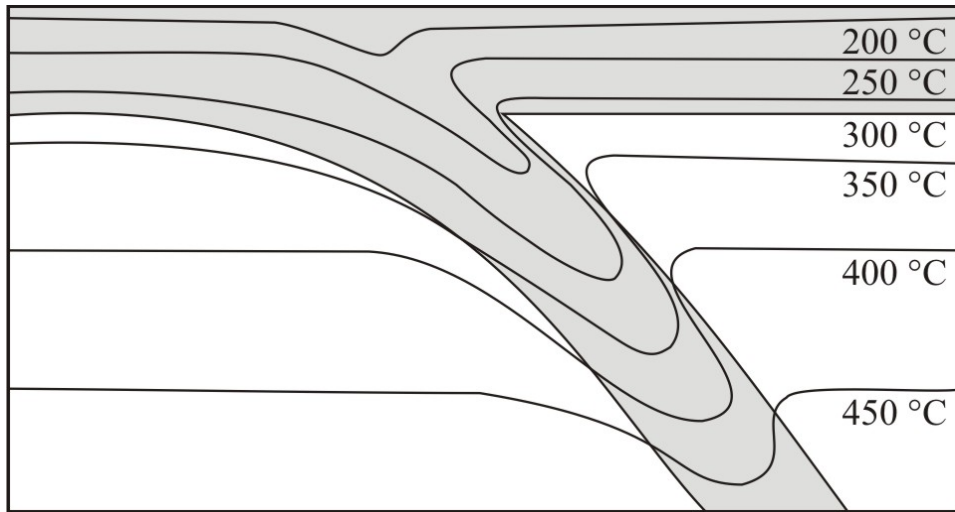
1.3.4. Izosztázia – a litoszféra vertikális mozgásai (epirogén mozgások)

A litoszféra lemezek, illetve ezek egyes egységei sűrűség különbségeik alapján hidrosztatikai egyensúlyra törekszenek. Ez az *izosztázia*, ami a negatív gravitációs anomáliájú területeken (pl. lánchegységek) emelkedő, a pozitív anomáliájú területeken (pl. medencék) süllyedő vertikális izosztatikus mozgást okoz. A litoszféra hosszú ideig tartó, szerkezetátalakulással nem járó izosztatikus mozgásait összefoglalóan *epirogén* folyamatoknak nevezzük, melyek következtében a litoszférát alkotó kőzetek eltérő mélységbe, ezáltal megváltozott PT viszonyok közé kerülhetnek.

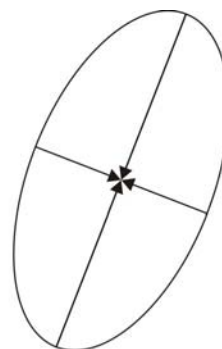


1.3.5. P , T , P_{H_2O} , P_{eff} , stressz, pH , Eh , redox potenciál

A Föld forró belső zónái és a hideg világűr között szükségképpen időben állandó *hőcsere* megy végbe, ami mélységgel növekvő hőmérsékletű izotermákat alakít ki. Ezt a stabil képet zavarják meg a Föld mozgási folyamatai, melyek során relatív hideg kőzettömegek mélybe süllyedhetnek (pl. szubdukció), vagy meleg kőzetek kerülnek hidegebb környezetbe (pl. magmás intrúziók). A kéregben és a köpenyben a nyomásmezőt izobár felszínek definiálják, melyek – mivel a nyomás fő oka az adott pont fölötti kőzetoszlop vastagsága (*litosztatikus nyomás*) – párhuzamosak a Föld felszínével. Anizotróp nyomás tér kialakulhat a kérget alkotó kőzetek eltérő sűrűsége miatt, de fő okozója a kéreg tektonikus aktivitása. Az irányított nyomásra (*stressz*) a kőzet által adott válasz a deformáció, mely a kőzetek szerkezeti bélyegeit határozza meg. A kőzetekbe zárt fluidum nyomása (elsősorban PH_2O) a litosztatikus nyomás ellen hat, s így az adott ponton ható nyomás a kettő eredője (P_{eff}) lesz.



Litosztatikus nyomás



Írányított nyomás (stress)