

Úvod do atomové a molekulové stavby látek

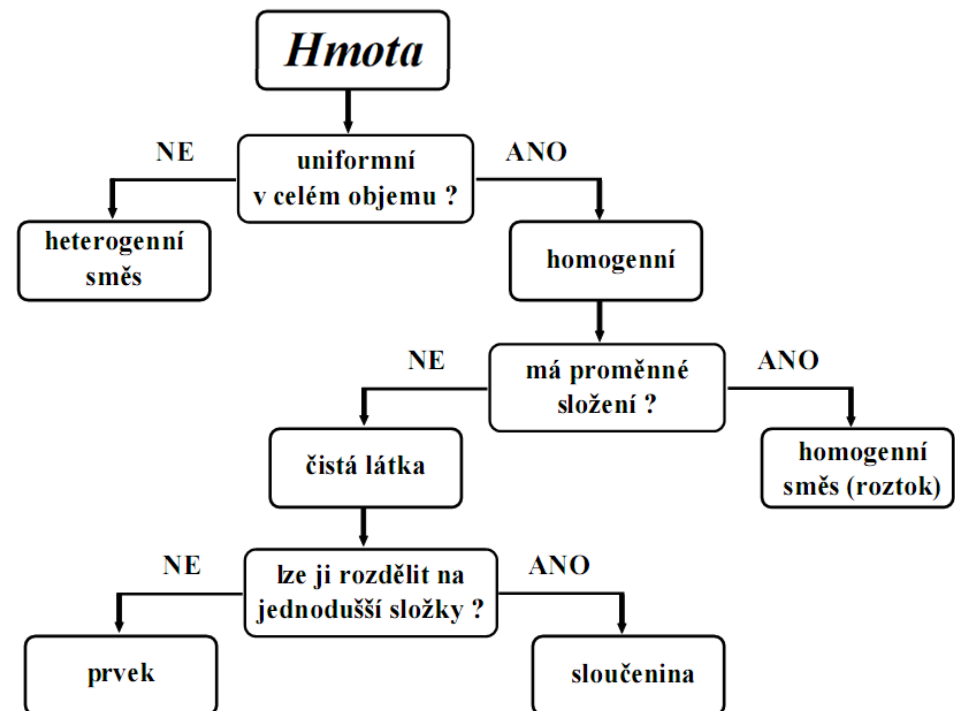
Při fyzikálním zkoumání přírody si veškerý materiální svět rozdělujeme na dvě základní formy hmoty: pole a látku

Látka

tvořená částicemi s nenulovou klidovou hmotností - elementární částice, atomy, molekuly a z nich vytvořené složitější soubory a struktury.

Pole

zprostředkovávající vzájemné silové **působení** (interakce) mezi částicemi látky.



Toto rozdělení je spíše **konvenční** - obě formy se **vzájemně mohou proměňovat**; částice látky lze chápat pomocí kvantových stavů polí a pole lze popisovat pomocí částic.

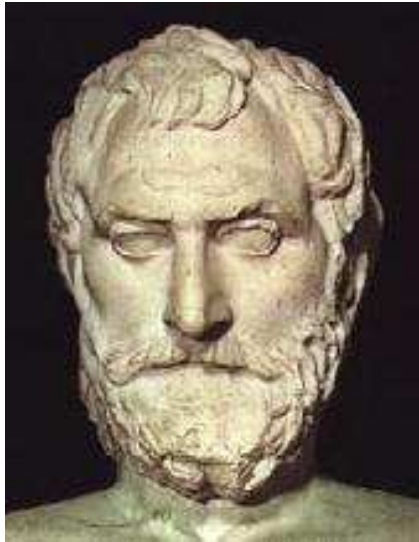
Historické mezníky do konce 19.století

- Leukippos
- Demokritos - „Může být látka dělena do nekonečna?“
- Pojem **ATOM**. Existují pouze atomy a prázdno. Přejít od předpokladu spojitě látky ke strukturované látce.

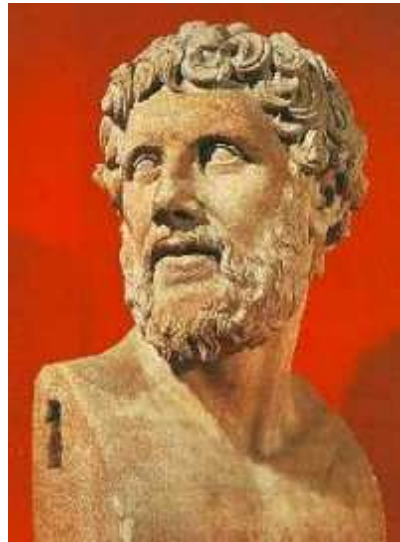
scholastika + řemeslo = věda

- **Bernoulli Daniel** (1700 - 1782) – aplikoval Newtonovy pohybové zákony na pohyb atomů plynu a dospěl k měřitelné makroskopické veličině „tlak plynu“ $p = \frac{1}{3}\rho v^2$
- **Proust Joseph Louis** (1754-1826) „Poměry hmotností prvků vstupujících do sloučeniny jsou stálé“: $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$
- **Dalton John** zákony chemického slučování, parciální tlaků
- **Brownův pohyb** – objevil Brown Robert v r.1827, (Einstein, Perrin)
- **Mendělejev Dimitrij Ivanovič** (1834-1907) – periodický systém

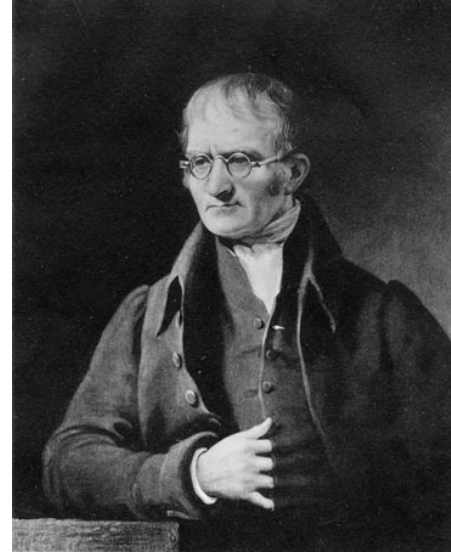
▪ V. stol. př. K.



Leukippos (~460-370)



Demokritos (~470-371)



John Dalton
(1766 – 1844)



Amadeo Avogadro



Faraday

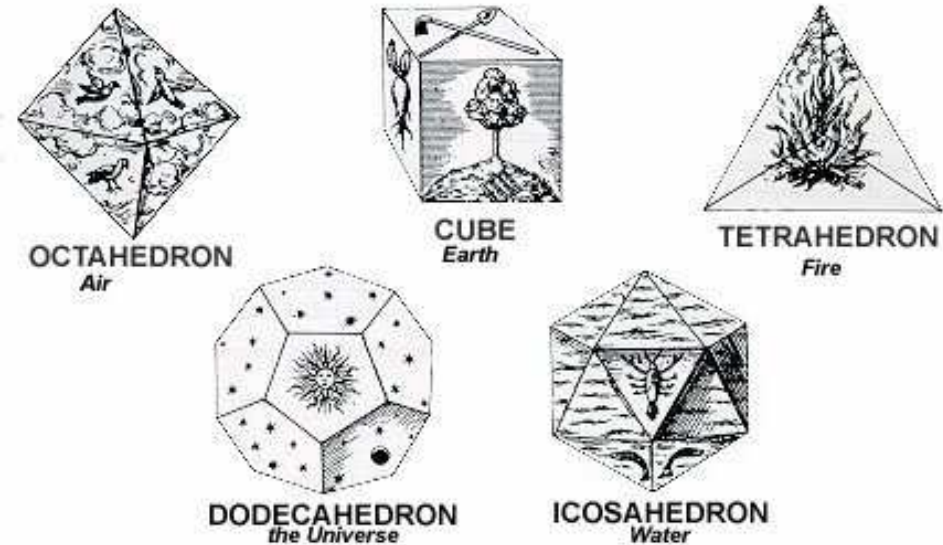


Bernoulli

Pojem "prvek"

historické, chemické a fyzikální pojetí

"prvek" jako dále nerozdělitelná látka



prvek byl jako čisté látka, kterou nelze rozložit do jakéhokoliv jednodušší látky

1913 objev anglického Moseleyho, že jaderný náboj je fyzikálním základem pro atomové číslo atomu, vedl k aktuální definici prvku založeného na atomovém čísle (Z protonovém).

Vývoj názorů na složení hmoty

Anaxagoras (asi 500) - látky složeny z nějakých drobných částech stejné podstaty
Zakladatel atomismu Leukippos (440). Jako první jasně vyslovil domněnku o zrnitém složení látek.

Leukippovo učení převzal a významně rozpracoval jeho žák

Demokritos z Abdéry (370)

Došel k názoru, že při dělení látky na stále menší částčky se dostaneme k částčkám, které jsou již dále nedělitelné. Předpokládal, že jsou nedělitelné, neporušitelné, protože jsou úplně tuhé a neobsahují prázdný prostor. Jeho atomy lze rozlišit tvarem, velikostí, polohou a uspořádáním. V prázdnu se atomy pohybují, střetávají se, přičemž někdy od sebe odskakují, jindy se shlukují a spojují. Spojením se drží u sebe, a tak vznikají složená tělesa.

Demokritos se domníval, že nekonečný není jen počet atomů, ale také počet možných tvarů různých atomů. Existují atomy např. kulovité, pyramidální, s háčky atd. Demokritos tímto způsobem vysvětloval i řadu fyzikálních vlastností látek. Např. tekutost vody vysvětloval tím, že atomy vody mají hladký povrch a mohou tedy po sobě snadno klouzat. Naopak atomy železa jsou malá hranatá tělíška, která do sebe pevně zapadají, a proto je železo tak pevné. Tohle však nejde empiricky dokázat, protože atomy nelze nikdy vidět pouhýma očima. Atomistická koncepce byla zcela odmítnuta Aristotelem

Novověk (17.-19. století) - Alchymie, chemie ---- vzkříšení antického atomismu
mikroskopický výklad tepelných jevů --- Newton, Boyle

Bernoulli zjistil souvislost mezi rychlostí částic a zahřátím plynu. Svou prací
předběhl o více než 100 let svou dobu.

pojem chemického prvku jako látky, kterou nelze v laboratoři rozložit na dvě nebo
více jiných látek

John Dalton (1766 – 1844) každý z prvků je vybudován z atomů

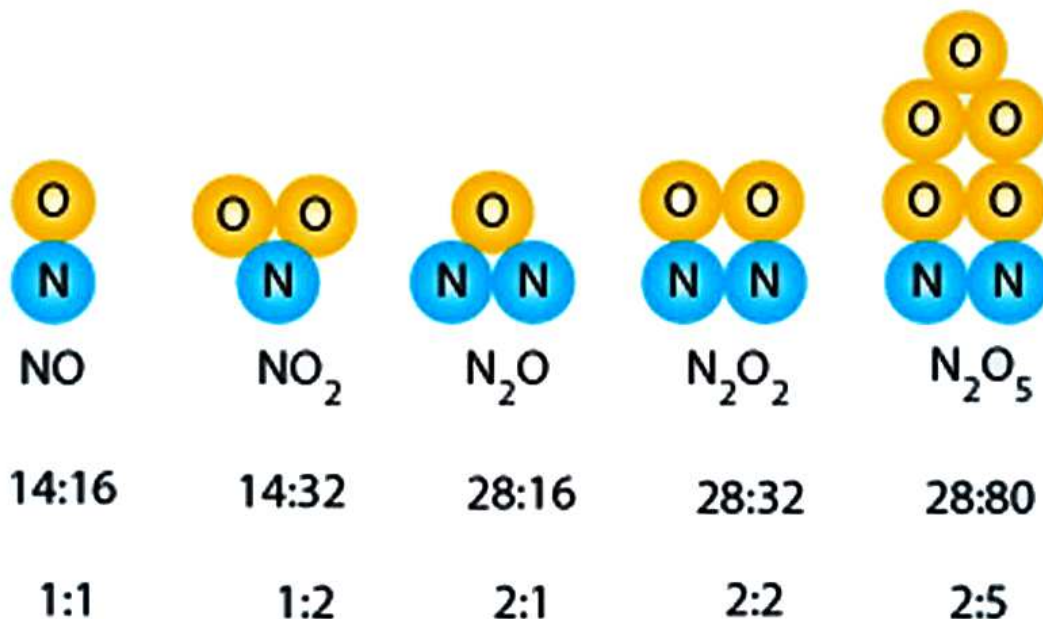
„váhová množství dvou prvků, jež se spolu beze zbytku sloučí na danou
sloučeninu, jsou k sobě vždy v témž poměru, bez ohledu na to, jak velká tato
množství jsou “ (**zákon stálých poměrů slučovacích**)

Pro tuto skutečnost lze stěží nalézt přirozenější vysvětlení než ve formě atomové
hypotézy.

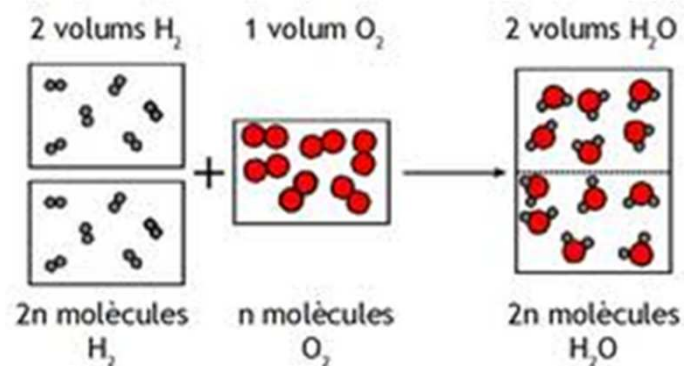
Vzájemným spojováním různých celistvých počtů týchž dvou prvků lze vysvětlit
vznik dvou či více sloučenin z téže dvojice prvků a současně i skutečnost, že
„váhová množství prvků jednoho, připadající v těchto sloučeninách na určité, vždy
stejně váhové množství prvku druhého, jsou k sobě v poměru malých celých čísel“
(**zákon násobných poměrů slučovacích**).

Daltonovy postuláty

- prvky se skládají z velmi malých dále nedělitelných částic – **atomů (?)**,
- atomy téhož prvku jsou stejné, atomy různých prvků se liší hmotností, velikostí a dalšími vlastnostmi,
- v průběhu chemických dějů se atomy spojují, oddělují nebo přeskupují, přičemž nemohou vznikat nebo zanikat,
- slučováním dvou či více prvků vznikají **chemické sloučeniny**, slučování probíhá jako spojování celistvých počtů atomů těchto prvků.



Např. jeden objem kyslíku a dva objemy vodíku poskytují dva objemy vodní páry. Z Daltonovy teorie nebylo možno vysvětlit, proč v uvedeném příkladu celkem ze tří stejných objemů vodíku a kyslíku vzniknou právě dvě objemové jednotky.



Tento nesoulad vedl *Avogadra (1811)* k zavedení pojmu **molekula**. Molekuly prvků mohou být v plynném stavu složeny z více stejných atomů, podobně jako je sloučenina složena z více různých atomů. Reakci, při níž vodík reaguje s kyslíkem za vzniku vodní páry, lze pak popsat rovnicí



ze které vyplývá, že plynný vodík a plynný kyslík tvoří biatomické molekuly.

Avogadro (1776-1856) - hypotéza, že základními částicemi všech látek, a to i prvků, nejsou atomy, nýbrž částice složené z atomů, tzv. **molekuly**, a že u plynů jsou za téže teploty a tlaku ve stejných objemech přítomny stejné počty molekul.

Z Daltonových zákonů ovšem vyplynulo, že zpravidla není potřeba znát absolutní hmotnosti atomů a molekul → zavedení **relativní atomové hmotnosti**, resp. **relativní molekulové hmotnosti**. Ke srovnání byl použit nejlehčí prvek -- vodík -- o hmotnosti 1 g. Později byl za standard zvolen kyslík o hmotnosti 16 g (většina prvků tvoří oxidy, které byly vhodné pro experimentální určování „atomových vah“). Protože však přírodní kyslík je směsí více izotopů, je od r. 1961 za **základ relativních atomových (resp. molekulových) hmotností** používán **nuklid ^{12}C** o hmotnosti 12 g.

Látkové množství n (jednotka 1 mol) je definován takto:

Vzorek ze stejnorodé látky má látkové množství jeden mol, obsahuje-li právě tolik částic (atomů, iontů, molekul, elektronů aj. - částici je nutno vždy přesně určit), kolik je atomů ve vzorku nuklidu uhlíku ^{12}C o hmotnosti 12 g.

Počet částic připadající na 1 mol látky udává Avogadrova konstanta N_A ; podle posledních měření má hodnotu:

$$N_A = (6,022\ 045 \pm 0,000\ 31) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

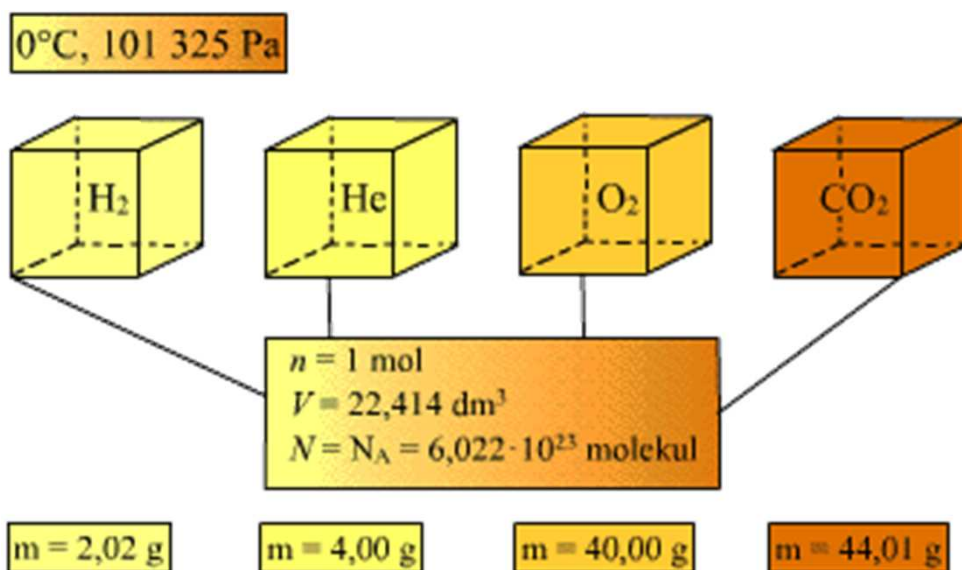
Avogadrův přínos

Avogadrova hypotéza (1811)

Základními částicemi všech látek nejsou nedělitelné atomy, ale částice z atomů složené – molekuly.

Avogadrův zákon:

Stejné objemy plynů obsahují za stejného tlaku a teploty stejný počet molekul.



Nová veličina – **Látkové množství**

umožňuje vyjadřovat množství látky pomocí počtu částic.

(za jednotku **mol** byl zvolen takový soubor částic dané látky, jehož hmotnost v gramech se číselně rovná relativní atomové (resp. molekulové) hmotnosti této látky.

1 mol je takové množství látky, které obsahuje tolik částic, kolik je atomů ve **12 gramech** nuklidu ^{12}C

Vzorek látky má látkové množství **1 mol**, obsahuje-li právě tolik částic (atomů, molekul, iontů, elektronů aj. – částici je nutno vždy přesně určit), kolik atomů je obsaženo v nuklidu uhlíku ^{12}C o hmotnosti 12 g.

1 mol je množina, která má stejný počet prvků, jako je atomů ve 12 g nuklidu ^{12}C .

Počet částic v jednom molu jakékoliv látky udává tzv. **Avogadrova konstanta N_A** :

$$N_A = (6.022045 \pm 0.0000005) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Poměrná atomová hmotnost

$$m \in (10^{-27}, 10^{-25}) \text{ kg}$$

- Poměrné atomové hmotnosti
- Volba referenčního prvku → systém poměrných atomových hmotností

O

$$1HJ = \frac{1}{16} m_{({}^{16}_8\text{O})}$$

chem. aktivita, velké množství sloučenin

C

$$1u = 1.66044 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$1u \cong$ hmotnost atomu vodíku

$$1u = 1amu = \frac{1}{12} m_{({}^{12}_6\text{C})}$$

Určení hmotnosti atomu pomocí látkového množství

$$1 \text{ mol C}(12,6) = 12\text{g}$$

$$N_A = (6.022045 \pm 0.0000005) \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$n = 2.68 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$
$$V_0 = 22.41 \frac{\text{m}^3}{\text{mol}}$$

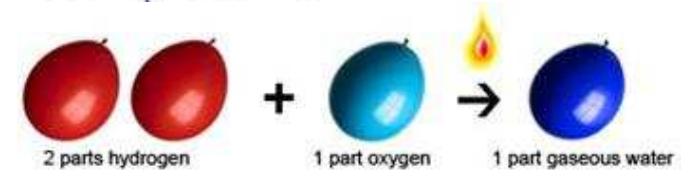
$$m_{\text{atom}} = \frac{M}{N_A}$$

$$1u = (1.660565 \cdot 10^{-27} \pm 0.0000005) \cdot 10^{-27} \text{ kg} \approx 931.478 \frac{\text{MeV}}{c^2}$$

Hmotnostní číslo atomu – přirozené číslo nejbližší k relativnímu atomovému číslu A_{rel} $A=n+p$ v jadře

a) **Zákon zachování hmotnosti** - Lomonosov (1748), Lavoisier (1774)

Hmotnost všech látek do reakce vstupujících je rovna hmotnosti všech produktů.



b) **Zákon zachování energie** - Lomonosov (1748), Mayer (1842)

Energii nelze vytvořit ani ji nelze zničit.

c) **Zákon stálých poměrů slučovacích** Proust (1799) (*první zákon Daltonův*).

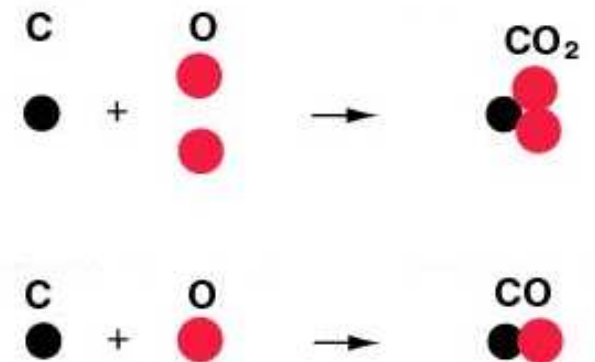
Hmotnostní poměr prvků či součástí dané sloučeniny vždy stejný a nezávislý na způsobu přípravy této sloučeniny.

d) **Zákon násobných poměrů slučovacích** Richter (1791),

Dalton (1802) (*druhý zákon Daltonův*). Tvoří-li dva prvky více podvojných sloučenin, pak hmotnosti jednoho prvku, který se slučuje se stejným množstvím prvku druhého, jsou vzájemně v poměrech, které lze vyjádřit malými celými čísly.

e) **Zákon stálých poměrů objemových** Gay-Lussac (1805)

Plyny se slučují v jednoduchých poměrech objemových.



Veličiny vztažené na jednotkové látkové množství se nazývají **molární**. *Molární hmotnost M je určena podílem hmotnosti m a látkového množství n dané látky.* Jednotkou molární hmotnosti je $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$.

$$M = \frac{m}{n}$$

Vydělením molární hmotnosti Avogadrovou konstantou dostaneme hmotnost $m(X)$ jednoho atomu X.

^1H má hmotnost $m(^1\text{H}) = 1,673\,55 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$,

^{12}C má hmotnost $m(^{12}\text{C}) = 1,992\,67 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$.

K vyjadřování hmotností atomů a molekul lze použít i vedlejší jednotku hmotnosti — **atomovou hmotnostní jednotku u**.

Ta je definována vztahem: **$1 \text{ u} = (1,660\,565\,5 \pm 0,000\,008\,6) \cdot 10^{-27} \text{ kg}$**

tak, aby **hmotnost m_u atomové hmotnostní konstanty** (která je rovna dvanáctině hmotnosti atomu nuklidu ^{12}C) byla právě 1 u:

$$m_u = \frac{m(^{12}\text{C})}{12} = 1,660565 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1 \text{ u}$$

Hmotnosti atomů výše uvedených nuklidů vyjádřené pomocí této vedlejší jednotky hmotnosti jsou:

$$m(^{12}\text{C}) = 12,0000 \text{ u}$$

$$m(^1\text{H}) = 1,00782 \text{ u}$$

Pomocí hmotností atomů a molekul a atomové hmotnostní konstanty můžeme nyní přesně definovat již dříve uvedené veličiny — atomovou (molekulovou) relativní hmotnost.

Relativní atomová hmotnost $A_r(X)$ je dána poměrem hmotnosti $m(X)$ atomu X a atomové hmotnostní konstanty :


$$A_r(X) = \frac{m(X)}{m_u}$$


Je to tedy bezrozměrná veličina, která udává, kolikrát je hmotnost dané částice X větší než atomová hmotnostní konstanta.

V přírodní směsi vodíku je 99,985% izotopu ^1H (jeho $A_r(^1\text{H}) = 1,00782$) a 0,015% izotopu ^2H (jeho $A_r(^2\text{H}) = 2,01410$). Relativní atomová hmotnost přírodní směsi vodíku pak je $A_r(\text{H}) = 1,00797$.


Podobně je definována i relativní molekulová hmotnost $M_r(Y)$ molekuly Y :

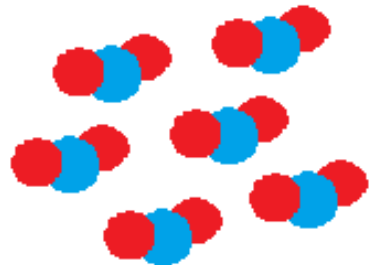
$$M_r(Y) = \frac{m(Y)}{m_u}$$

 **ATOM**


MOLECULE
& compound


MOLECULE
& compound


MOLECULE


COMPOUND


MIXTURE

Atom

nejmenší částice běžné hmoty, částice, kterou už chemickými prostředky dále nelze dělit

Molekula

Jedná o nejmenší částici látky, která má její chemické vlastnosti.

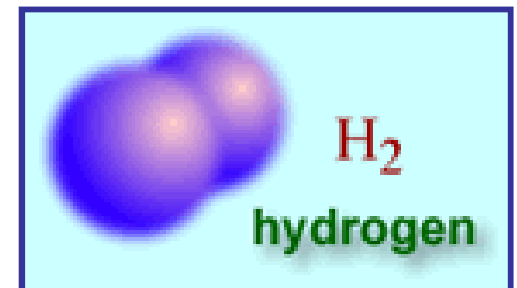
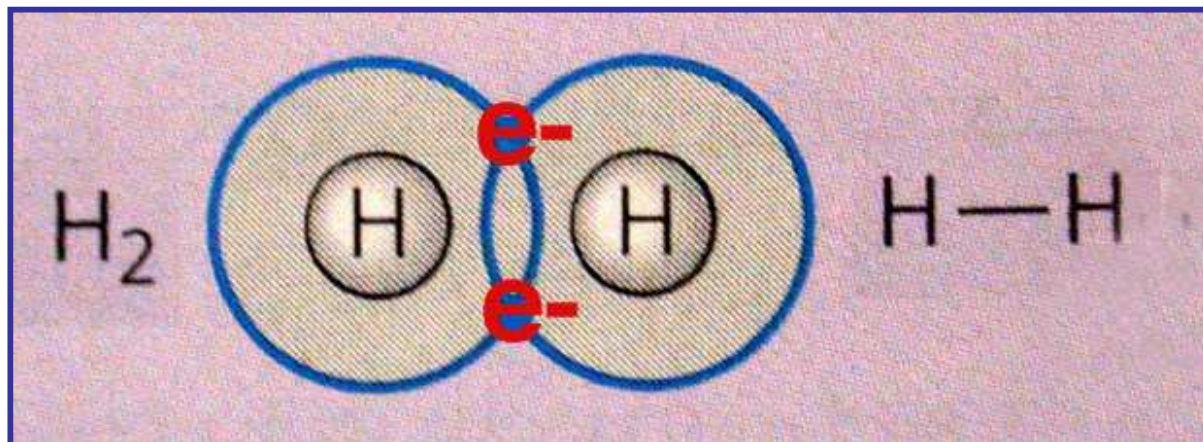
- Může být tvořena jedním, dvěma nebo více atomy.
- Hovoříme o *jednoatomové*, *dvojatomové* nebo *víceatomové* molekule.

Atomy tvořící molekulu mohou být stejné (atomy stejného prvku) nebo různé.

Molekula může být chemickými postupy rozdělena na jednotlivé atomy (jejich chemické vlastnosti už jsou jiné).

Příklad molekuly

- **Molekula vodíku** H_2 protože obsahuje dva atomy vodíku,
- Je to dvojatomová homonukleární molekula, lze ji rozdělit na dva atomy vodíku ($H + H$, resp. $2H$).



Příklad molekuly

- Chemické vlastnosti H_2 a H jsou odlišné přestože se jedná o stejný prvek.
- Vodík se běžně nachází ve stavu dvouatomové molekuly H_2 .
- Atomární vodík H je velmi reaktivní (tzv. radikál).

Ionty - ionizace

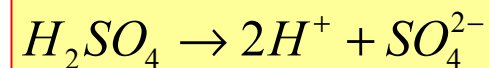
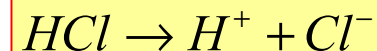
- Pokud dojde k odtržení jednoho či více elektronů z atomového obalu, hovoříme o **ionizaci**.
- Ionizací vzniká **kationt** (kladně nabitý iont).
- Při zachycení elektronu naopak vzniká **aniont**.

Faraday r. 1833

Elektrolýza – chemický rozklad látky elektrickým proudem

Disociace - vznik iontů.

Náboj se rovnoměrně rozdělí na jednotlivé ionty

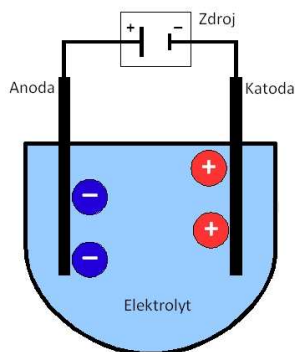


- Množství látky vyloučené na elektrodě závisí pouze na množství prošlého náboje**

$$n \approx Q$$

- Na vyloučení 1 molu jednomocného prvku potřebujeme náboj $F=96\,485\text{ C}$ (Faradayova konstanta)**

$$N_A = \frac{F}{e}$$



počet iontů

$$m = \frac{It}{ve} \cdot \frac{M}{N_A}$$

hmotnost iontu

Ludwig Boltzmann

Pokrokové molekulárně-kinetické představy, kinetická teorie plynů, formulovaná J.C.Maxwellem

Dávno před nástupem kvantové mechaniky, Boltzmann **pro popis systému s velkým počtem molekul užil statistickou metodu ve stavu TDR.**

Jeho přínos spočíval ve využití pravděpodobnosti ve fyzice jako zásady pro vysvětlování. Ukázal, že systém složený z velkých souborů popsatečných pravděpodobností může vykazovat i nové chování.

Boltzmannova konstanta k
vyjadřuje vztah mezi teplotou a energií plynu.

$$\frac{1}{2}m\overline{v^2} = \frac{3}{2}kT$$

$$k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$$

$$PV = nRT$$

$$PV = NkT$$

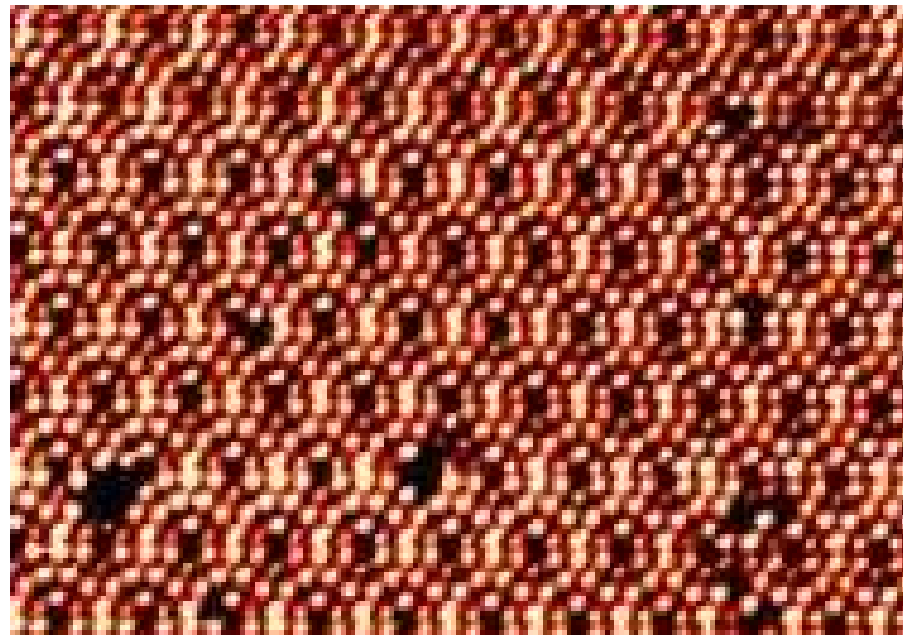
n je látkové množství, N je počet částic

Poznatky kinetické teorie stavby látek

1. Látka jakéhokoli skupenství se skládá z částic (molekul, atomů nebo iontů).

Důkaz:

Křemík pod mikroskopem



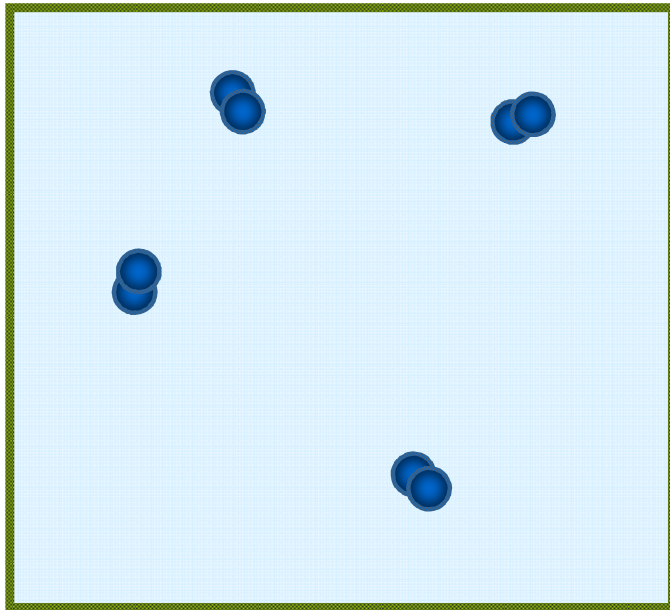
Prostor, již těleso z dané látky zabírá, není těmito částicemi beze zbytku vyplněn.

Látka má nespojitou (diskrétní) strukturu.

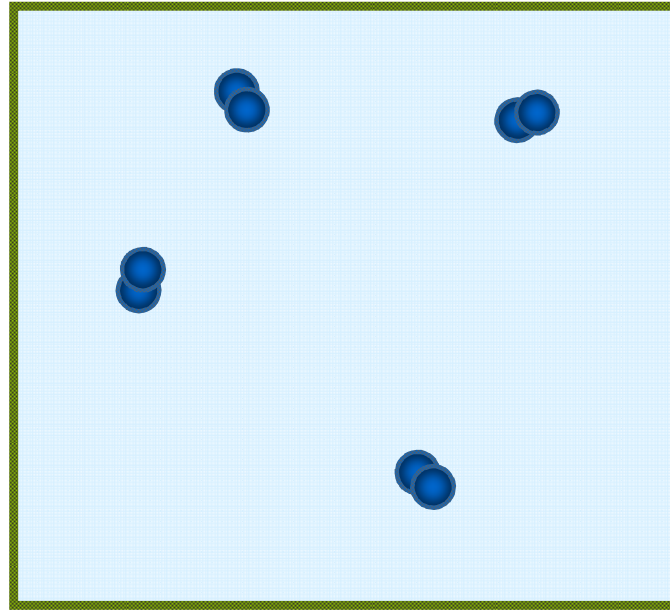
Poznatky kinetické teorie stavby látek

2. Částice v látce se pohybují, jejich pohyb je neustálý a neuspořádaný (chaotický).

*Pohyb molekul plynu
při nižší teplotě*



*Pohyb molekul plynu
při vyšší teplotě*



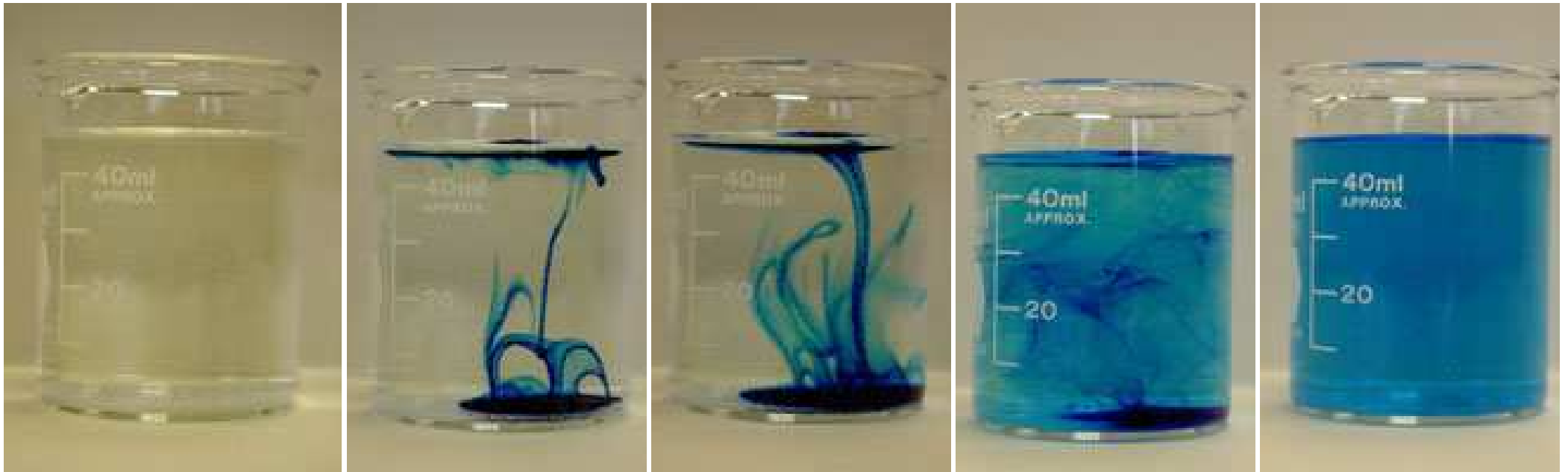
Tepelný pohyb – U

je pohyb částic rychlostmi různých směrů a velikostí.

Poznatky kinetické teorie stavby látek

2. Částice v látce se pohybují, jejich pohyb je neustálý a neuspořádaný (chaotický).

Důkaz:

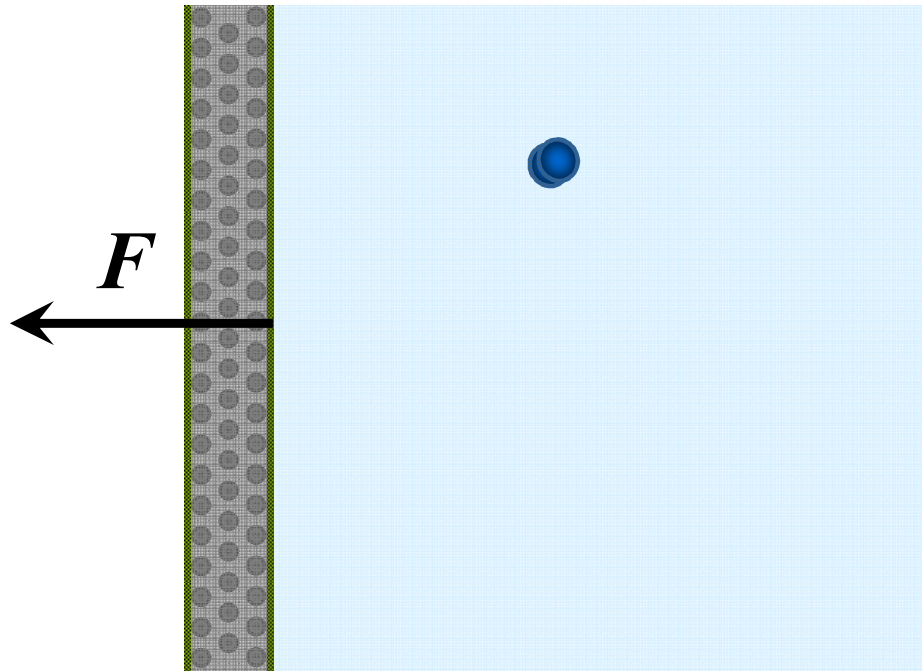


Difuze - samovolné pronikání částic jedné látky mezi částice druhé látky.

Poznatky kinetické teorie stavby látek

2. Částice v látce se pohybují, jejich pohyb je neustálý a neuspořádaný.

Důkaz:



$$p = \frac{F}{S}$$

$$p = \frac{F}{S} = \frac{1}{S} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{N}{V} \cdot S \cdot m \cdot v_{ef}^2 = \frac{1}{3} \cdot \frac{N}{V} \cdot m \cdot v_{ef}^2$$

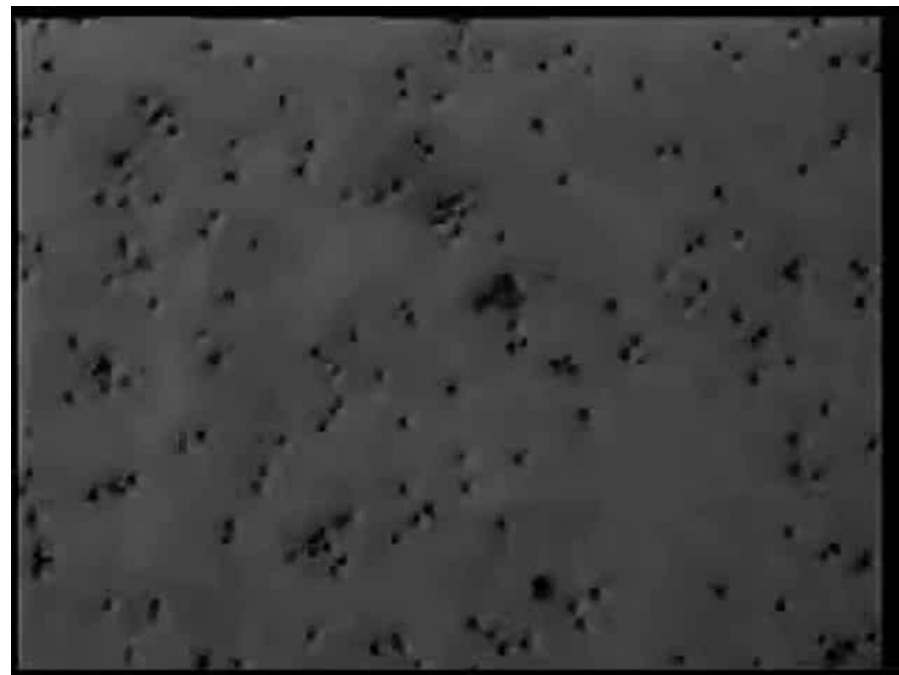
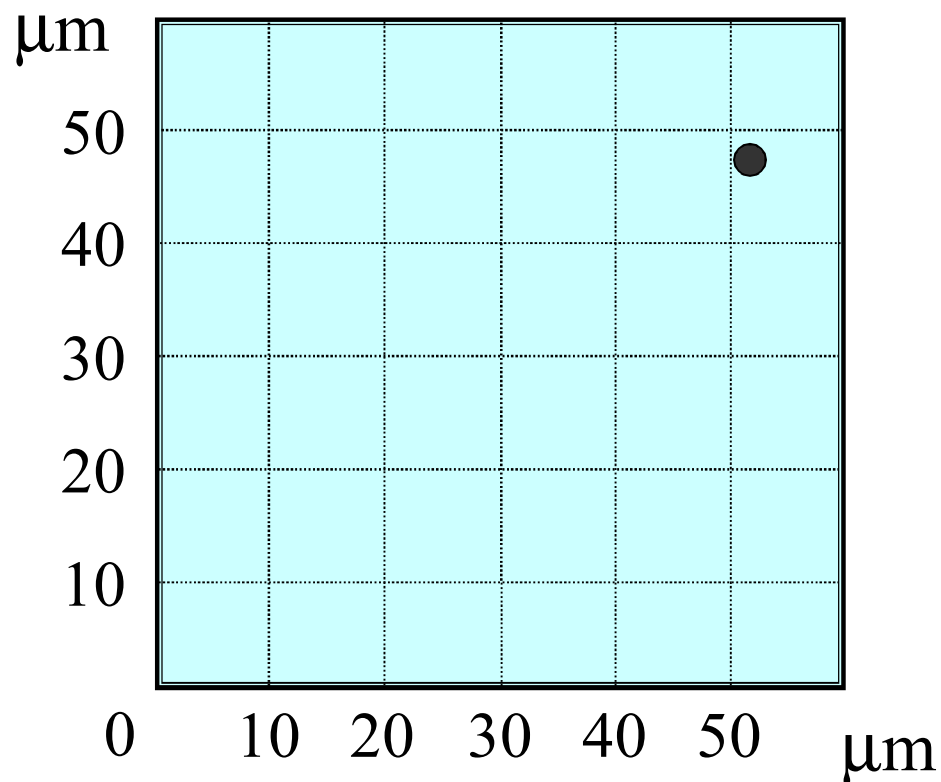
Tlak plynu - srážky molekul plynu s molekulami vnitřních stěn nádoby.

Poznatky kinetické teorie stavby látek

2. Částice v látce se pohybují, jejich pohyb je neustálý a neuspořádaný (chaotický).

Důkaz:

$t = 20 \text{ s}$



Nepravidelný neustálý pohyb Brownovy částice.

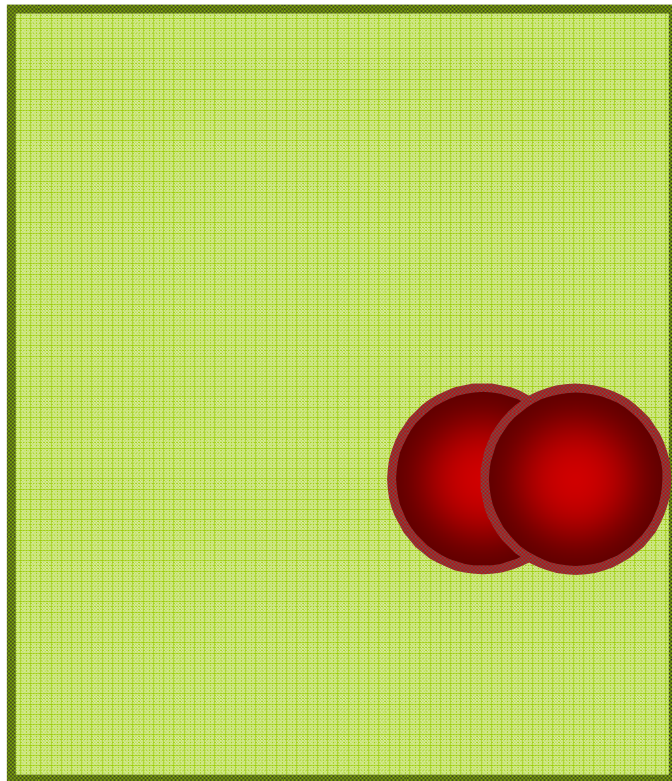
Model plynu:

- molekuly plynu se skládají z atomů,
- střední vzdálenosti molekul za normálních podmínek v porovnání s rozměry molekul jsou velké,
- molekuly se neustále chaoticky pohybují,
- změna rychlosti nastává srážkami molekul s jinými molekulami,
- mezi srážkami se molekuly pohybují přibližně rovnoměrně přímočaře,

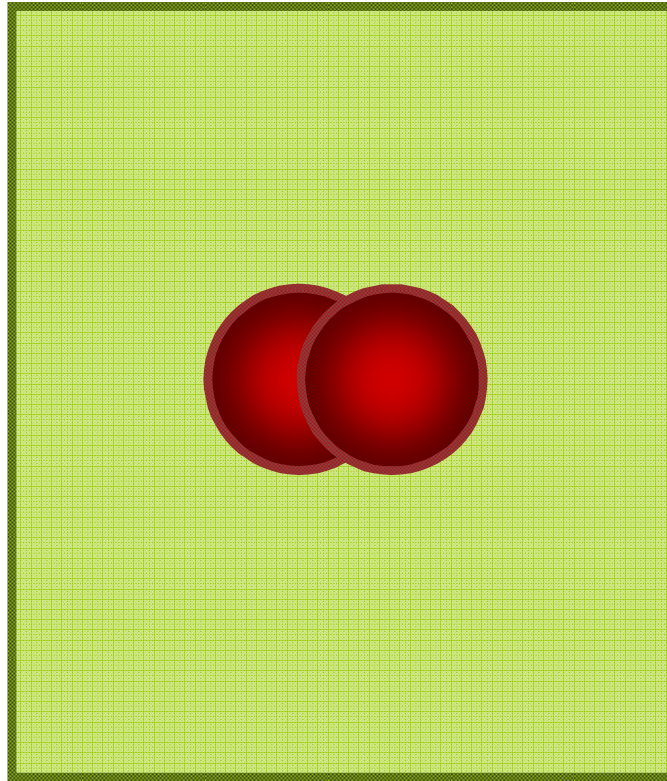
Model plynné látky

Pohyb víceatomových molekul

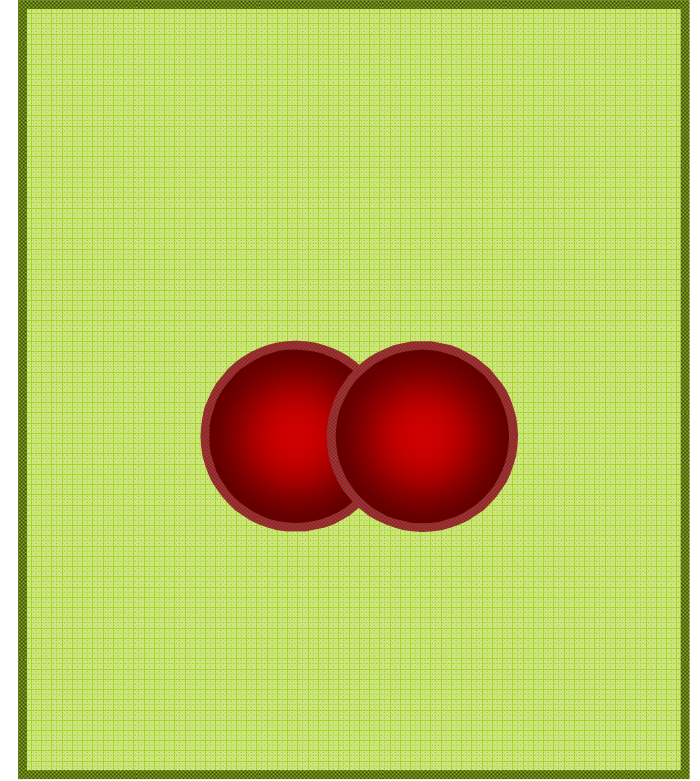
posuvný



rotační



kmitavý

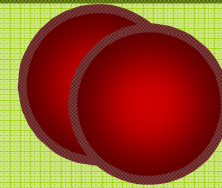


Celkovou energii soustavy molekul tvoří energie kinetická posuvného, rotačního a kmitavého pohybu.

Model plynné látky

Pohyb víceatomových molekul

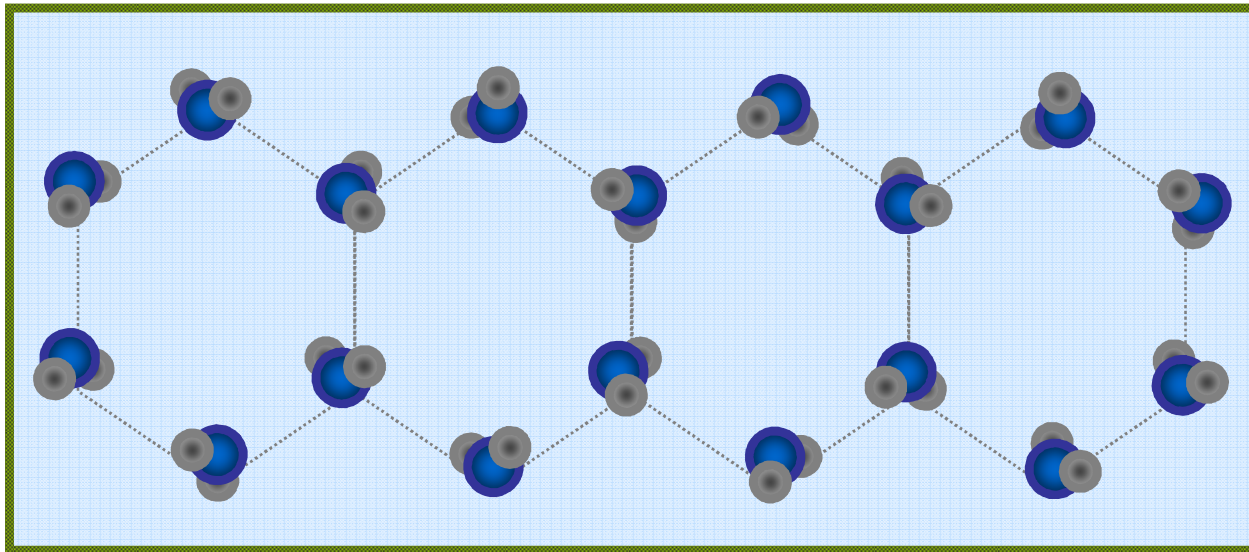
posuvný + rotační + kmitavý



Celkovou energii soustavy molekul tvoří energie kinetická posuvného, rotačního a kmitavého pohybu.

Model pevné látky

- většina látek má částice pravidelně uspořádané,
- přitažlivé síly mezi částicemi způsobují stálý tvar a objem těles z pevné látky,
- částice kmitají kolem rovnovážných poloh,



- potenciální energie soustavy molekul je větší než celková kinetická energie částic.

Model kapalné látky

- kapaliny se vyznačují jistou uspořádaností, ale pouze na krátkou vzdálenost,
- poloha molekuly kapaliny se s časem mění; čím je teplota kapaliny vyšší, tím se mění častěji,
- přeskoky molekul při působení vnější síly na kapalinu jsou převážně ve směru působící síly,
Proto je kapalina tekutá a nezachovává si svůj tvar.
- potenciální energie soustavy molekul je porovnatelná s jejich celkovou kinetickou energií.

Molekulová fyzika na základní a střední škole

Kinetická teorie ideální plyn

Ukažte pokusem difúzi v kapalinách a plynech

[Difuze kapalin](#)

[Difuze par](#)

Demonstrujte Brownův pohyb

[Brownův pohyb v kapalině](#)

Ukažte jevy svědčící o existenci molekulových sil

[Přilnavost](#) a [soudržnost](#)

[Soudržnost olověných válečků](#)

Prokažte existenci a vlastnosti povrchové blány kapalin

[Existence povrchové vrstvy kapaliny](#)

Kapilární jevy

[Závislost kapilárního tlaku na poloměru kulové bubliny](#)

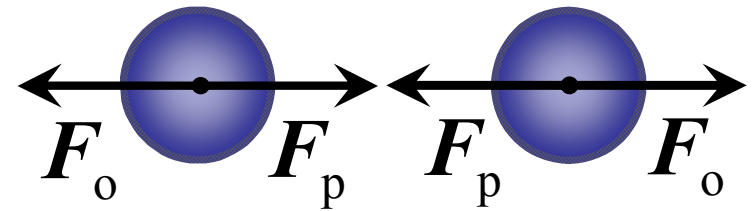
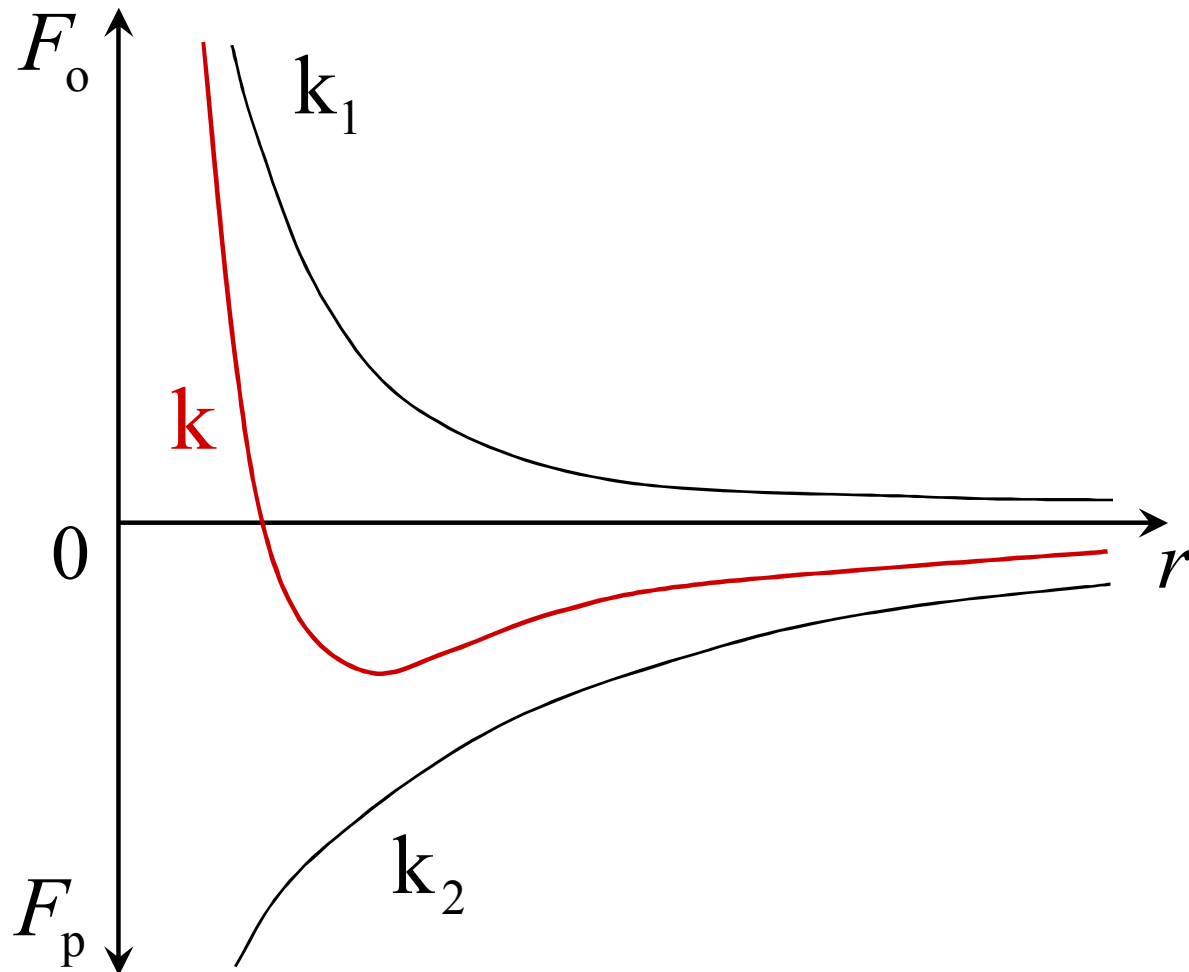
[Závislost výšky při kapilární elevaci na poloměru kapiláry](#)

Viskozita kapalin je projevem mezimolekulových interakcí při jejich toku.

Proč viskozita kapaliny s teplotou klesá?

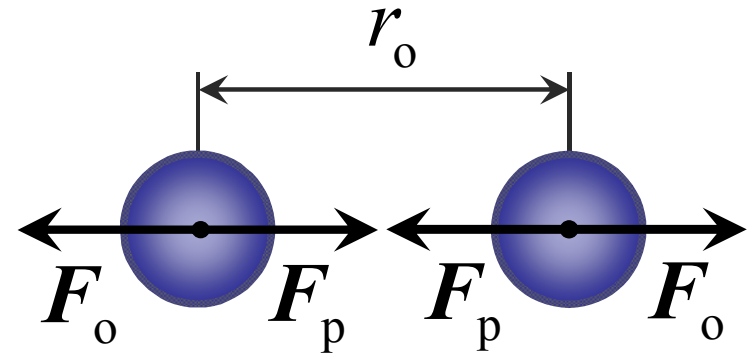
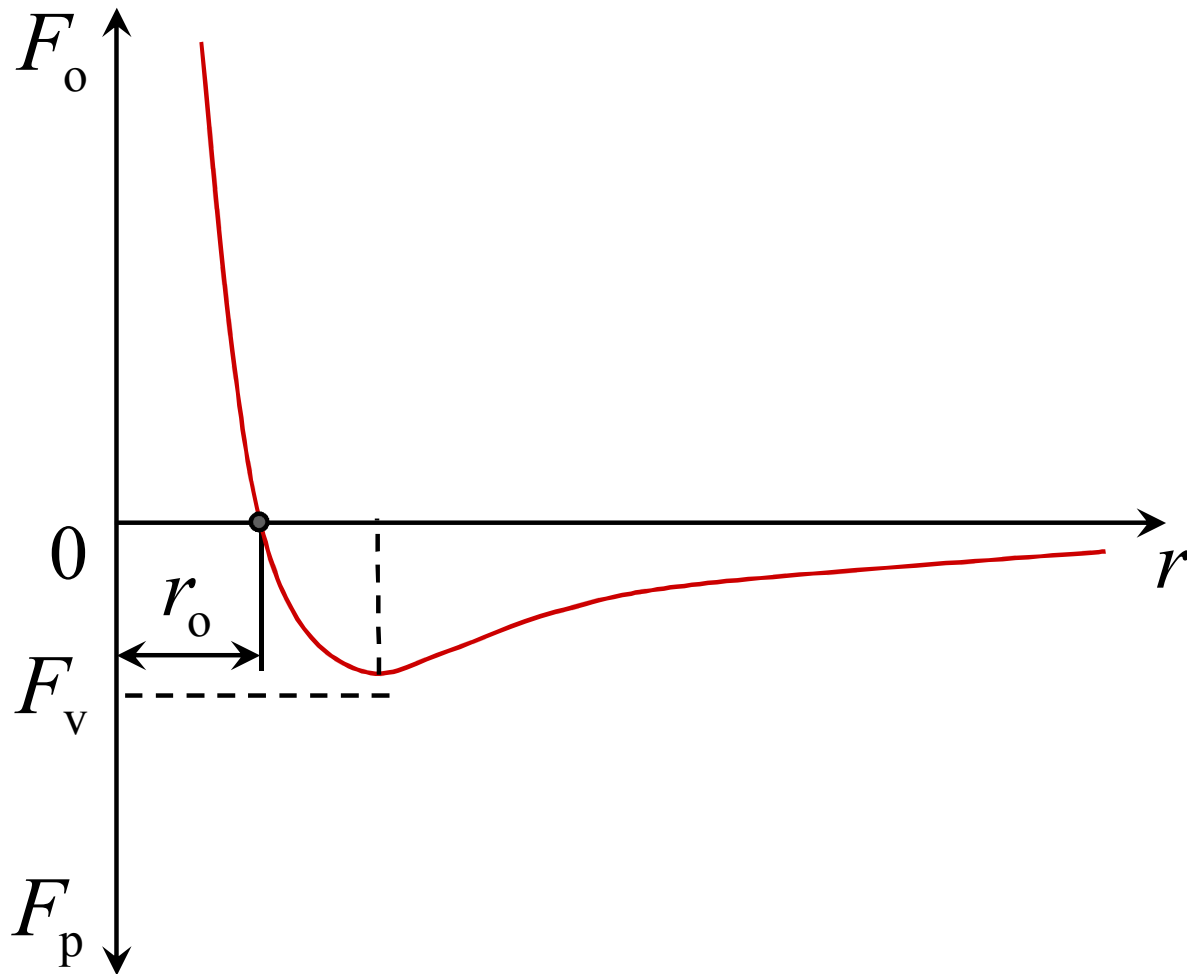
E L E K T R O L Ý Z A

Graf závislosti velikosti sil působících mezi částicemi na jejich vzdálenosti r



k - závislost velikosti **výsledné síly na vzájemné vzdálenosti.**

Graf závislosti velikosti sil působících mezi částicemi na jejich vzdálenosti r



$$F_o = F_p$$

$$F_v = 0 \text{ N}$$

S rostoucím r se přitažlivá síla rychle zmenšuje. Na každou částici působí pouze **silová pole sousedních částic**.

Látky libovolného skupenství se skládají z částic.

Částice se v látkách neustále a neuspořádaně pohybují.

Částice na sebe neustále působí silami, kterou jsou při malých vzdálenostech odpudivé, při velkých vzdálenostech přitažlivé.

Důsledky:

- Přitažlivá síla mezi částicemi se vzdáleností klesá \Rightarrow budeme předpokládat, že **částice je přitahována pouze nejbližšími částicemi** ve svém okolí (například u vody se přitahování projevuje do vzdáleností cca 1nm)
- Částice na sebe vzájemně působí \Rightarrow soustava částic má vnitřní potenciální energii

Potenciální energii částic v rovnovážné poloze nazýváme **vazebná energie**. Její velikost je rovna práci, kterou musí vykonat vnější síly, aby zrušily vazbu mezi částicemi (teoreticky vzdálily částice do nekonečné vzdálenosti).

Vazebná energie určuje strukturu molekul a tím i jejich vlastnosti.

Příště

- Elektron
- Fotoelektrický jev