

Sylabus přednášky C1800 „Chemie pro fyzikální obory“

Jarní semestr 2016/17, hodinová dotace 3+1

1x týdně 2+0 a 1x týdně 1+1

Přednášející: Markéta Munzarová (4 týdny), Jaromír Literák (5 týdnů),
Dominik Heger (4 týdny)

K 12.1. registrováno 18 studentů, z toho 9 povinně 3. semestr B-AF-NAN, 4 dobrovolně 5. semestr B-AF-NAN, 5 zbylých dobrovolně ostatní F obory.

Blok A: Obecná a anorganická chemie, 5 týdnů (4 MM, 1 DH)

A1, 1. týden: Periodický systém a atomové orbitaly

A1.1 J. Dalton: zákon stálých poměrů slučovacích jako cesta zpět k atomové teorii

A1.2 D.I. Mendělejev: uspořádání dle atomové hmotnosti a periodické trendy

A1.3 Chemické vlastnosti ve sloupcích periodické tabulky

A1.4 Rozdělení na prvky hlavních skupin, přechodné a vnitřně přechodné kovy

A1.5 Periodicita první ionizační energie

A1.6 Niels Bohr: čarová spektra atomů odrážejí dovolené hladiny energie

A1.7 M. Planck: částicové vlastnosti vln, L. de Broglie: vlnové vlastnosti částic

A1.8 E. Schrödinger: atomové orbitaly jako důsledek vlnových vlastností

A1.9 Vztahy mezi kvantovými čísly, závislost energie na n a l

A2, 2. týden: Struktura atomů

A2.1 W. Pauli: elektronu přísluší spin, F. Hund: vyšší multiplicita stabilizuje

A2.2 Obsazení hladin dle rostoucích energií, Pauliho principu a Hundova pravidla

A2.3 Elektronové konfigurace prvků ve skupinách

A2.4 Svante Arrhenius: disociace na ionty, iontová vazba

A2.5 Iontové náboje pro přechodové kovy

Periodicita vlastností vzhledem k atomové hmotnosti: kovy a nekovy, vysoká a nízká reaktivita, skupenství, mono- a diatomické prvky, stechiometrie halogenidů a binárních hydridů. Nepravidelnosti v periodických trendech a diagonální podobnosti prvků. Struktura atomu a elektronové konfigurace. Elektrony a jádra. První ionizační energie prvků a jejich periodicita. Postupné ionizační energie a indicie pro slupkovou strukturu elektronového obalu. Čarové spektrum vodíku, Rydberg-Balmerova rovnice a Bohrov model atomu. Vlnové vlastnosti elektronu a důsledky pro dovolené Bohrovy orbity. Čistě kvantový popis Schroedingerovou rovnicí, atomové orbitaly a kvantová čísla, závislost energie na n a l . Spin elektronu a Pauliho princip.

<P>

A2. Molekulové orbitály

<P>

Elektronové konfigurace atomů: výstavbový princip, Klechowského a Hundovo pravidlo. Přejchodové kovy: výjimky v~obsazování hladin, rozdíly mezi neutrálními atomy a jejich ionty, pochopení pomocí konceptu výměnné interakce. Periodicita atomových poloměrů. Ionizační energie, elektronová afinita, Paulingova elektronegativita a jejich periodicita. Chemická vazba: Lewisův popis a hybridizace, molekulové orbitály (MO) dvou- a tříatomových molekul, MO teorie pevných látek, tvary molekul – metody VSEPR a MO.

A3. Kyseliny a báze, oxidace a redukce. Brønstedova teorie kyselosti, acidobazické rovnováhy ve vodě, periodické trendy v~Brønstedovské kyselosti, Lewisova definice kyselin a bází. Reakce Lewisových kyselin a bází: základní typy reakcí, koncept "Hard and soft acids and bases" (HSAB).

<P>

A4. Prvky bloků s a p

A4. Přejchodové kovy. Koordinace oktaedrická a odvozené struktury vzniklé distorzí. Druhy ligandů, teorie krystalového a ligandového pole. Reakce komplexů: koordinační rovnováhy, rychlosti a mechanismy substituce ligandů.

<P>

<P>

Blok B: Organická chemie a polymery, 5 týdnů (Jaromír Literák)

<P>

C1. Úvod do organické chemie. Znázorňování organických molekul. Vazebné poměry uhlíku. Hybridizace, vazebné úhly. Konjugace, delokalizace, rezonanční struktury. Polarita a polarizace, rozložení náboje v~molekulách. Základy názvosloví. Hierarchie funkčních skupin. Prostorové znázorňování molekul. Izomerie. Konformace a konfigurace. Geometrická izomerie alkenů a cyklických alkanů. Konformace ethanu, butanu, cyklopentanu a cyklohexanu. Symetrie a chiralita. Význam chiralit, homochiralita života.

<P>

C2. Zápis reakcí a nukleofilní substituce a adice. Zápis chemických reakcí organických molekul. Homolýza a heterolýza. Elektrofily a nukleofily. Mechanismus reakce a jeho zápis – "Arrow pushing". Redoxní změny. Nukleofilita a bazicita. Síla organických kyselin a bází a faktory, které je ovlivňují. Nukleofilní substituce (halogenderiváty, alkoholy, aminy). Stabilita karbokationtů. Stereospecifita reakce. Nukleofilní adice na karbonylovou skupinu. Michaelova adice. Keto-enol tautomerie a odhad pozice rovnováhy.

<P>

C3. Elektrofilní adice a eliminační reakce. Adiční reakce alkenů a alkynů. Regio- a stereospecifita adičních reakcí. 1,2- a 1,4-adiční reakce konjugovaných dienů.

Eliminační reakce, základní mechanismy, stereospecifita. Aromaticita. Substituce elektrofilní aromatická. Reakce řízené symetrií hraničních orbitalů. Radikálová substituce.

<P>

C4. Reakce karbonylových sloučenin a karboxylových kyselin a jejich derivátů. Acetaly, iminy, jejich význam v~biochemii. Aldolové reakce a jejich uplatnění v~biochemických reakcích. Substituční a funkční deriváty karboxylových kyselin. Adičně-eliminační mechanismus.

<P>

C5. Základní strukturní motivy v~biochemii a jejich funkce. Konformace, dynamika a funkce proteinů, tvorba a ukládání metabolické energie, genetická informace: uchovávání, předávání a exprese.

<P>

Blok C: Fyzikální chemie, 3 týdny (Dominik Heger)

<P>

B1. Mechanismy chemických reakcí. Příklad různého průběhu reakce na hyperploše pro SN1 a SN2. Chemická kinetika vs. reakční dynamika jako ukázka makroskopicky pozorovatelné veličiny a mikroskopické představy. Koncept povrchu potenciální energie (PES), důležité body PES - minima, transitní stavy, maxima, aktivační energie.

<P>

B2. Průběh chemické reakce jako cesta na PES a jeho termodynamika. Princip mikroskopické reversibility. Kyselá a basická katalýza – obecná a specifická kyselina a báze. Teorie chemické reaktivity. Teorie tranzitního stavu, Eyringova rovnice, Srážková teorie, Arrheniova rovnice.

<P>

B3. Chemická kinetika. Reakční rychlost a rychlostní konstanta. Rozsah reakce. Řád reakce a jeho určení. Poločas a střední doba reakce. Elementární reakce a jejich molekularita. Následné reakce. Předřazená rovnováha. Aproximace stacionárního stavu, rychlost určující krok. Chemická rovnováha. Kineticky a termodynamicky řízené reakce.