Testové otázky k předmětu C1800, jarní semestr 2018

1. Periodicita atomových vlastností. Hladiny energie pro atom H. Nejstejné energie orbitalů typu s a typu p – koncept pronikání a stínění. Slaterova pravidla pro stínění – umět použít. Na základě nich umět vysvětlit trendy v orbitálních energiích a atomových plus iontových poloměrech. Elektronové konfigurace atomů: výstavbový princip, Pauliho princip, Hundovo pravidlo, pojem výměnné interakce. Projevy výměnné interakce v ionizačních potenciálech p prvků. Periodicita: znát příklady periodicky se měnících vlastností a toho, ja kse v periodické tabulce mění.
2. Chemická vazba.Vazby typu sigma a pí (čím se liší). **Lewisův popis vzniku vazeb** v molekulách N2 a C2 (párování elektronů v ne zcela zaplněných AO).Koncept **hybridizace atomových orbitalů –** podstata, výhody a nevýhody**.**

Umět zapsat Lewisovy struktury jednoduchých sloučenin p prvků.

1. **Tvary molekul. Umět použít teorii VSEPR k určení tvarů jednoduchých molekul.**
2. **Teorie molekulových orbitalů.** Limitace teorie valenčních vazeb (u typických molekul jako O2, B2H6, XeF2, XeF4, XeF6 umět vysvětlit, v čem je problém lokalizovaného popisu vazeb). Umět nakreslit schéma MO pro molekuly typu A2 bez s-p interakce a s s-p interakcí**.** Umět na základě toho vysvětlit elektronové konfigurace molekul **Be2- až O2+ a O2 až Ne2+.** Na základě obsazení hladin a charakterů MO umět vysvětlit trendy ve vazebných délkách a vazebných energiích (tj. budou např. zadána data z tabulky konfigurací jednoltivých molekul zahrnující vazebné délky a energie a bude vyžadováno vysvětlení). S tím související pojem řád vazby (jak se určí pomocí obsazených vazebných a protivazebných MO).
3. **MO teorie planárních uhlovodíků.**

Umět nakreslit rozložení hladin energie a příslušné MO pro následující systémy:

(v případě nejasností viz pdf Burdett1984.pdf, strana 8 v adresáři LITERATURE studijních materiálů).

****

1. **Elektronová struktura pevných látek.**

**Umět k následujícímu grafu správně dokreslit orbitaly. (popř. Viz Burdett1984, str. 31)**

**Umět nakreslit polohy valenčního vs. vodivostního pásu pro typické zástupce různých skupin látek z hlediska elektrické vodivosti.**

1. Prvky skupin s, p, d: **Vodík**. Znát nejčastější formy výskytu H na Zemi (H2O, uhlovodíky) a možné náboje vodíku ve sloučeninách (1, 0 … kovalentní vazby, -1 .. hydridy). Mezi kterými atomy mohou vznikat vodíkové vazby? (2 silně elektronegativní atomy, H mezi nimi). Elektronová struktura molekuly H2 z teorie MO a příbuzené molekuly (H2+, H2-, He2+ a hypotetická He2). Závislost vazebné energie na mezijaderné vzdálenosti. Umět z obrázku VF rozpoznat vazebný a protivazebný MO v molekulovém iontu H2+.
2. **Alkalické kovy**. Fyzikální vlastnosti – umět vysvětlit nízké body tání na základě elektronové struktury. Chemické vlastnosti: Umět porovnat Li s okolními prvky:
3. Diagonální podobnost s Mg (v čem? V atomových i iontových poloměrech) a jaké to má důsledky (Li+ zastupuje v hořečnatých minerálech Mg2+).
4. Odlišnost Li od níže ležících prvků skupiny (znát důsledky malé velikosti iontu Li+).
5. **Uhlík.** Umět rozpoznat předložené fáze uhlíku a hybridizace AO, ve kterých se v nich atom C nachází.
6. **Uhlík vs. křemík.** Porovnání velikostí C vs. Si, četnost pozorovaných C=C and C=O vs. Si=Si and Si=O vazeb. Důsledky pro existenci O=C=O jako molekuly vs. sítí –O–Si–O– jako polymeru.
7. **Skupina dusíku.** Molekula NH3 jako prototyp vazeb v trigonálně pyramidálním systému.
8. **Skupina kyslíku.** Molekula H2O a její MO popis: Mezi nakreslenými MO umět rozpoznat vazebné, protivazebné a nevazebné, pomocí korelačního diagramu umět vysvětlit lomenou strukturu.