

# Pojem prvku a atomu v historii chemie

Pojem **prvek** a **atom** se v historii vyvíjel odděleně

**6. st. př. n. l. Thales, Anaximander, Anaximenes, Herakleitos**

Hmota sestává z **neměnitelných** jednoduchých základních kamenů – prvků

**Tháles Miletský (640 - 546 př. n. l.) základní prvek = voda**

**Anaximenes (~570 př. n. l.) základní prvek = vzduch**

**Herakleitos (540 - 475 př. n. l.) základní prvek = oheň**

## Pojem prvku v historii chemie

**Empedokles (490 - 430 př. n. l.)**

**4 základní prvky = oheň, voda, vzduch, země**

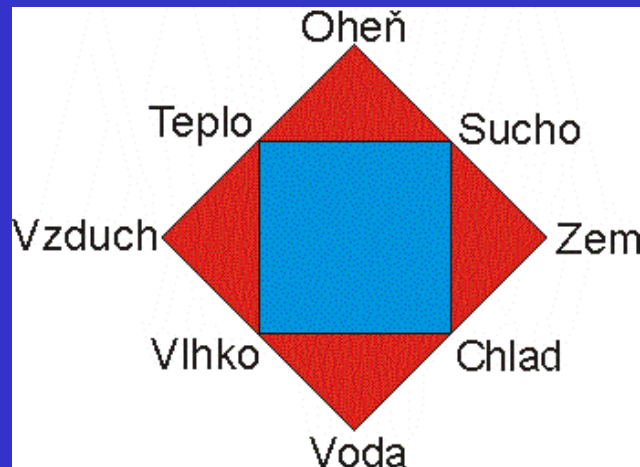
**a 2 základní síly: přitažlivá a odpuzivá**

(až 1783 H. Cavendish dokázal, že voda je sloučenina H a O)

**Aristoteles (384 - 322 př. n. l.) 4 základní prvky + ether**

Prvek je nositel vlastností

Kombinace vlastností



## Pojem prvku v historii chemie

Alexandrie: řecká teorie + egyptská praktická “chemie”

Arabská alchymie, přenesena do Evropy

Alchymistické prvky: země, voda, oheň, vzduch a navíc  
Au, Ag, Hg, Fe, Sn, Cu, S, sůl

Au

Ag

electrum (Sn amalgam)

Fe

Cu

Sn

Pb

Slunce

Měsíc

Jupiter

Mars

Venuše

Merkur

Saturn

# Pojem prvku v historii chemie

**Philippus Aureolus Paracelsus (1493–1541)**

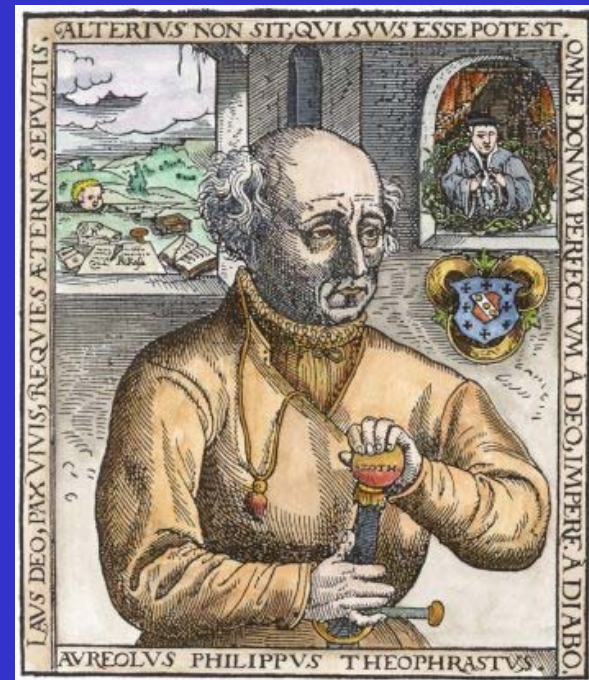
**tři elementární substance: rtuť, síra a sůl**

Moravský Krumlov - Jan z Lipé

**Rtuť = tekutost a kovový charakter**

**Síra = hořlavost**

**Sůl = inertní element**



## Pojem prvku v historii chemie

**1661 Robert Boyle - přírodovědecká definice prvku:**  
Prvek je látka, která se nedá rozložit na jiné látky.

**1789 Lavoisier 21 prvků**

**1808 Dalton 36 prvků – první spojení atom/prvek**  
stejné atomy mají stejnou hmotnost, násobky H

**1813-14 Berzelius 47 prvků**

**1869 Mendělejev tabulka 63 prvků**

**2009 Periodická tabulka 118 prvků (chybí 117)**  
**Pojmenovány po 112**



## Pojem atomu

**Leukippos** (480-420 př. n. l. )

Je hmota spojitá nebo nespojitá?

Svět sestává z hmoty a prázdnoty, je tvořen z nedělitelných částic.

**Demokritos** (470-380 př. n. l.)

Pojem atom

atomos = nedělitelný, atomy mají tvar, velikost a hmotnost, které určují vlastnosti látek. Existuje nekonečné množství nekonečného počtu druhů atomů, které jsou v neustálém pohybu a kombinují se.

Dalších 2000 let odmítáno - 1805 **Dalton**

1805

## Daltonova atomová teorie

- Každý prvek se skládá z malých nedělitelných a nezničitelných částic – atomů (ne pro jaderné přeměny).
- Atomy stejného prvku mají identické vlastnosti a hmotnost (ne pro nuklidy), atomy různých prvků se podstatně liší ve vlastnostech a hmotnosti (ne pro izobary).
- Sloučeniny jsou tvořeny spojením atomů různých prvků, pro danou sloučeninu vždy stejné typy atomů ve stejném poměru.
- Chemická reakce je reorganizace vzájemného uspořádání atomů.



John Dalton  
(1766 - 1844)

# Daltonovy symboly atomů/prvků

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36

- |               |              |                |                |                |
|---------------|--------------|----------------|----------------|----------------|
| 1. Oxygen.    | 9. Silver.   | 17. Bismuth.   | 25. Cerium.    | 33. Silicon.   |
| 2. Hydrogen.  | 10. Mercury. | 18. Antimony.  | 26. Potassium. | 34. Yttrium.   |
| 3. Nitrogen.  | 11. Copper.  | 19. Arsenic.   | 27. Sodium.    | 35. Beryllium. |
| 4. Carbon.    | 12. Iron.    | 20. Cobalt.    | 28. Calcium.   | 36. Zirconium. |
| 5. Sulphur.   | 13. Nickel.  | 21. Manganese. | 29. Magnesium. |                |
| 6. Phosphorus | 14. Tin.     | 22. Uranium.   | 30. Barium.    |                |
| 7. Gold.      | 15. Lead.    | 23. Tungsten.  | 31. Strontium. |                |
| 8. Platinum.  | 16. Zinc.    | 24. Titanium.  | 32. Aluminium. |                |



## Vývoj definice atomových hmotností

J. Dalton  $H = 1$

J. J. Berzelius  $O = 100$

J. S. Stas  $O = 16$  (pro přírodní směs izotopů) chemická stupnice

fyzikální stupnice  $^{16}\text{O} = 16$  ZMATEK

**1961**

Atomová hmotnostní jednotka =  $1/12$  hmotnosti atomu nuklidu  $^{12}\text{C}$

$1 \text{ amu} = 1 \text{ u} = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

# Atomová hmotnost

1814 Tabulka relativních atomových hmotností 41 prvků

O = 100

1811 Zavedení zkratk jako symbolů prvků

Li Lithium

Be Beryllium

Ga Gallium (ne Galium)

Y Yttrium

Te Tellur

Tl Thallium

Ds Darmstadtium

(Cp) Copernicium

Vzorce sloučenin

H<sup>2</sup>O dnes H<sub>2</sub>O



Jöns Jacob Berzelius  
(1779 - 1848)

# Periodická tabulka prvků

A blank periodic table grid with a yellow background and black borders. The grid is composed of 7 rows and 18 columns. The first two columns are separated from the rest of the table by a large gap, representing the noble gases. The first row has one cell in the first column and one cell in the 18th column. The second and third rows have two cells each in the first two columns and six cells each in the last six columns. The fourth, fifth, sixth, and seventh rows each have 18 cells in total, with the first two columns separated from the rest of the table by a large gap.

## Definice prvku

Soubor atomů se stejným protonovým číslem



**Nuklid = soubor atomů se stejným A a Z**

**Prvek = soubor atomů se stejným Z**

## Chemické látky - složení

Druh atomů	A nebo B	prvky
	A a B nebo A a C	sloučeniny

Relativní počet atomů

AB nebo AB<sub>2</sub>

→ empirický vzorec

(CO nebo CO<sub>2</sub>)

Absolutní počet atomů

A<sub>2</sub>B<sub>2</sub> nebo A<sub>6</sub>B<sub>6</sub>

→ molekulový vzorec

(C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> nebo C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)

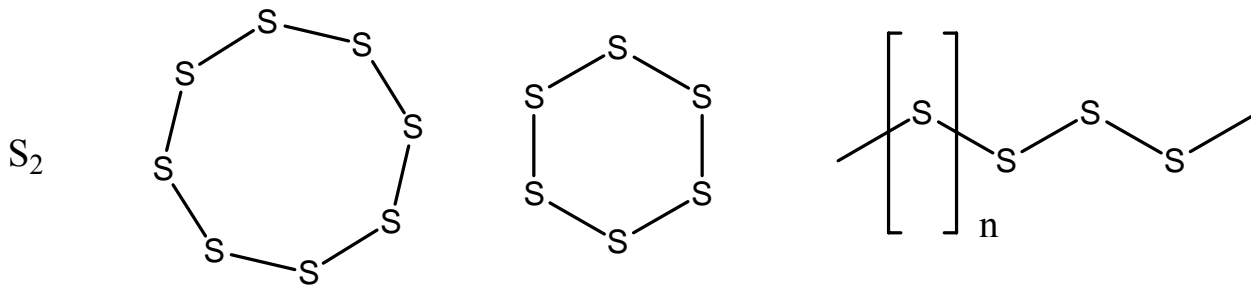
[CoN<sub>6</sub>H<sub>15</sub>O<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>

# Prvky – struktura – allotropie

Struktura (vazby mezi atomy)

→ strukturální vzorec

Vazebná topologie      allotropie (prvky):  $O_2$ ,  $O_3$



# Sloučeniny – struktura – konstituce

Vazebná topologie

→ strukturní (konstituční) vzorec

topologická (konstituční, vazebná) izomerie (sloučeniny)

A-B-C nebo A-C-B



HOCN, HNCO, HONC



# Topologická (konstituční, vazebná) izomerie



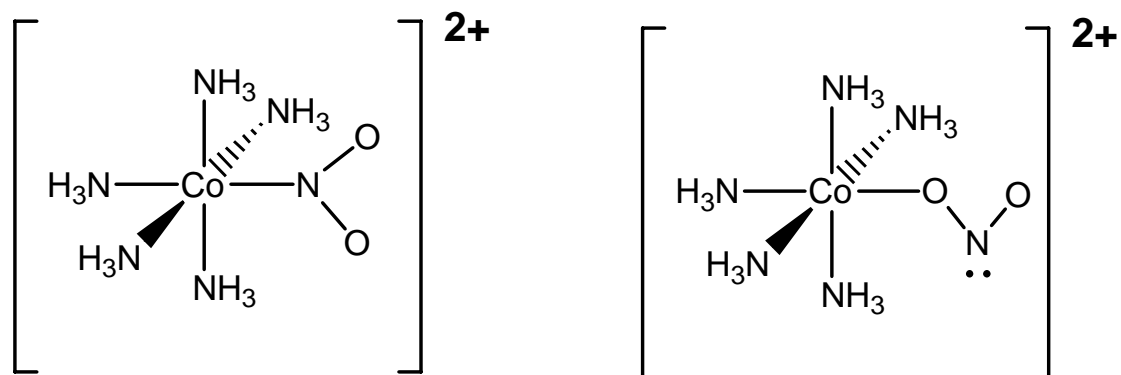
217 izomerů  $C_6H_6$

$\Sigma 217$



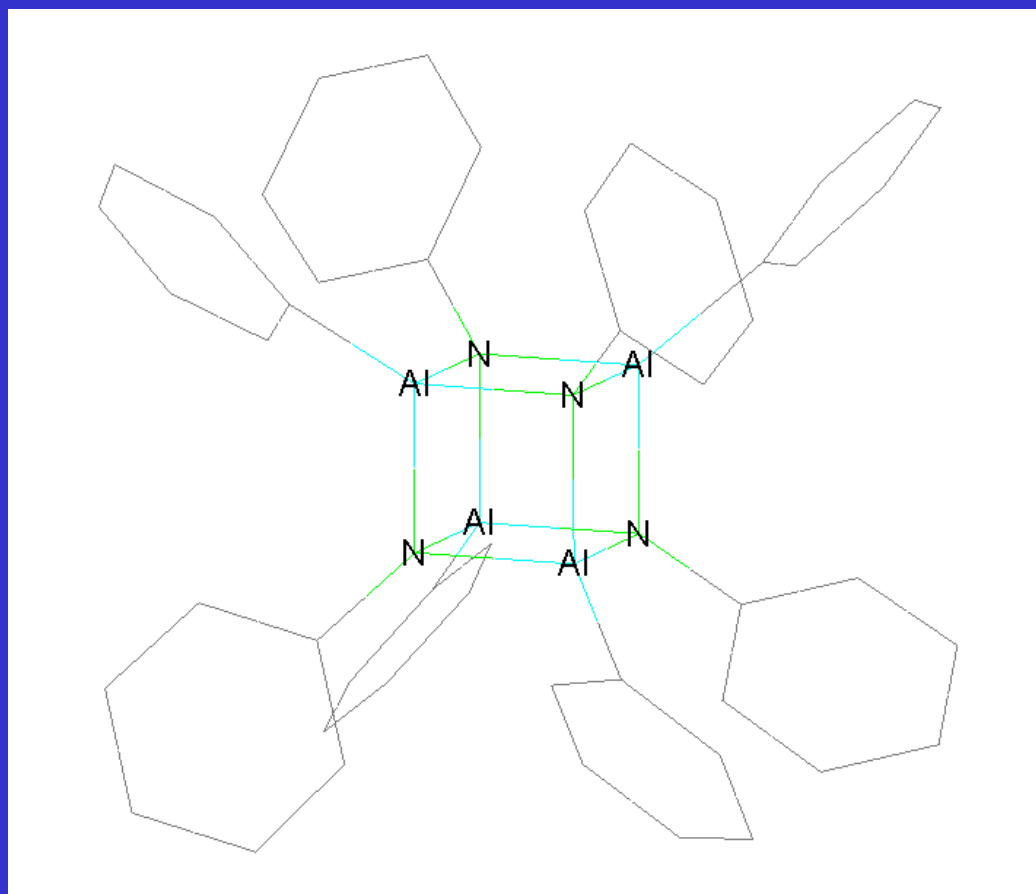
# Molekulární tvar

Molekulární tvar → geometrický vzorec

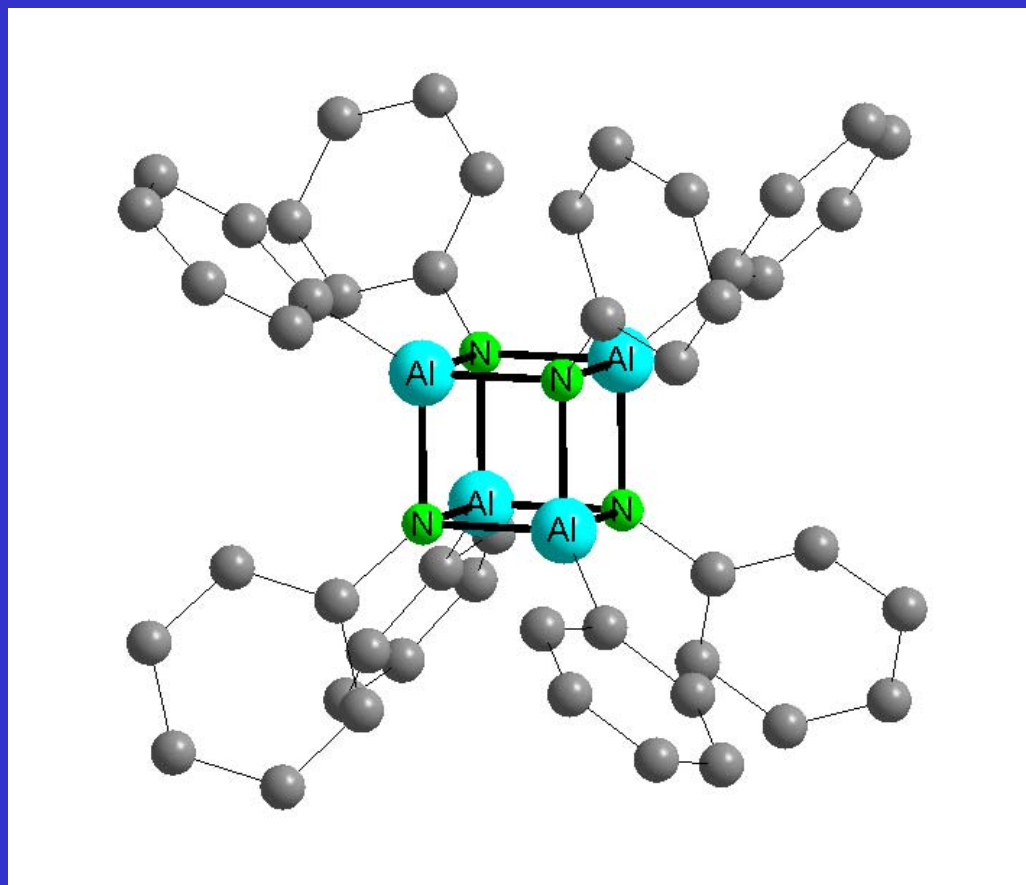


Vazebná izomerie NO<sub>2</sub> skupiny

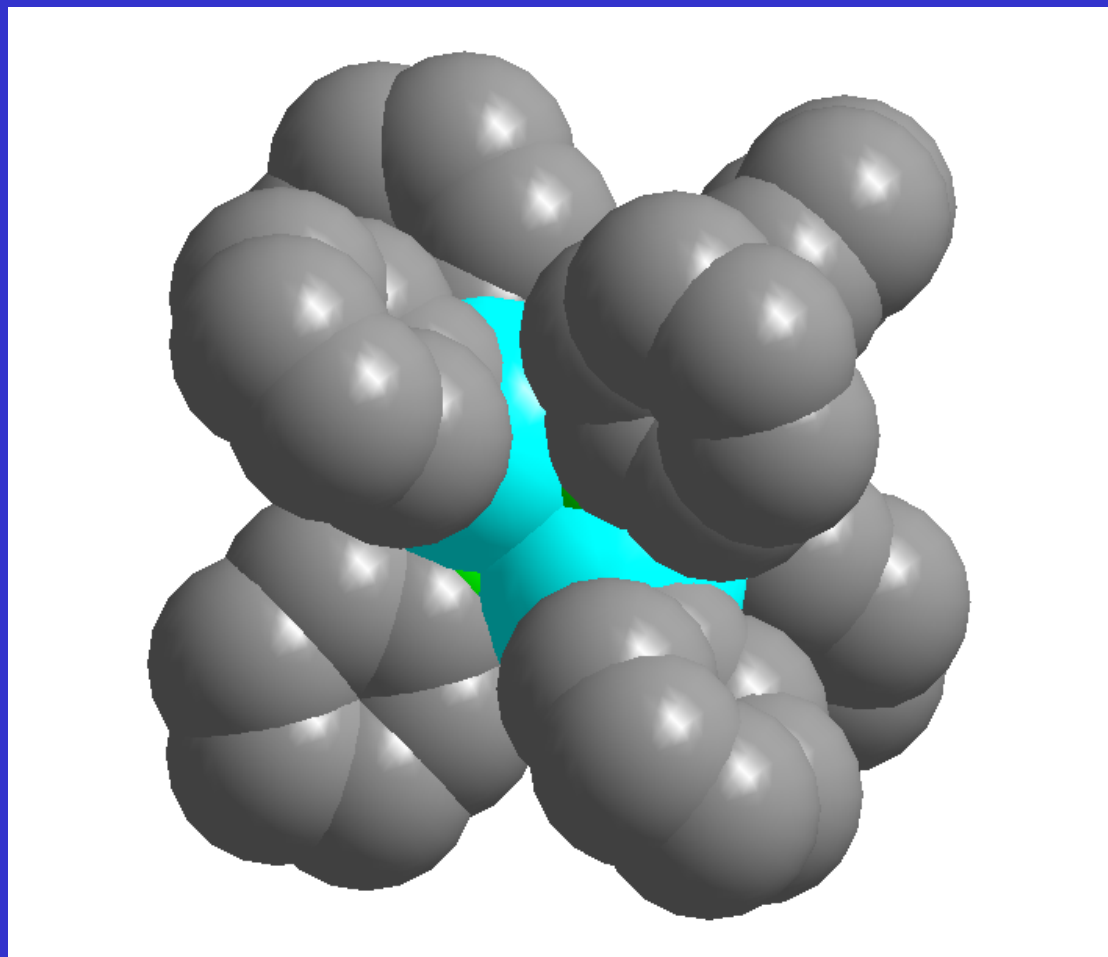
# Sloučeniny – struktura – konstituce



# Sloučeniny – struktura – konstituce



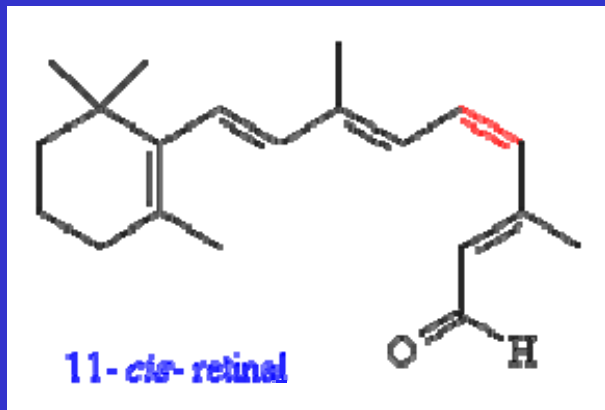
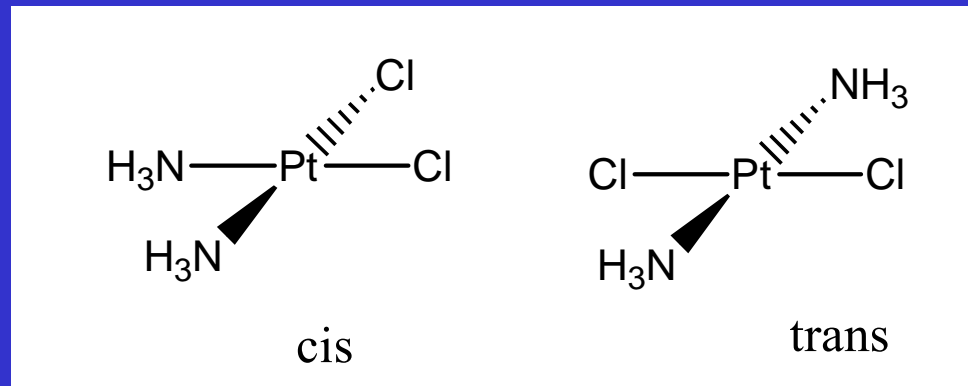
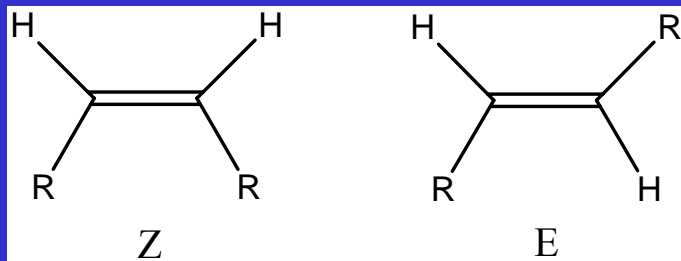
# Sloučeniny – struktura – konstituce



# Molekulární tvar

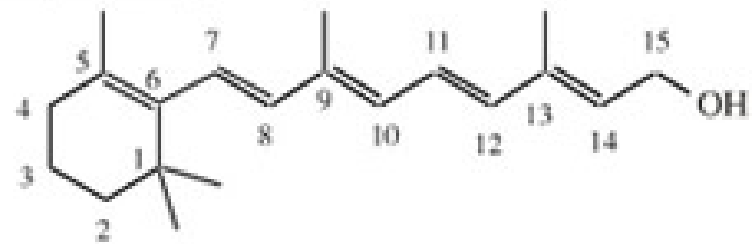
Molekulární tvar → geometrický vzorec

geometrické izomery

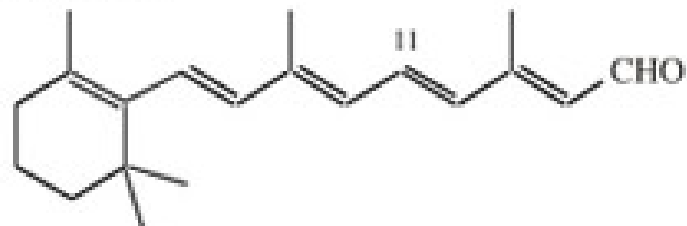


Molekulární tvar  
- fyzikální vlastnosti  
- chemická reaktivita

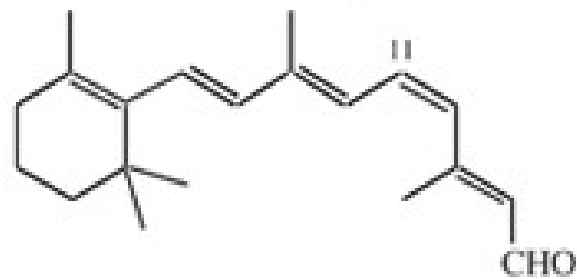
Retinol (vitamin A)



All *trans*-Retinal



11-*cis*-Retinal

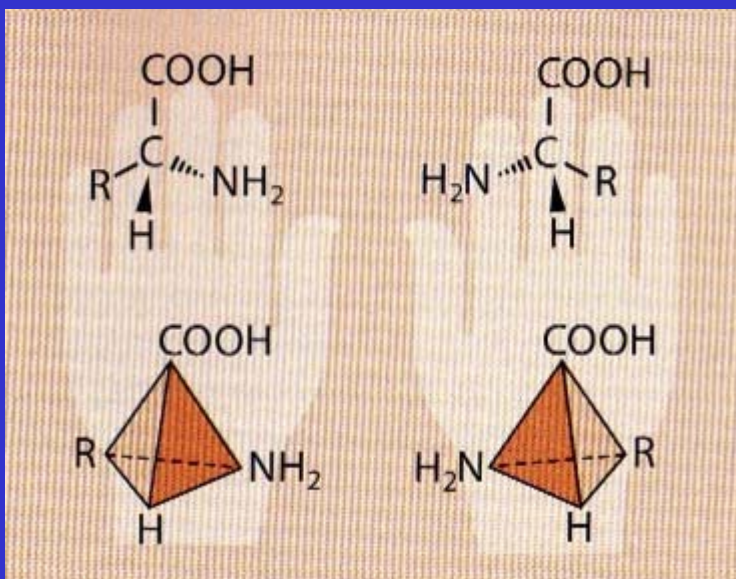


# Molekulární tvar

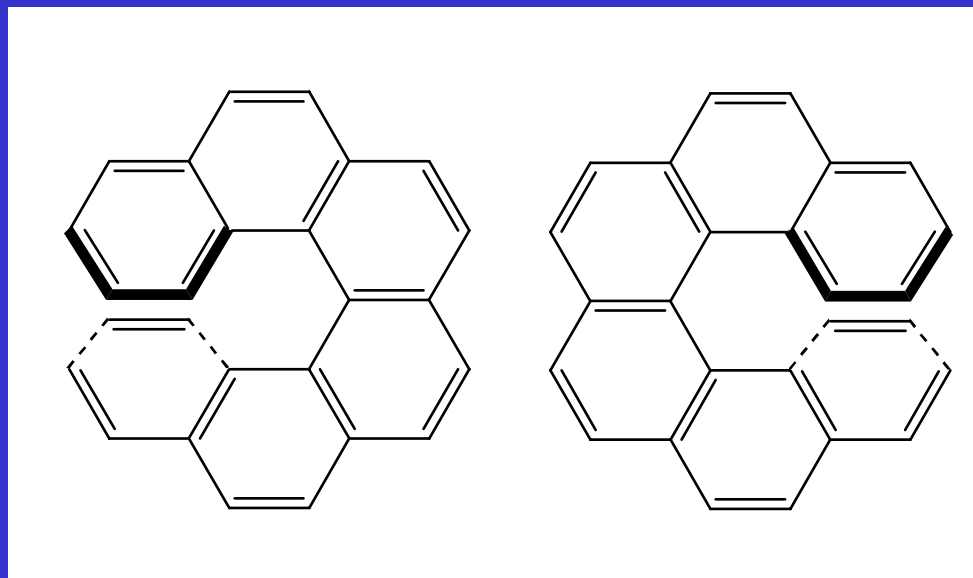
Molekulární tvar → geometrický vzorec

Optické izomery – enantiomery

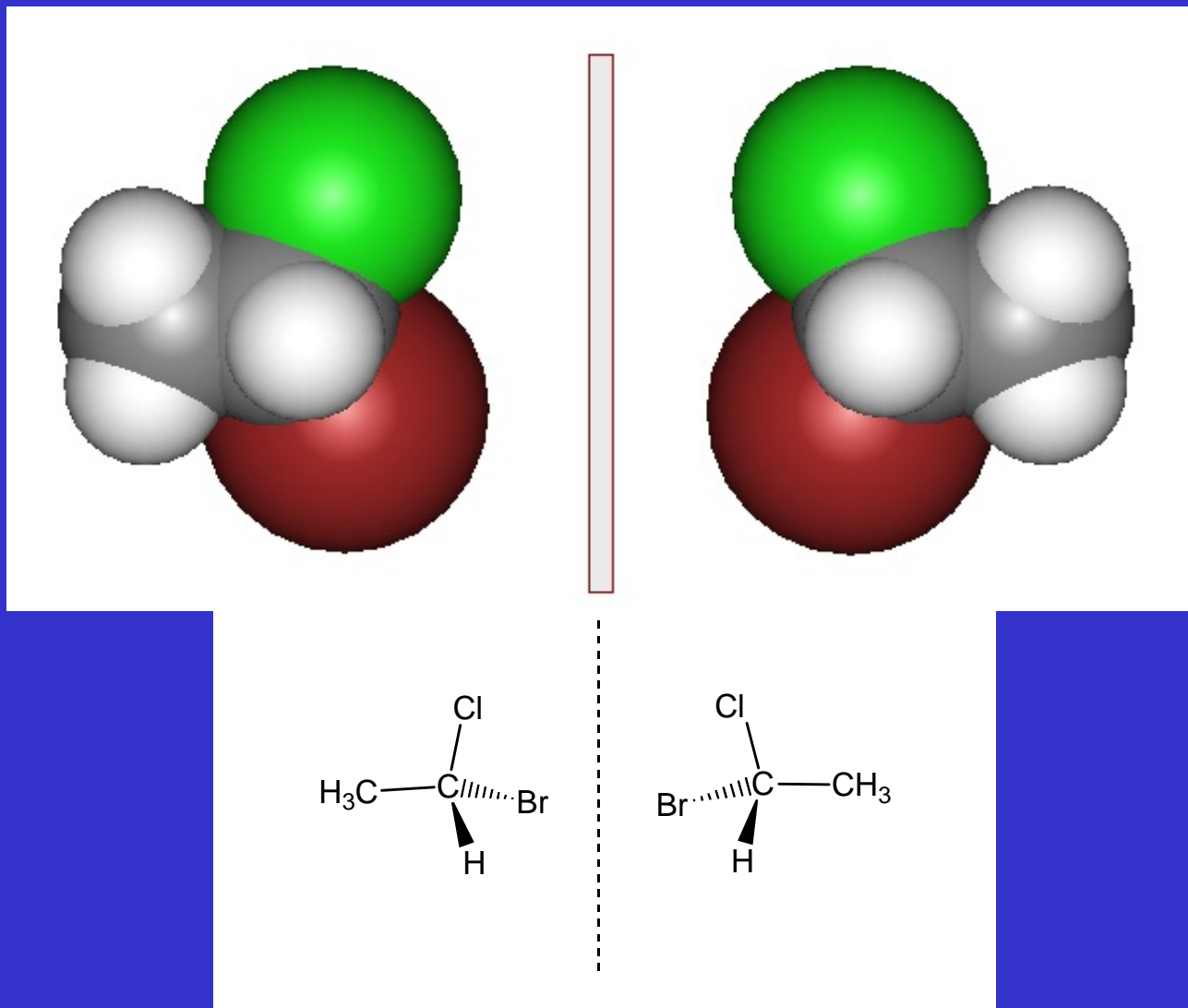
Dissymetrie



Asymetrický atom

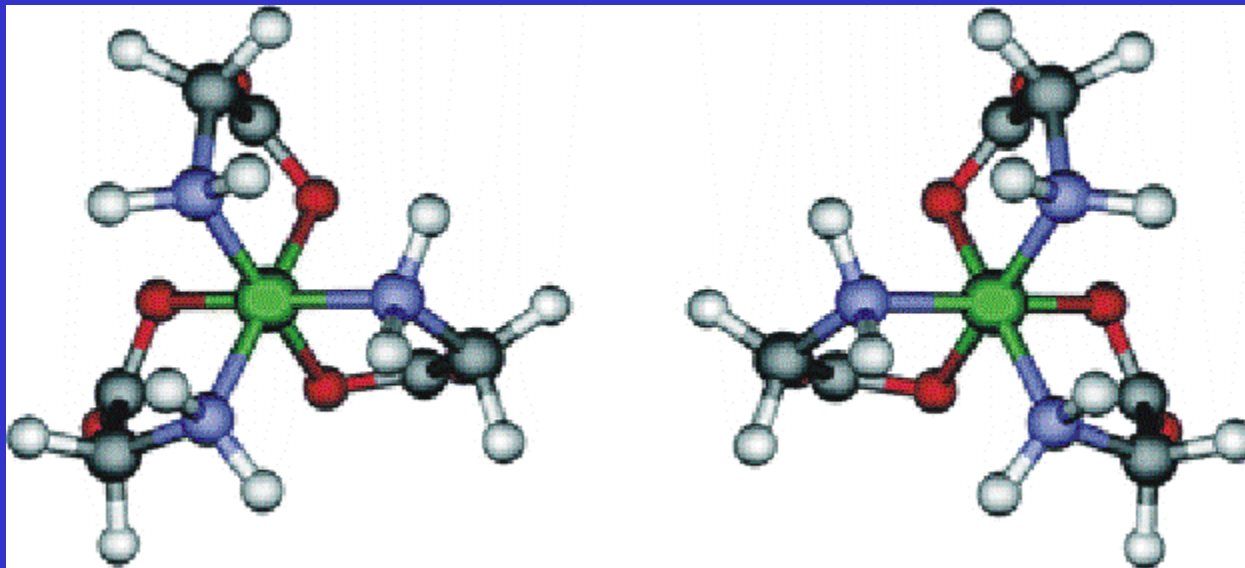


# Optické izomery - enantiomery



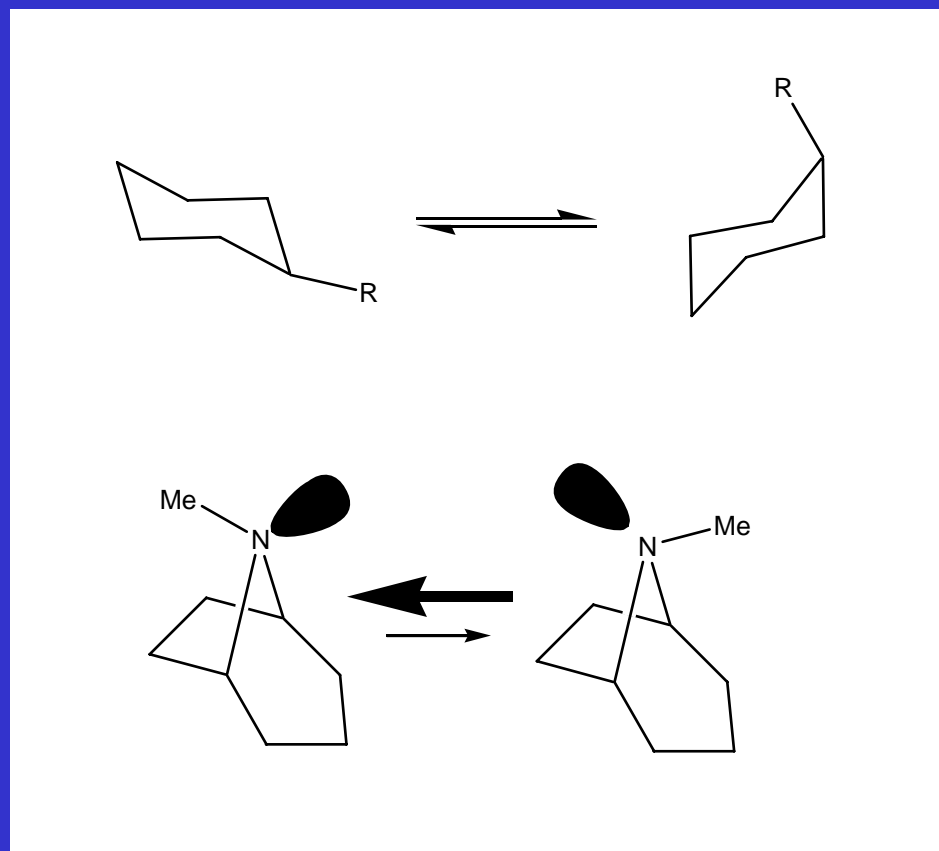


## Optické izomery - enantiomery



# Molekulární tvar

konformery

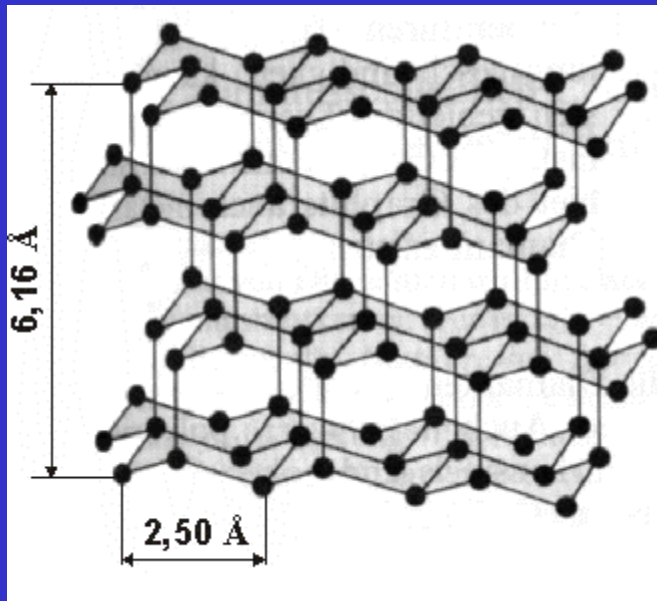


# Krystalová struktura

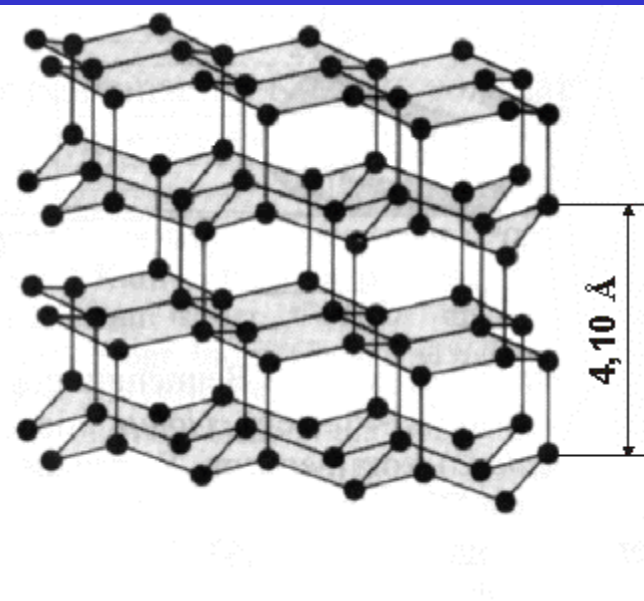
Polymorfie – jen pro pevné látky

Stejné stavební (vzorcové) jednotky, stejné vazby, různé uspořádání v prostoru

Kubický diamant



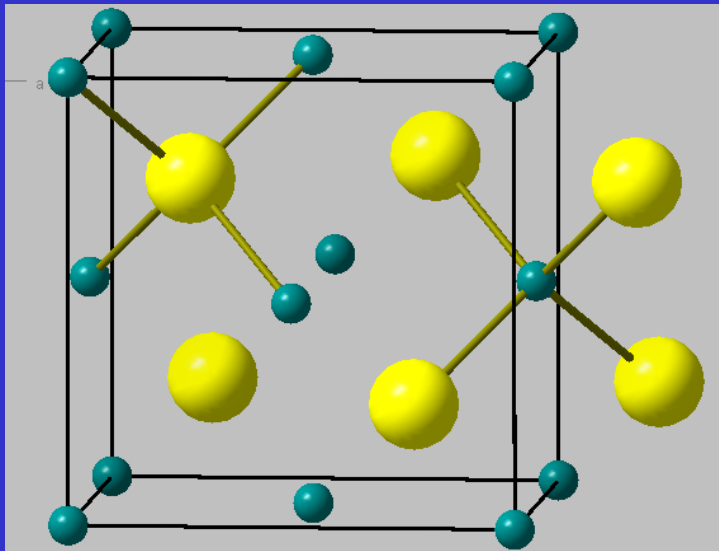
Hexagonální diamant



# Krystalová struktura

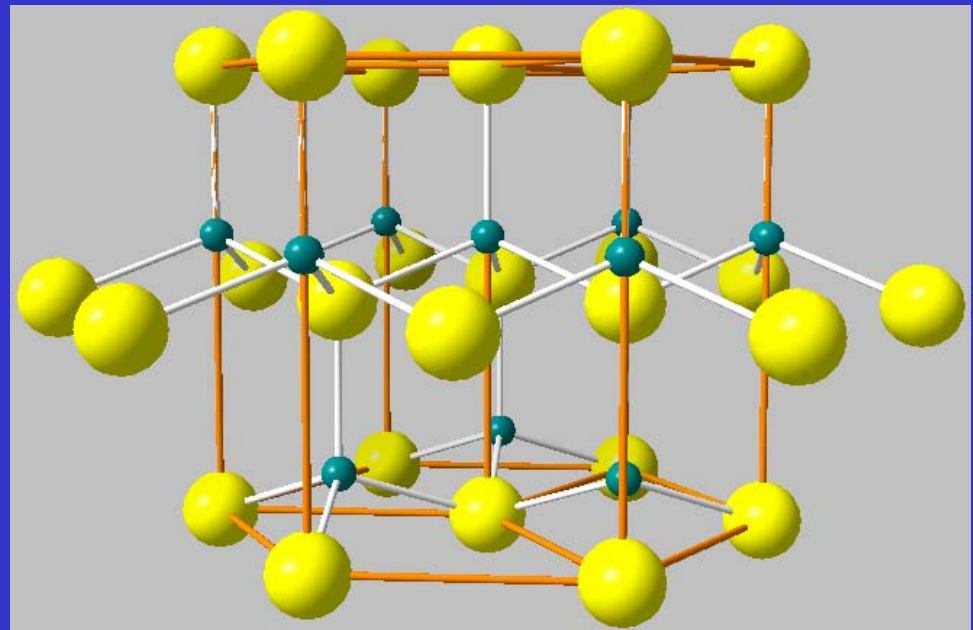
ZnS sfalerit

kubická struktura



ZnS wurzit

hexagonální struktura



# Pojem atomu

**Leukippos** (~450 př. n. l.)

Je hmota spojitá nebo nespojitá?  
Svět je tvořen z nedělitelných částic.

**Demokritos** (470-380 př. n. l.)

Pojem atom

Existuje nekonečné množství nekonečného počtu druhů atomů, které jsou v neustálém pohybu a kombinují se.

## Vývoj znalostí o složení atomu

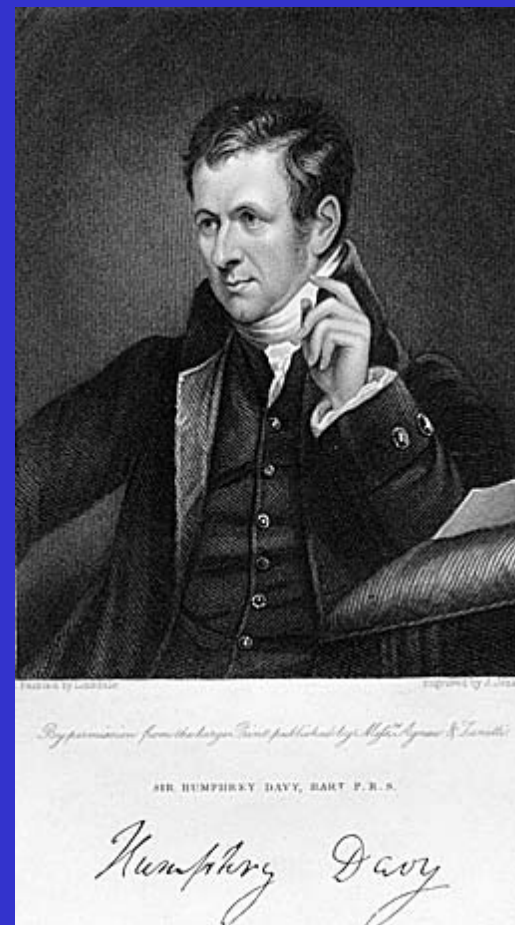
1807 Sloučeniny jsou drženy pohromadě elektrickými silami.

Získal alkalické kovy z tavenin jejich solí

Elektrolýza taveniny  $\text{K}_2\text{CO}_3 \rightarrow \text{K}$

Elektrolýza taveniny  $\text{NaCl} \rightarrow \text{Na}$

Humphry Davy  
(1778 - 1829)



## Faradayův zákon

1833 Množství vyloučené látky při elektrolýze je přímo úměrné prošlému náboji

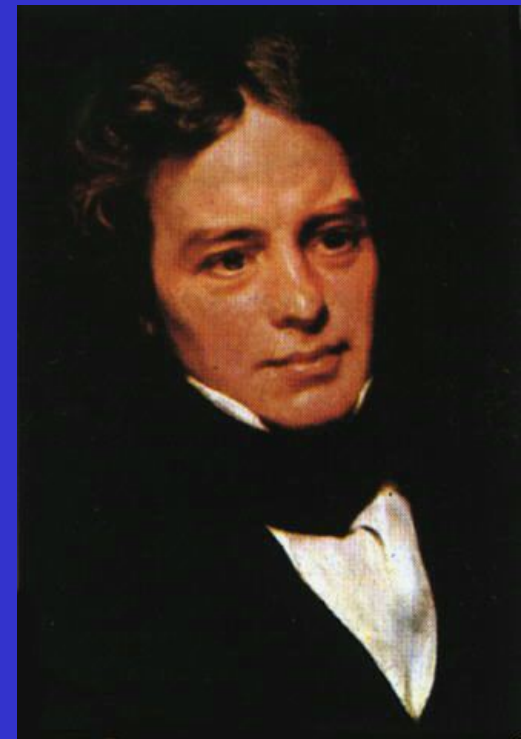
$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Faradayova konstanta =  $F$   
náboj 1 molu  $e = 96500 \text{ C}$

1 mol  $M^{z+}$  .....  $96500 \text{ C} \times z$

$n$  molů  $M^{z+}$  .....  $Q = I t$

$$m = \frac{MIt}{zF}$$



Michael Faraday  
(1791 - 1867)

## Složení atomu

1758

Dva druhy elektriny: Robert Symmer – ponožky

1874

Elektrina je tvořena diskrétními negativně nabitými částicemi

1894 **název elektron**

George J. Stoney  
(1826 - 1911)





# Složení atomu

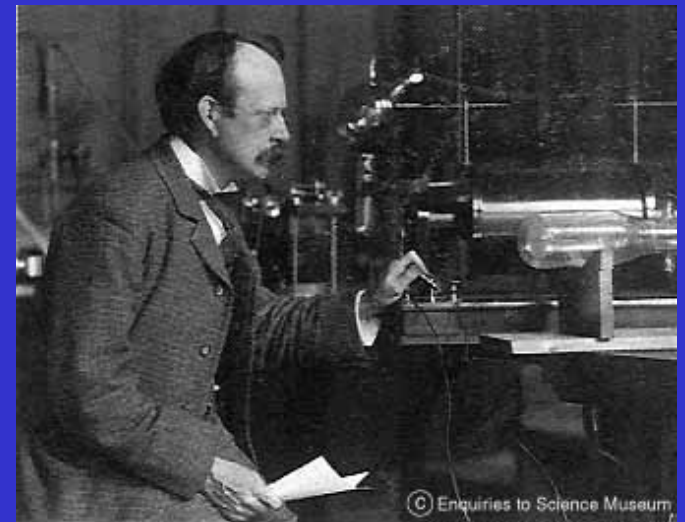
## Katodové paprsky, 1898-1903

- Vycházejí z negativní elektrody, pohybují se po přímce, zahřívají kov, otáčejí vrtulku
- Jsou stejné pro různé druhy katodového materiálu a použitého plynu
- Jsou odpuzovány záporným potenciálem

## Experimentální potvrzení existence elektronu

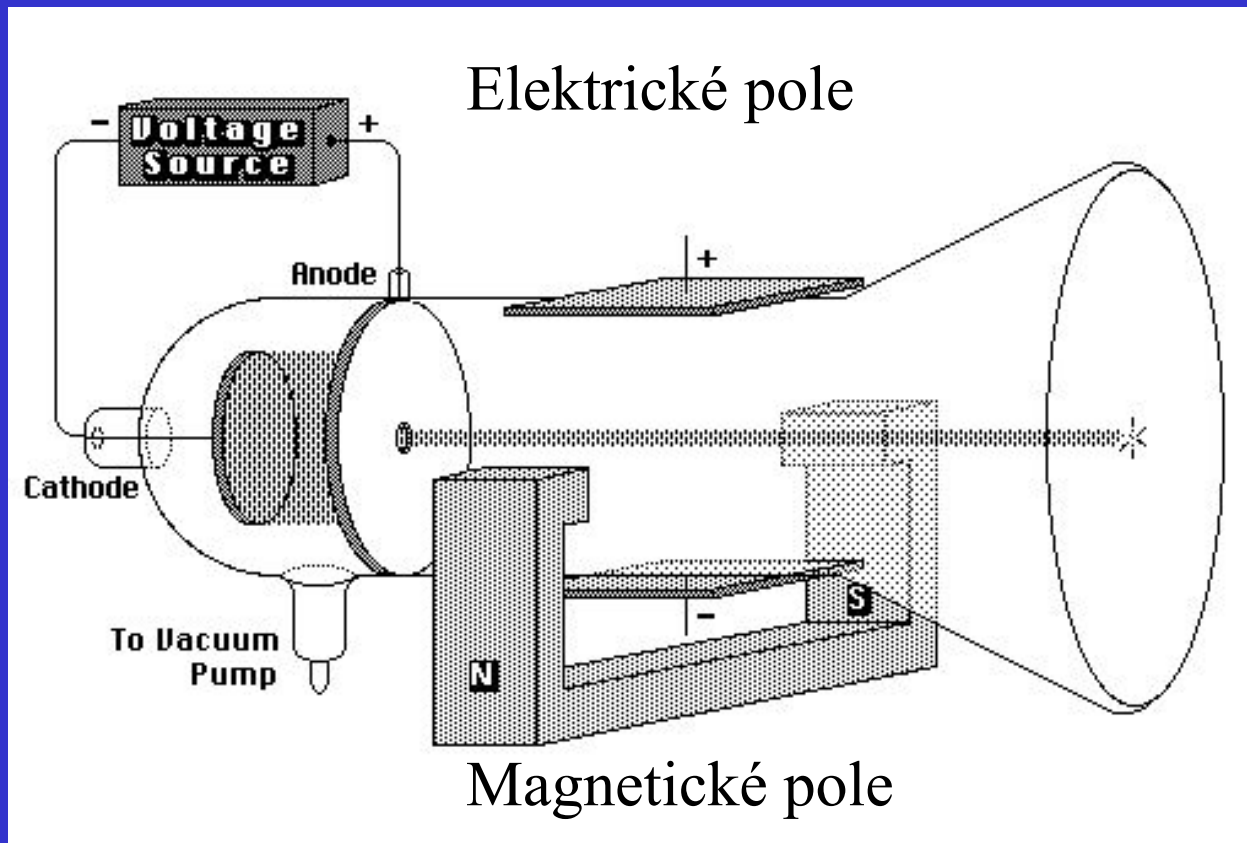
Specifický náboj

$$q/m_e = -1.76 \cdot 10^8 \text{ C g}^{-1}$$



Joseph John Thomson  
(1856 - 1940)

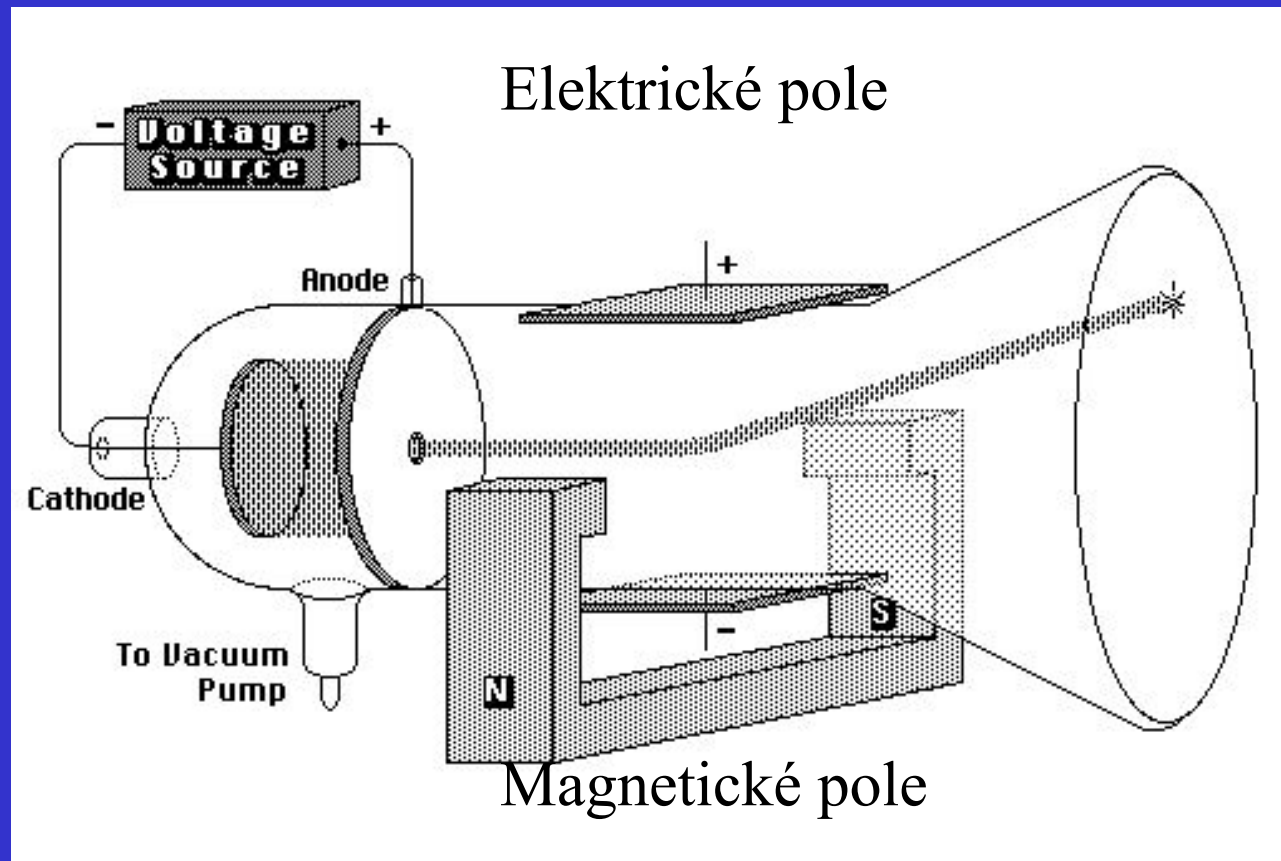
# Katodové paprsky



Specifický náboj

$$q/m_e = -1.76 \cdot 10^8 \text{ C g}^{-1}$$

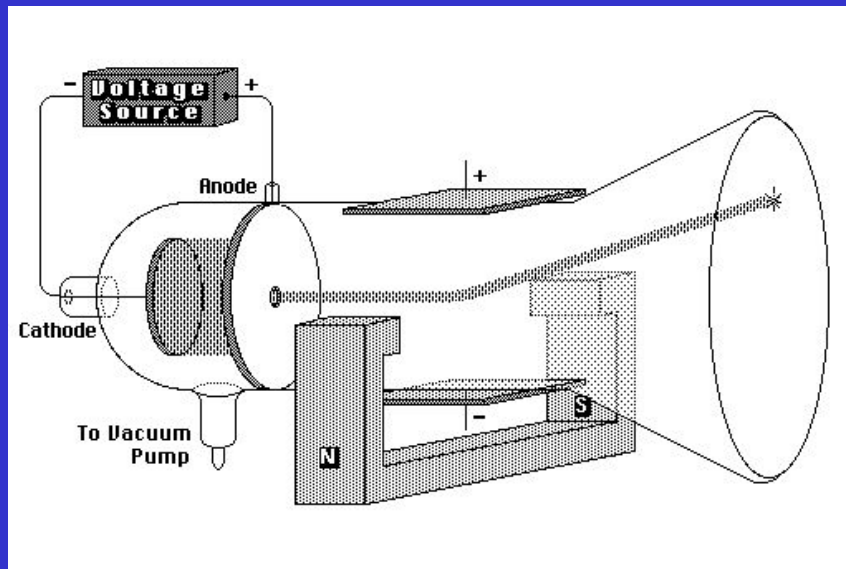
# Katodové paprsky



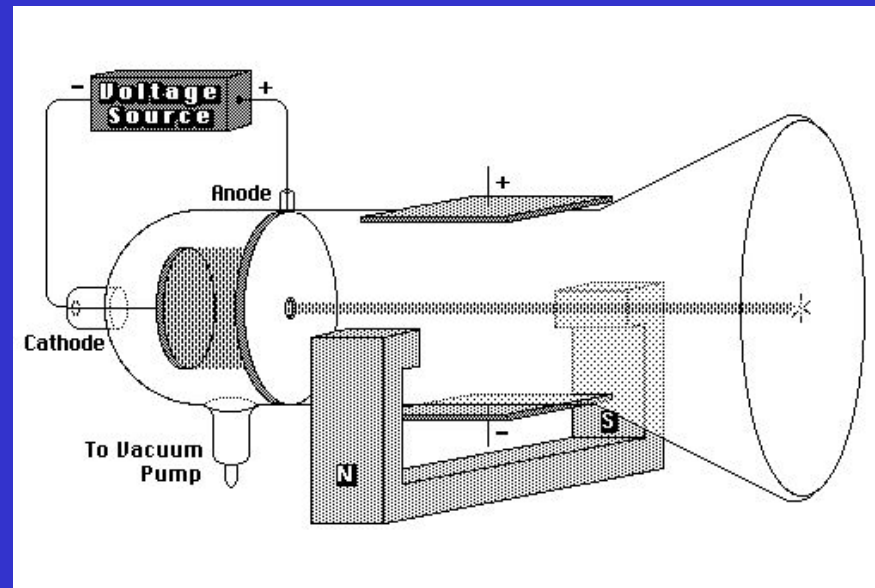
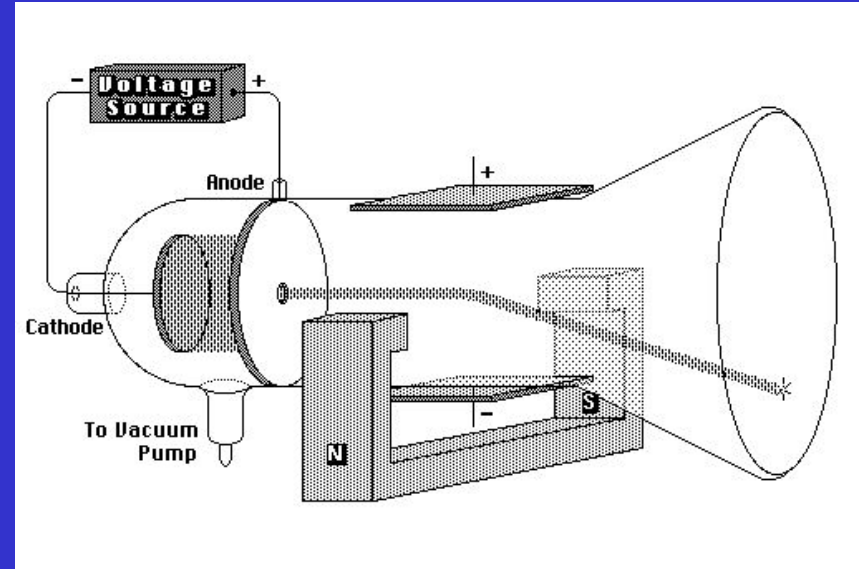
Specifický náboj

$$q/m_e = -1.76 \cdot 10^8 \text{ C g}^{-1}$$

## Elektrické pole



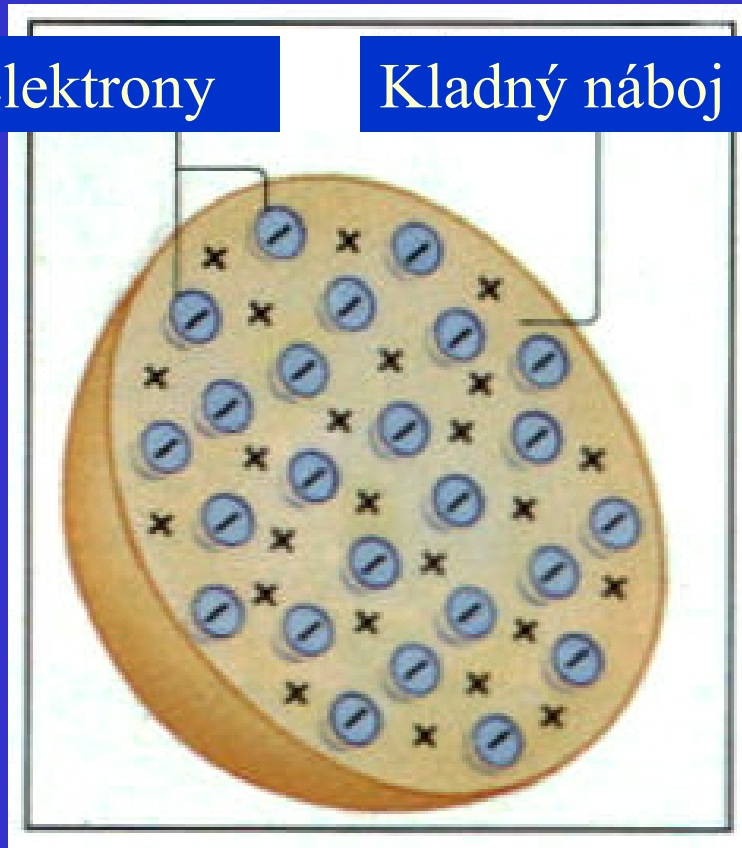
## Magnetické pole



# Thomsonův model atomu

Elektrony

Kladný náboj rozptýlený



## Náboj a hmotnost elektronu

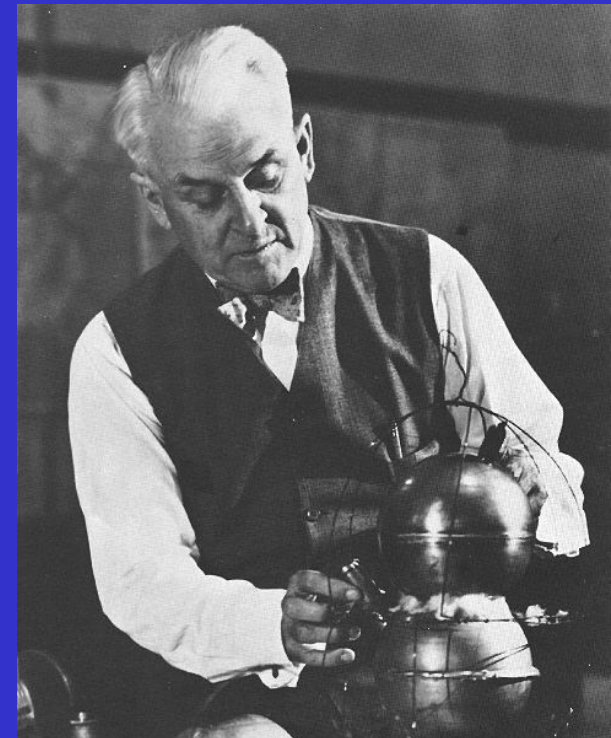
1911 změřil náboj elektronu  
Pomocí mlžné komory

$$q = -1.602\,177\,10^{-19}\text{ C}$$

Elektrický náboj je kvantován,  
Každý náboj je celistvým násobkem  
elementárního náboje (elektronu)

z hodnoty  $q$  a  $q/m_e$  vypočetl  
hmotnost elektronu

$$m_e = 9.109\,39\,10^{-31}\text{ kg}$$

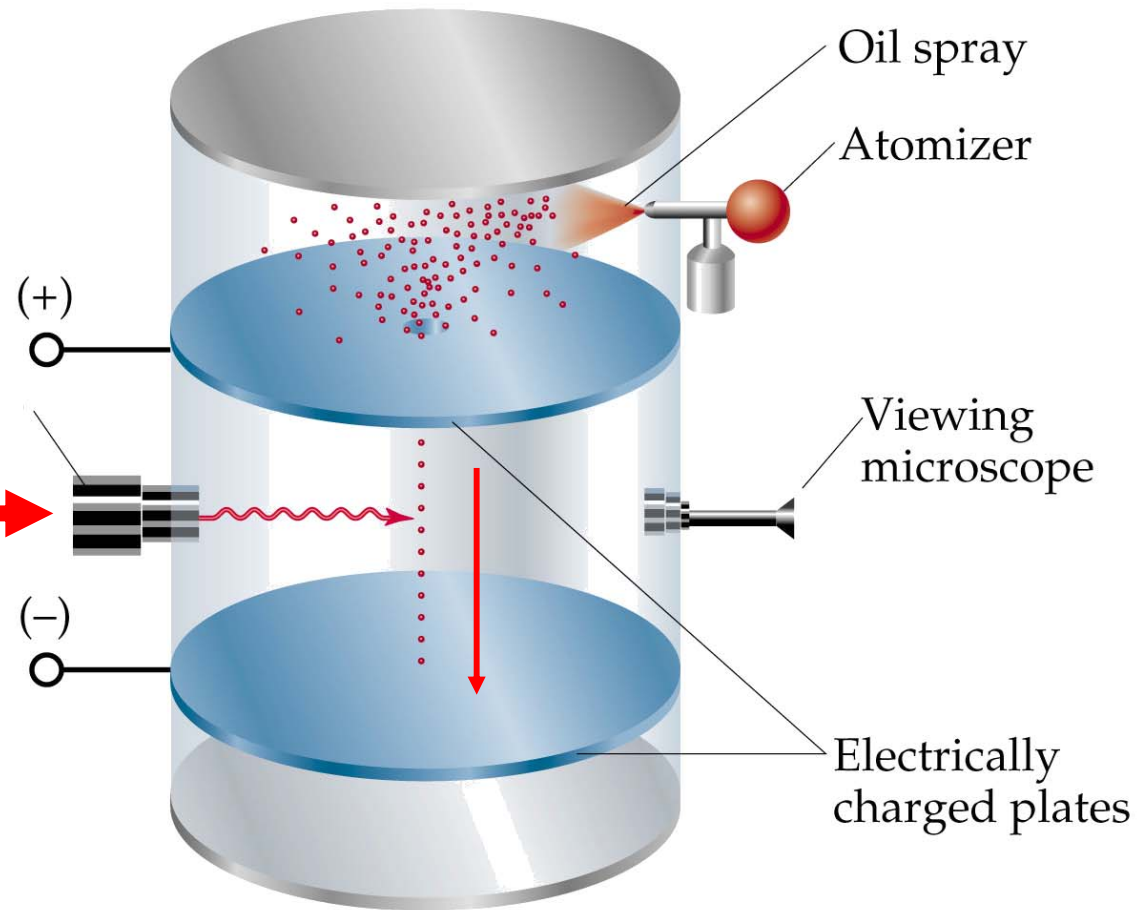


Robert Millikan  
(1868 - 1953)  
NP za fyziku 1923

# Mlžná komora

Měření rychlosti pádu kapiček při různém napětí na deskách

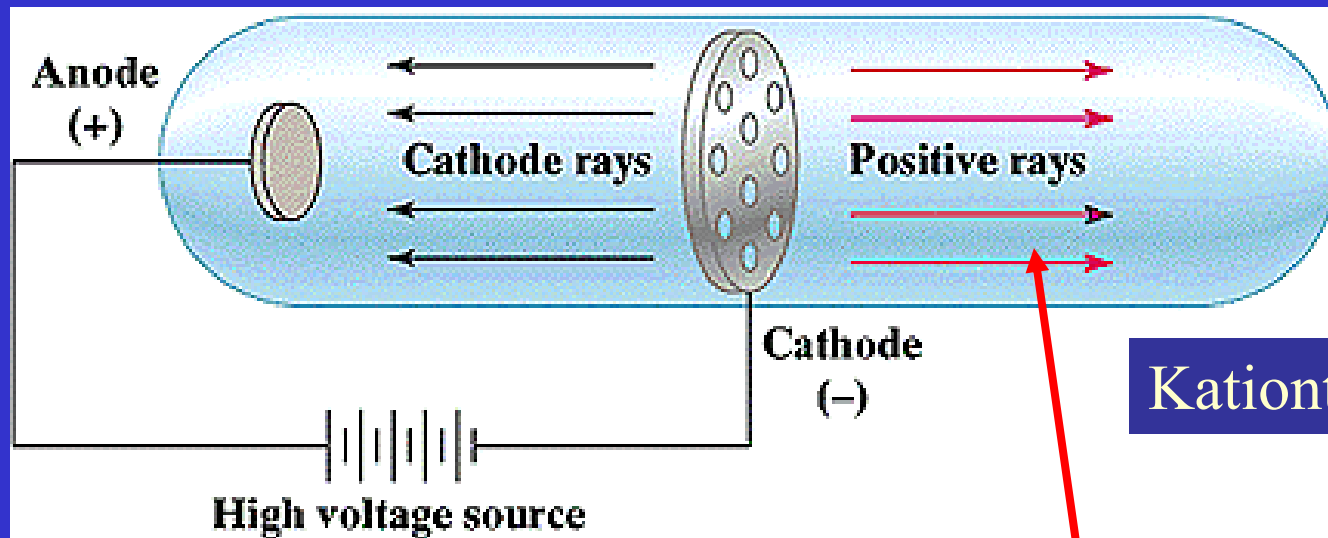
Zdroj ionizujícího záření



Hmotnost olejových kapiček

## Anodové (kanálové) paprsky

1886



Proton

$$q/m_p = 9.579 \cdot 10^7 \text{ C g}^{-1}$$

$$m_p = 1.672648 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

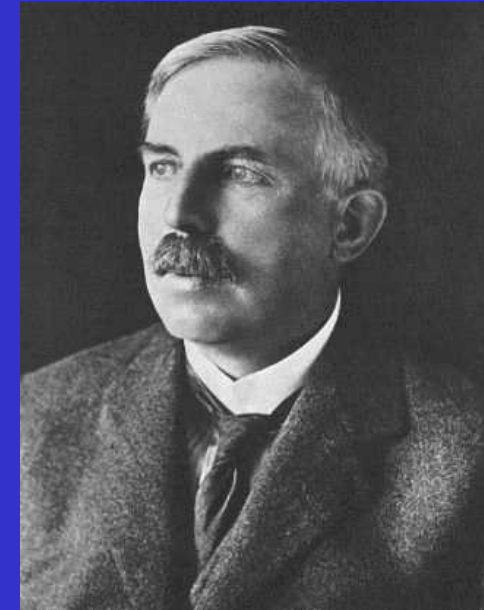
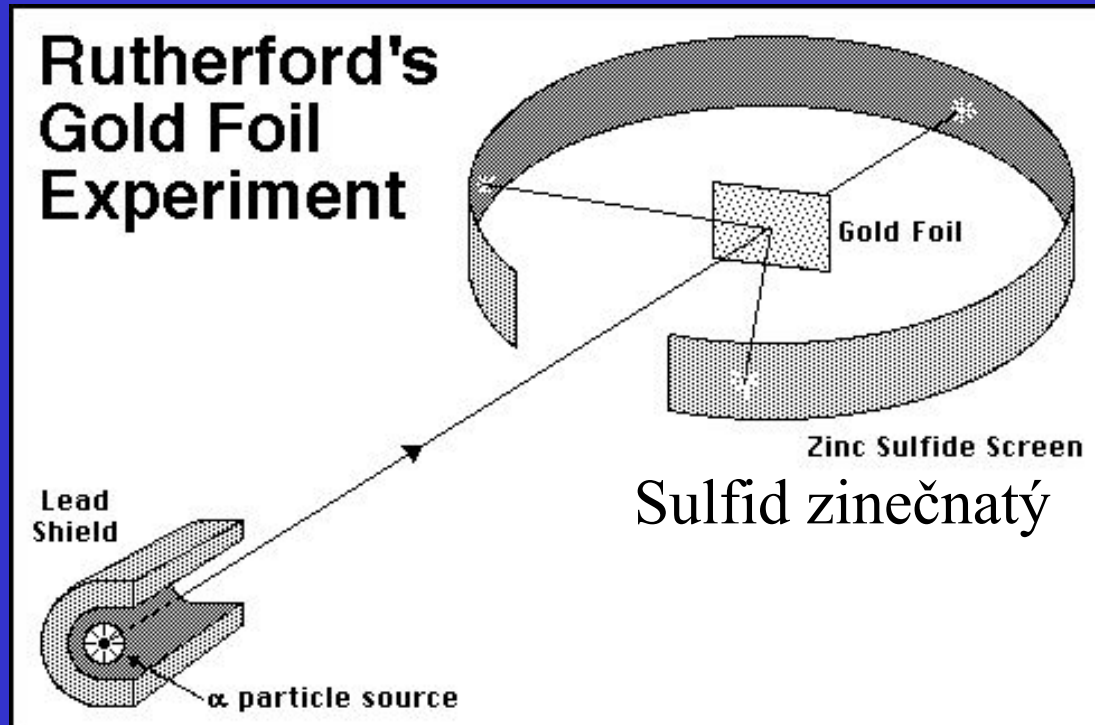
$$q_p = - \text{elementární náboj} = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Jsou různé pro různé druhy použitého plynu, odpuzovány kladným potenciálem, celistvé násobky  $-e$ , nejmenší pro  $\text{H}_2$



# Nukleární model atomu

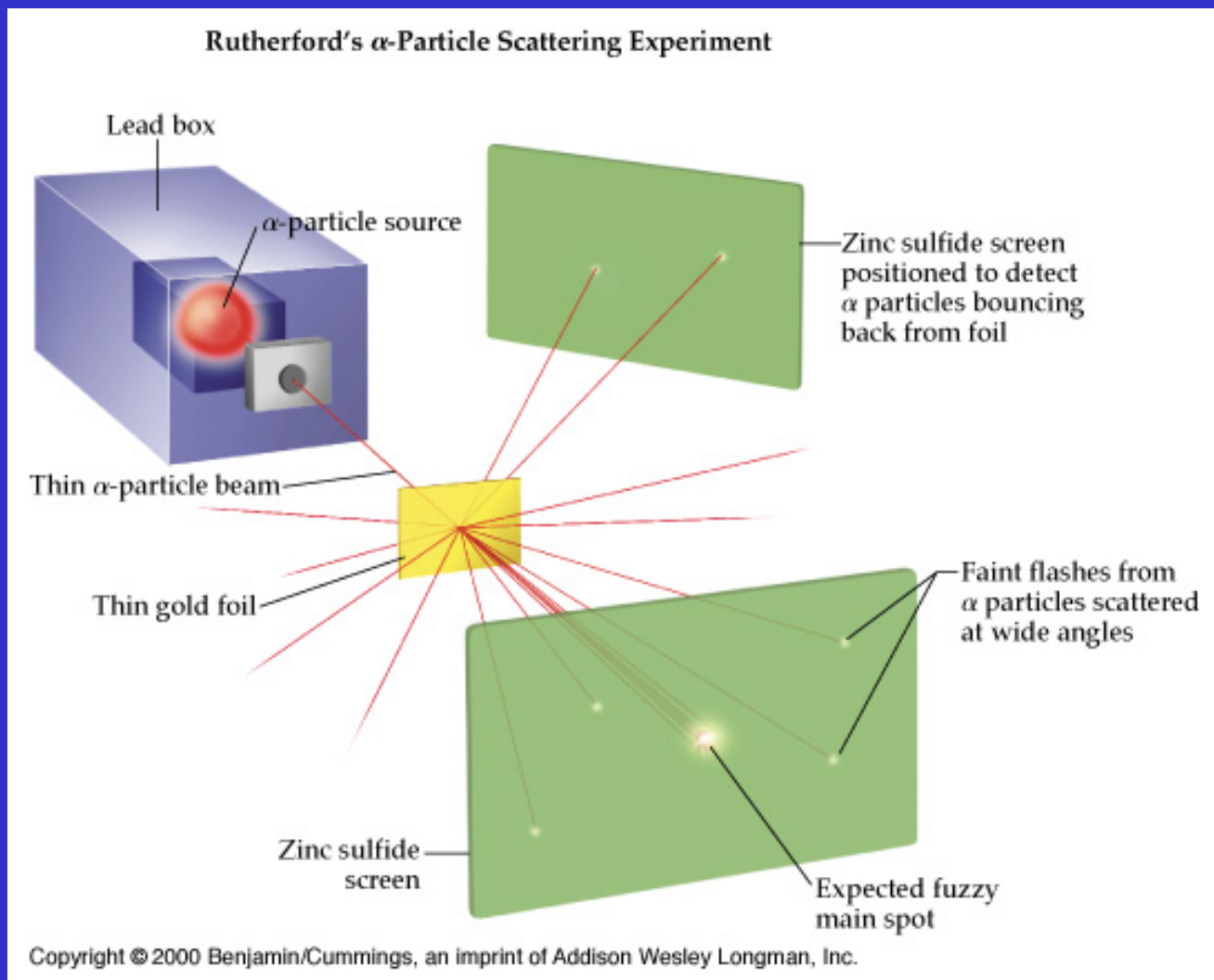
1911 Rozptyl  $\alpha$  částic na Au



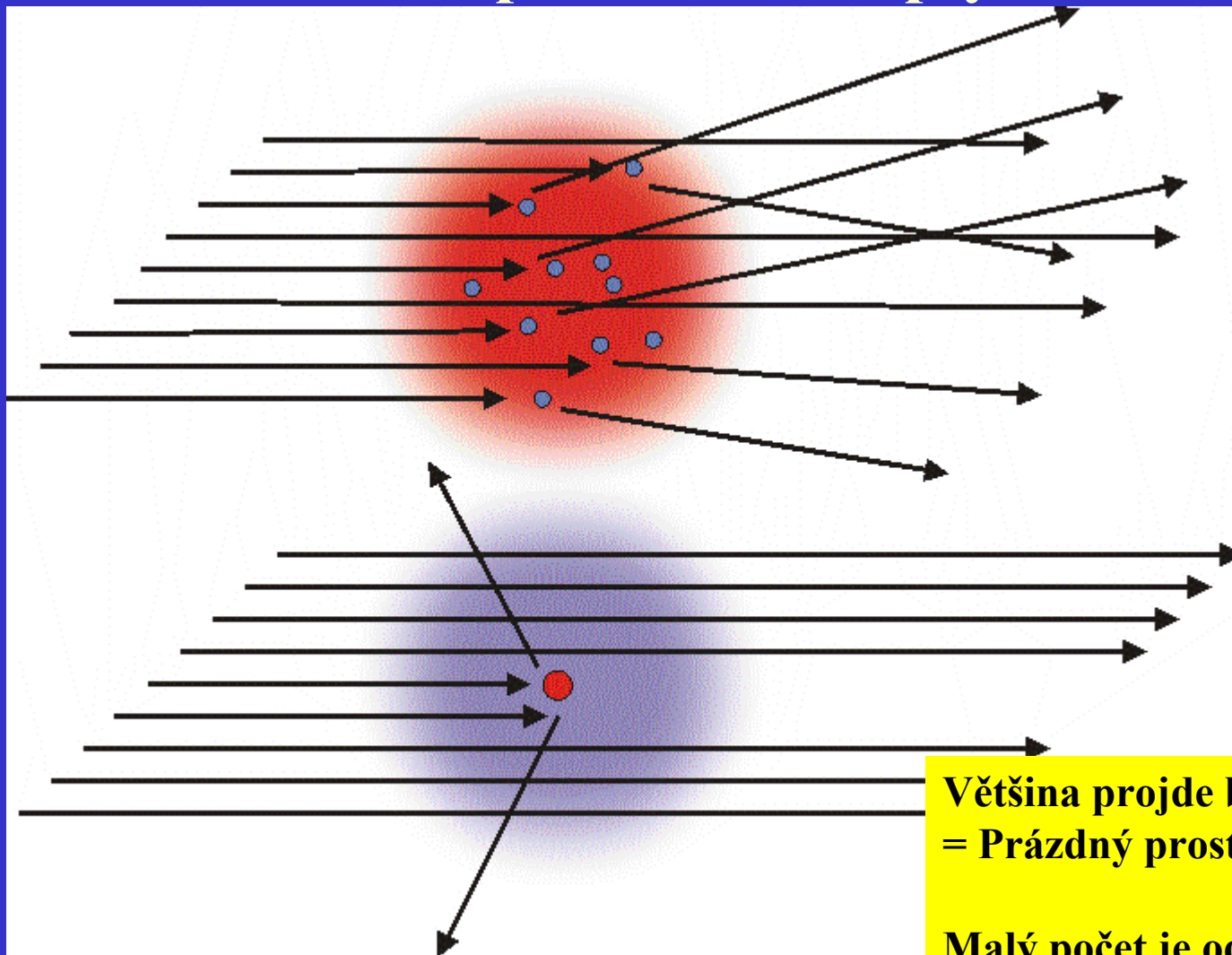
Ernest Rutherford  
(1871-1937)  
NP za chemii 1908

Radium – zdroj alfa částic

# Experiment - rozptyl $\alpha$ částic



## Experiment - rozptyl $\alpha$ částic



Model 1  
Thomson

Model 2  
Rutherford

**Většina projde bez změny směru  
= Prázdňý prostor**

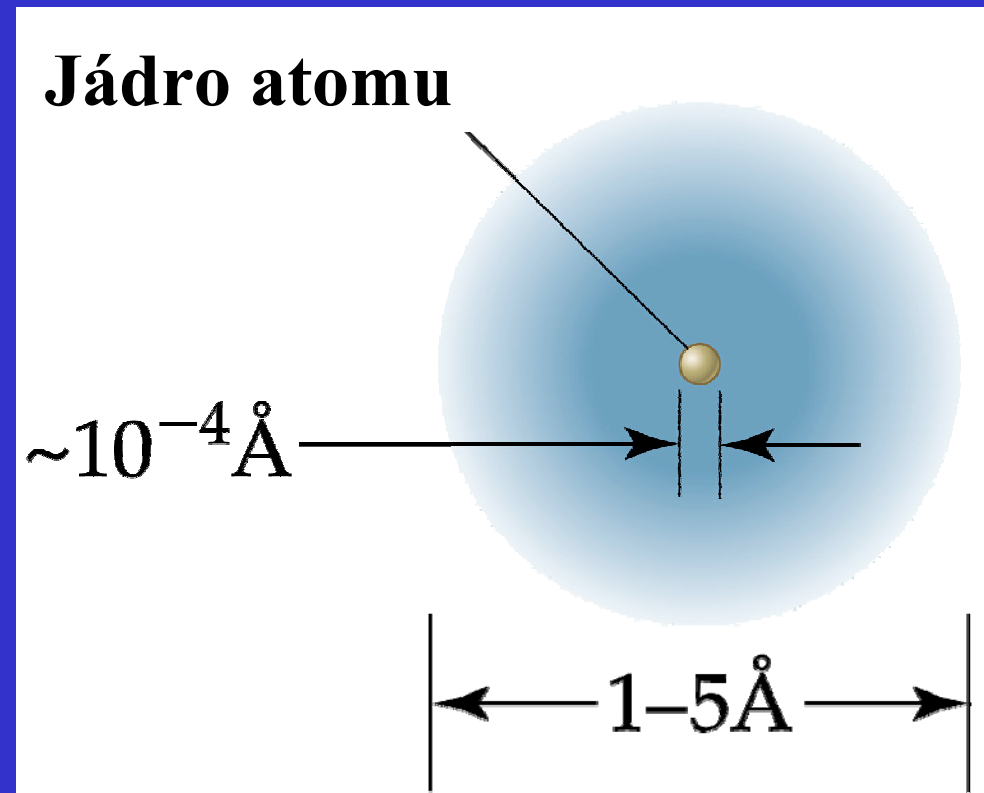
**Malý počet je odražený zpět  
Srážka s masivní nabitou částicí = jádro**

## Nukleární model atomu

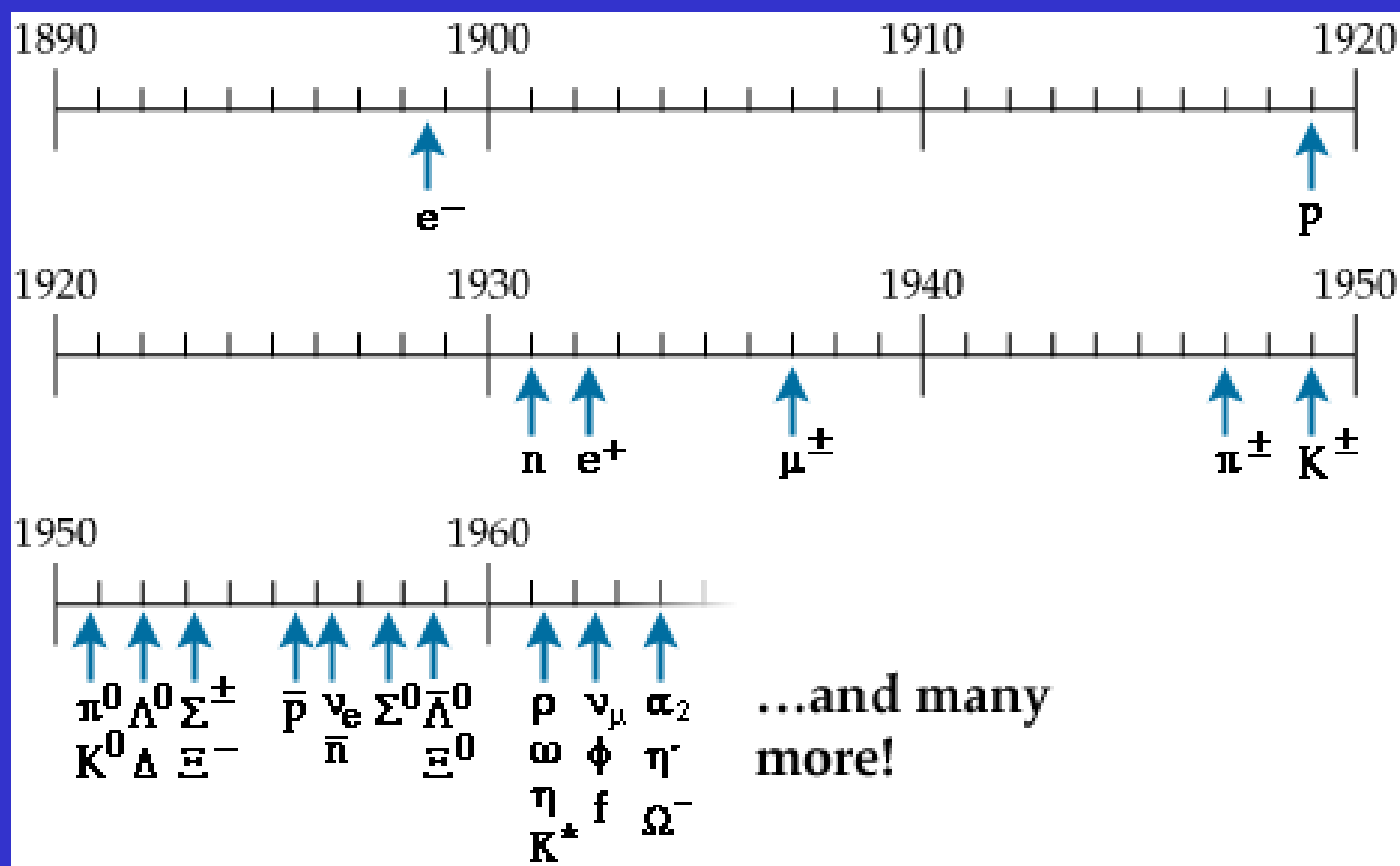
Většinu objemu atomu tvoří oblak negativního náboje s malou hmotností

Jádro atomu sestává z pozitivního náboje s vysokou hustotou ( $1.6 \cdot 10^{14} \text{ g cm}^{-3}$ )

Hmotnost jádra činí 99.9% hmotnosti atomu



# Objevy elementárních částic



## Elementární částice

Částice	Symbol	El. náboj	Spin	m, kg	m , amu
<b>Elektron</b>	<b>e</b>	<b>-1</b>	$\frac{1}{2}$	$9.11 \cdot 10^{-31}$	<b>0.0005486</b>
<b>Proton</b>	<b>p</b>	<b>+1</b>	$\frac{1}{2}$	$1.673 \cdot 10^{-27}$	<b>1.007276</b>
<b>Neutron</b>	<b>n</b>	<b>0</b>	$\frac{1}{2}$	$1.675 \cdot 10^{-27}$	<b>1.008665</b>

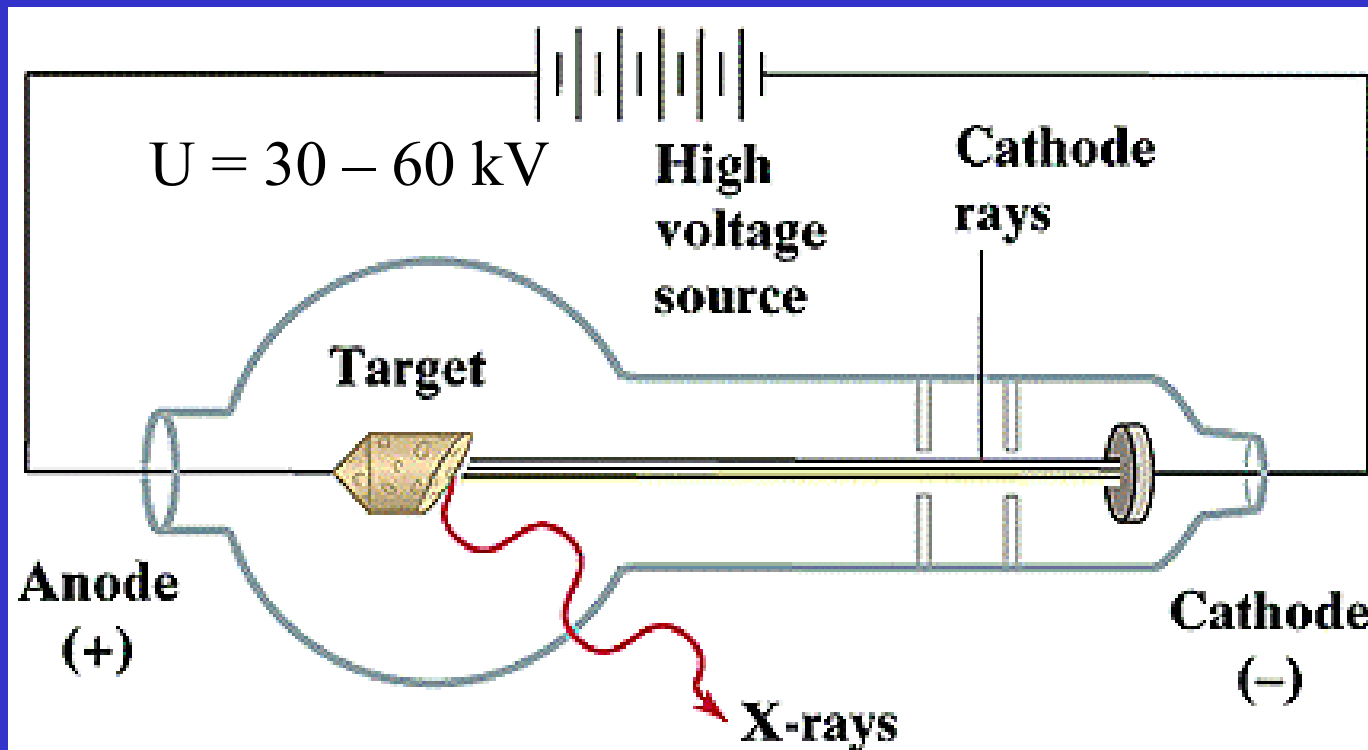
# Rentgenovo záření

X záření pronikající hmotou



Wilhelm K. Roentgen (1845-1923)  
NP za fyziku 1901

## Rentgenovo záření

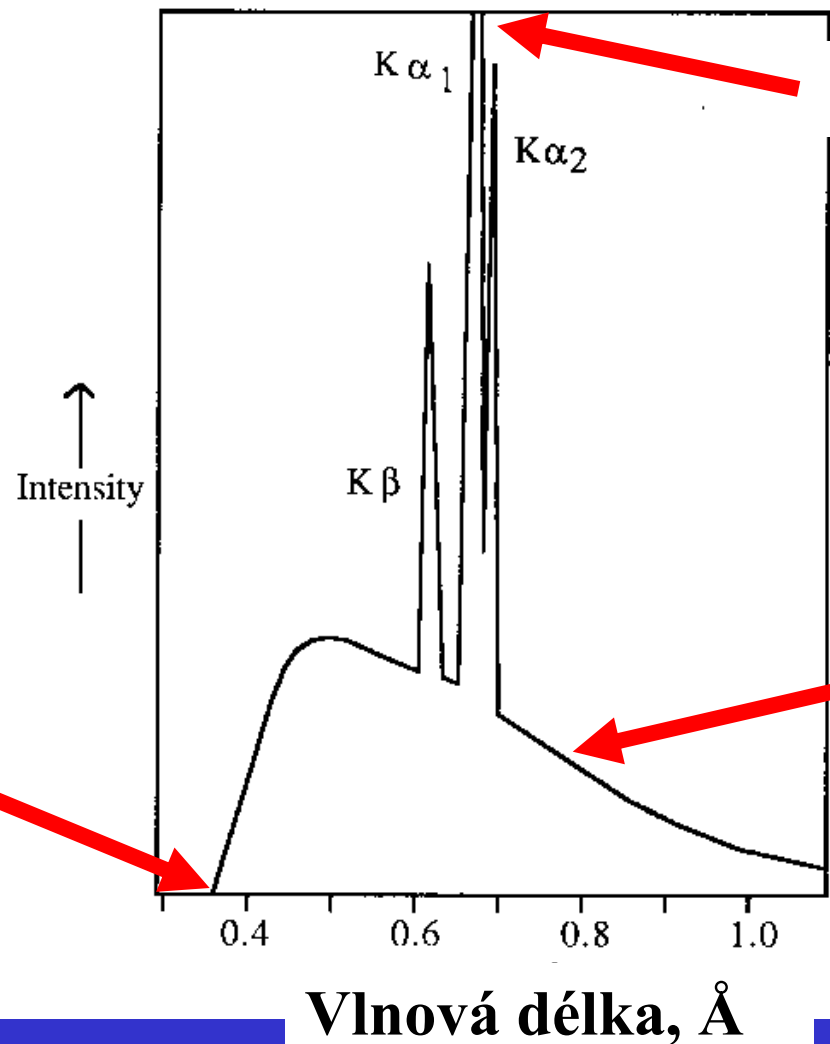


Vlnová délka  $\lambda = 0.1 - 100 \text{ \AA}$  podle druhu anody

Materiál anody  $\text{Cu } K_{\alpha}$        $E = 8.05 \text{ keV}$        $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$



# Spektrum rentgenova záření



$K_{\alpha}$  nejintenzivnější linie

Charakteristické čáry  
Pro různé prvky

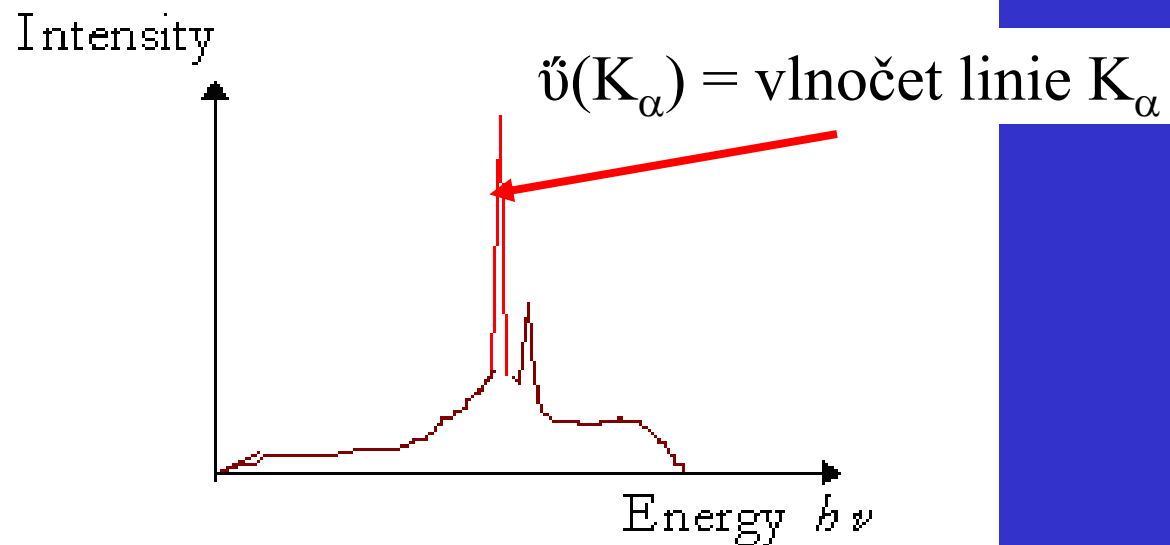
1 Ångström =  $10^{-10}$  m

Brzdné záření

Minimum  
 $eV = hv$

# Moseleyho zákon

Target Material Dependent Lines of X-rays.



Vlnóčet linie  $K_\alpha$  je rúzný pro rúzné prvky

$$\sqrt{\nu(\tilde{K}_\alpha)} = C(Z - 1)$$



Henry Moseley  
(1887-1915)  
Zabit ostřelovačem

## Atom



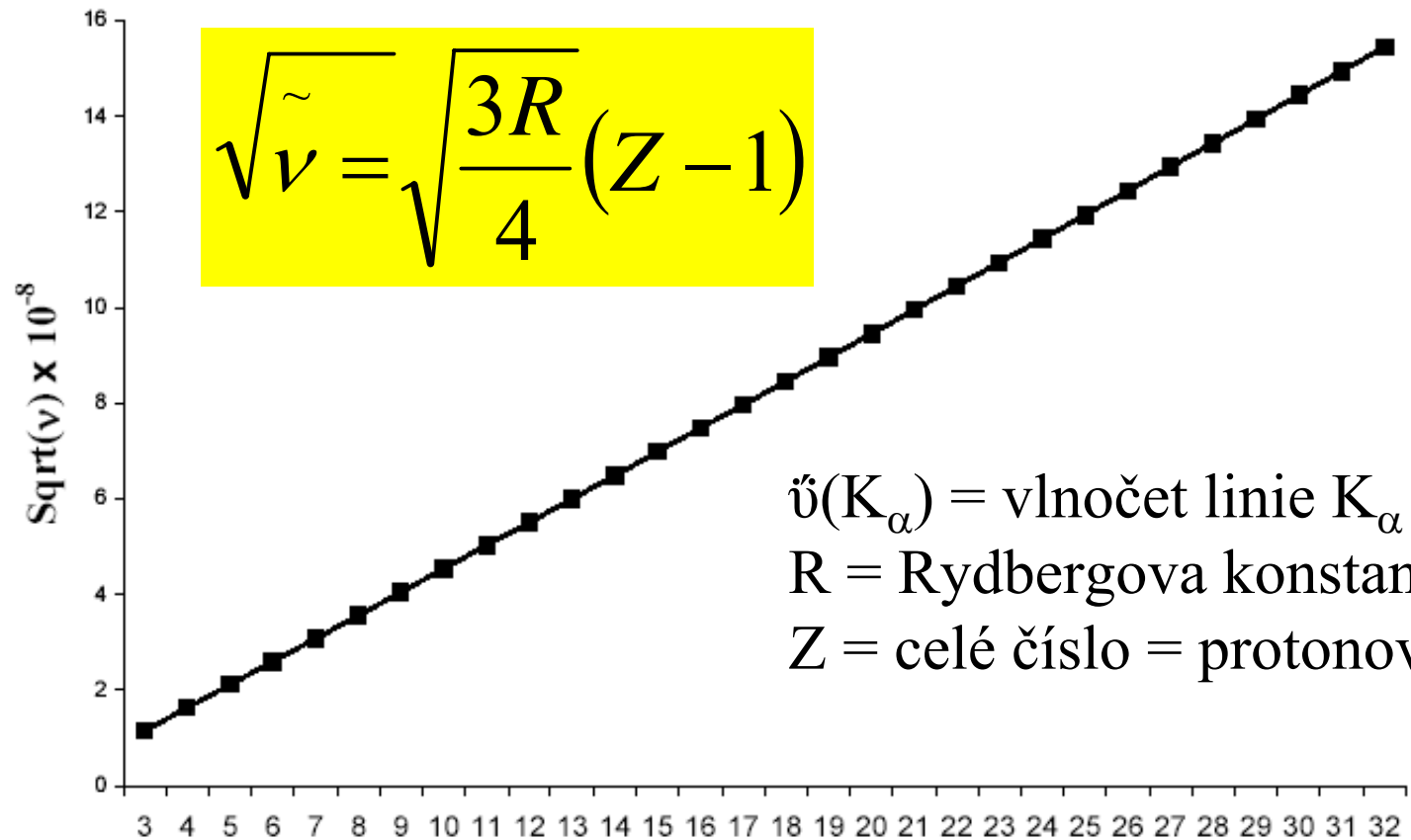
$$A = Z + N$$

**Nuklid = soubor atomů se stejným A a Z**

**Prvek = soubor atomů se stejným Z**

# Moseleyho zákon

X-Ray Frequencies vs. Atomic Number



$$\sqrt{\tilde{\nu}} = \sqrt{\frac{3R}{4}} (Z - 1)$$

$\tilde{\nu}(K_{\alpha})$  = vlnočet linie  $K_{\alpha}$   
R = Rydbergova konstanta  
Z = celé číslo = protonové číslo

Protonové číslo

1913

## Moseleyho zákon

Správné pořadí prvků v periodickém systému

$Z = 27$           Co          58.933

$Z = 28$           Ni          58.71

Předpověděl prvky:

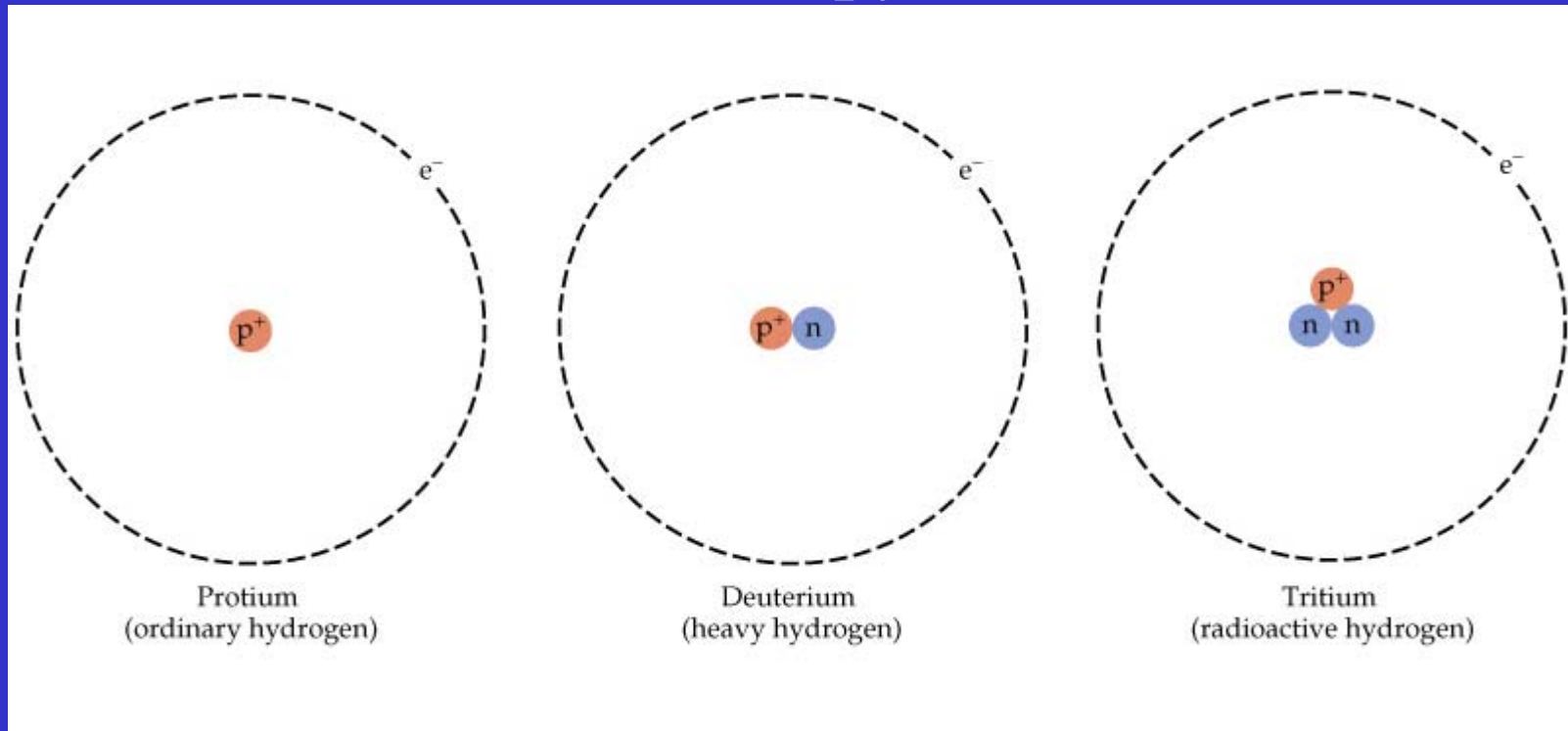
$Z = 43$  (Tc), 61 (Pm), 72 (Hf), 75 (Re)

Oprava periodického zákona (Mendělejev 1869):

Vlastnosti prvku závisí na protonovém čísle  
ne na atomové hmotnosti

**Atomové (protonové) číslo prvku  
je rovno počtu protonů v jádře.**

# Izotopy



${}^1\text{H}$

${}^2\text{H} = \text{D}$

${}^3\text{H} = \text{T}$

Liší se fyzikální vlastnosti

Teploty varu (K) :  $\text{H}_2$  20.4,  $\text{D}_2$  23.5,  $\text{T}_2$  25.0

## Přírodní zastoupení, %

$^1\text{H}$	99.985	$^{16}\text{O}$	99.759
$^2\text{H}$	0.015	$^{17}\text{O}$	0.037
		$^{18}\text{O}$	0.204
$^{12}\text{C}$	98.89		
$^{13}\text{C}$	1.11	$^{32}\text{S}$	95.00
		$^{33}\text{S}$	0.76
$^{14}\text{N}$	99.63	$^{34}\text{S}$	4.22
$^{15}\text{N}$	0.37	$^{36}\text{S}$	0.014

## Kolísání přírodního zastoupení, %

$^{10}\text{B}$	18.927 - 20.337	19.9 (7)
$^{11}\text{B}$	81.073 - 79.663	80.1 (7)
$^{16}\text{O}$	99.7384 - 99.7756	99.757 (16)
$^{17}\text{O}$	0.0399 - 0.0367	0.038 (1)
$^{18}\text{O}$	0.2217 - 0.1877	0.205 (14)

Sledování změny poměrného zastoupení izotopů je využíváno v geochemii – původ a stáří hornin



# Hmotnostní spektrometrie

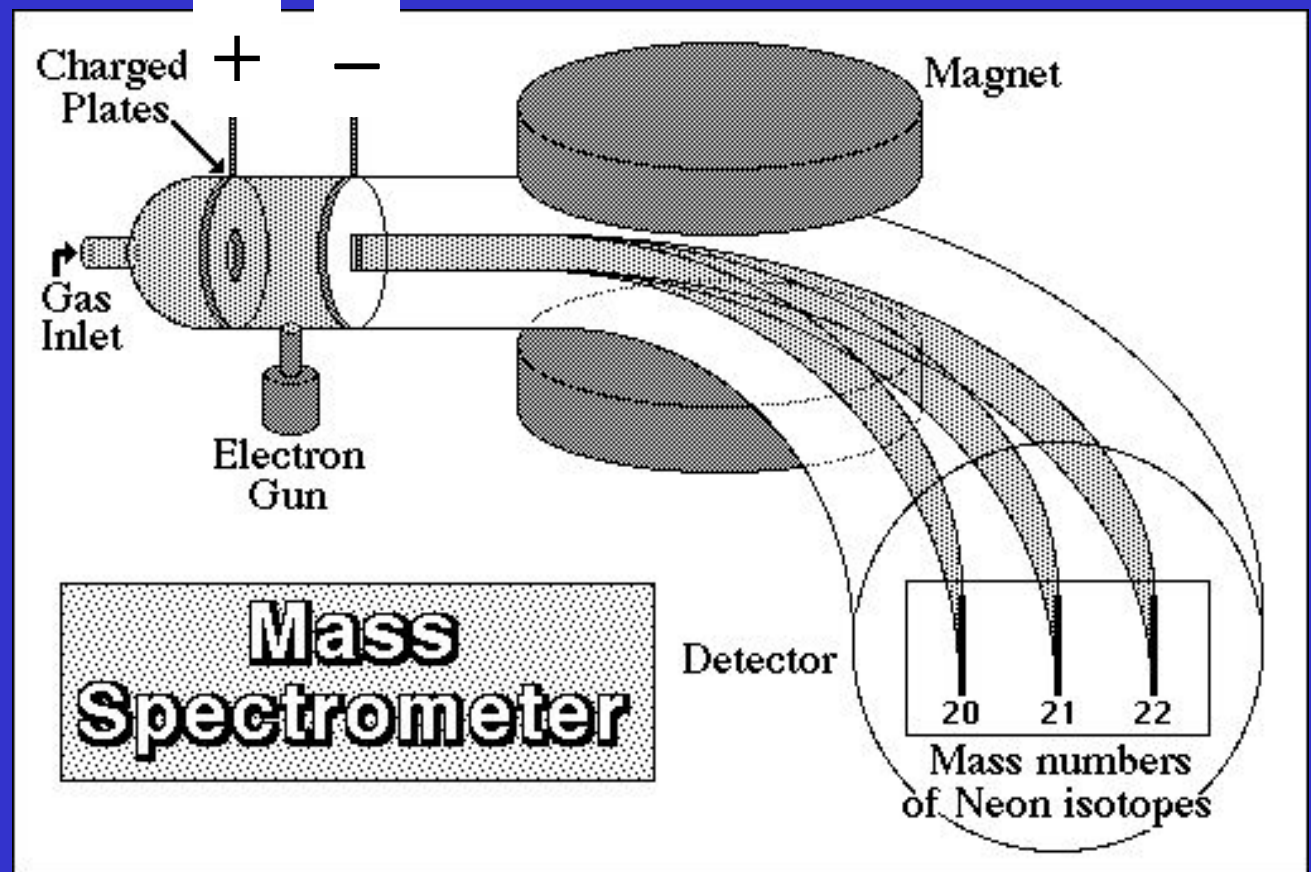


J. J. Thomson  
objevil dva  
izotopy Ne

$^{20}\text{Ne}$  90.48%

$^{21}\text{Ne}$  0.27%

$^{22}\text{Ne}$  9.25%

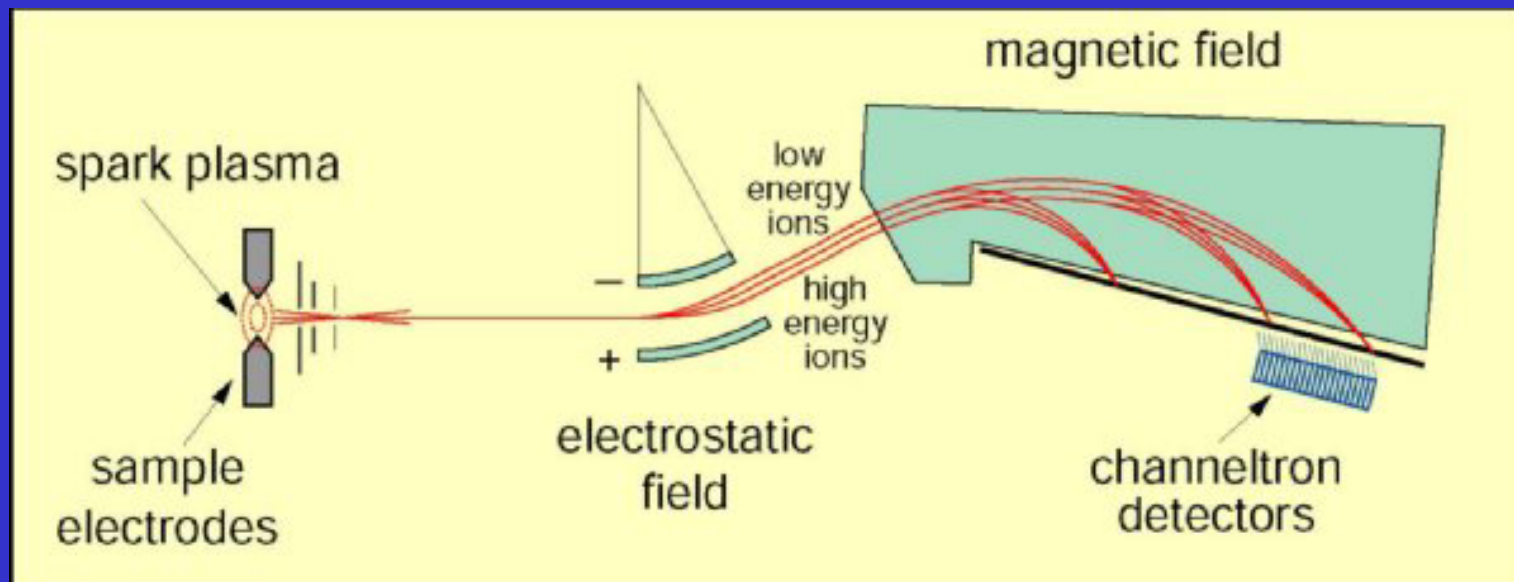


Nakresli si hmotnostní spektrum Neonu!

# Hmotnostní spektrometrie

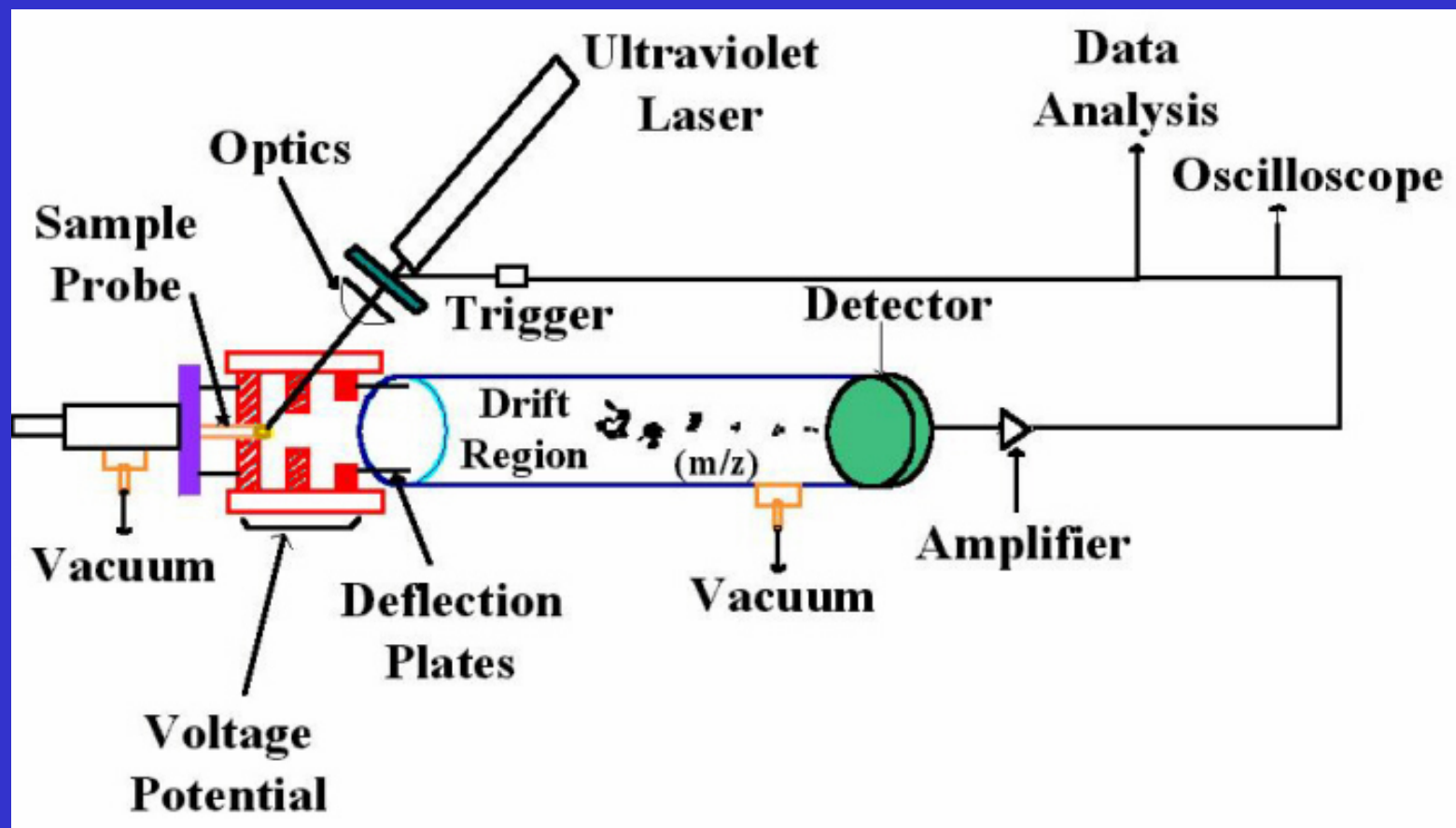
1. Ionizace

2. Rozdělení podle  $m/z$



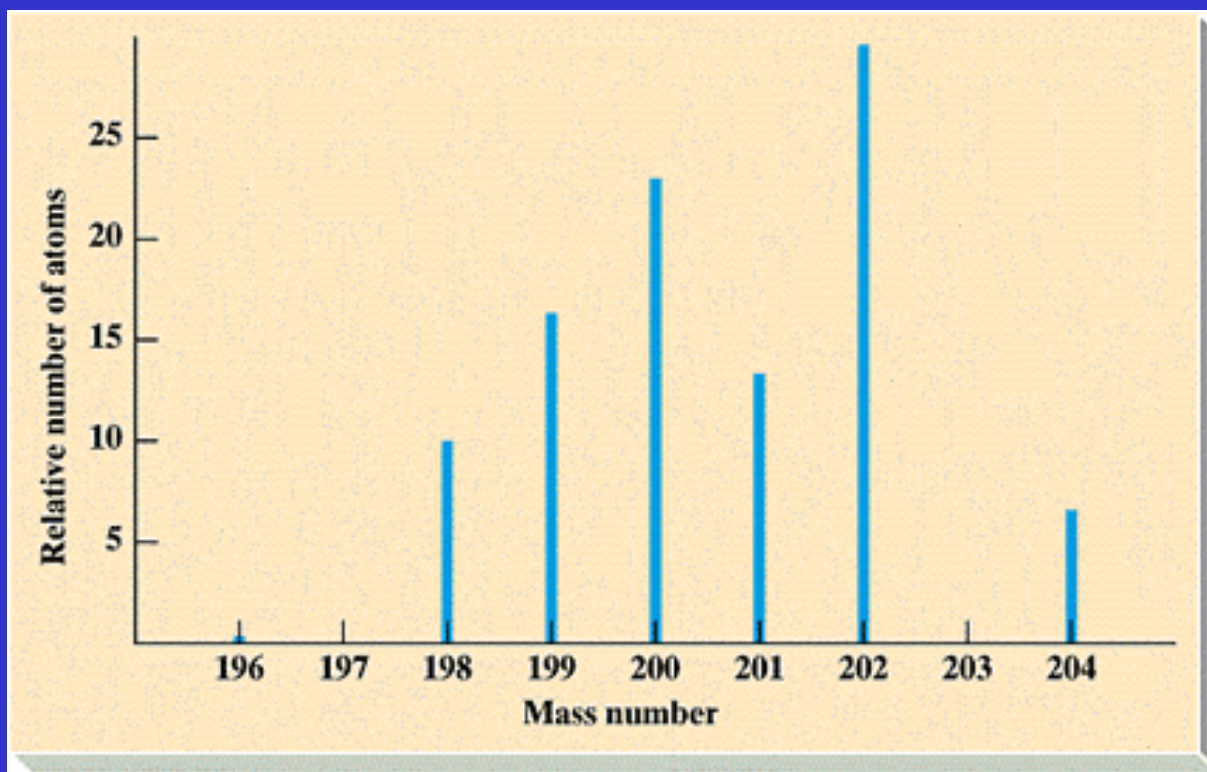
3. Detekce

# Hmotnostní spektrometrie TOF (Time-of-flight)



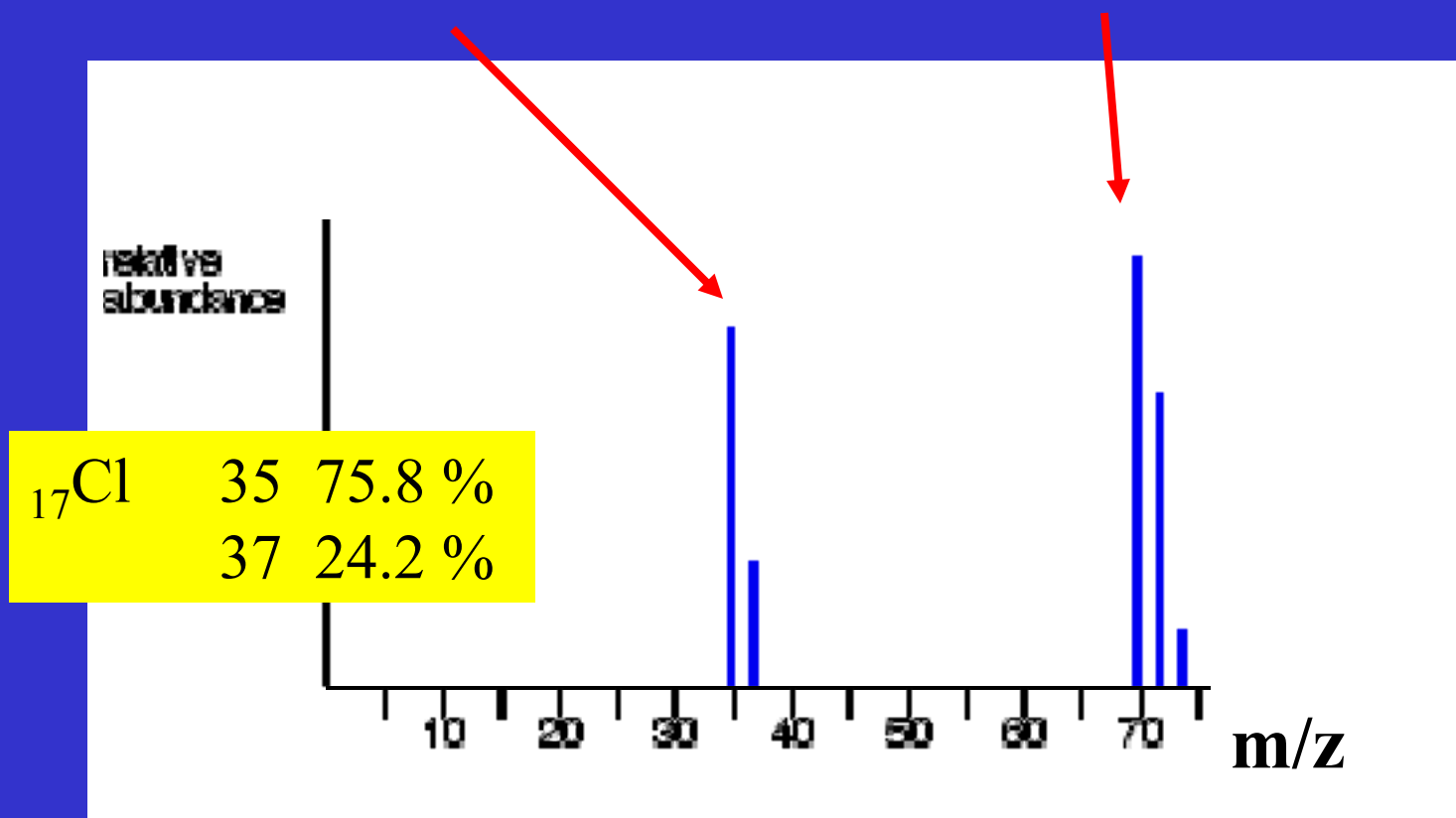
## Hmotnostní spektrum Hg

${}_{80}^A\text{Hg}$	%
196	0.146
198	10.02
199	16.84
200	23.13
201	13.22
202	29.80
204	6.850

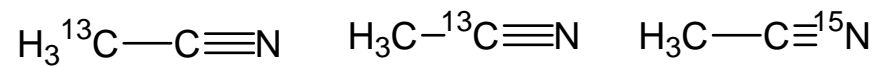
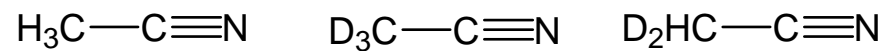
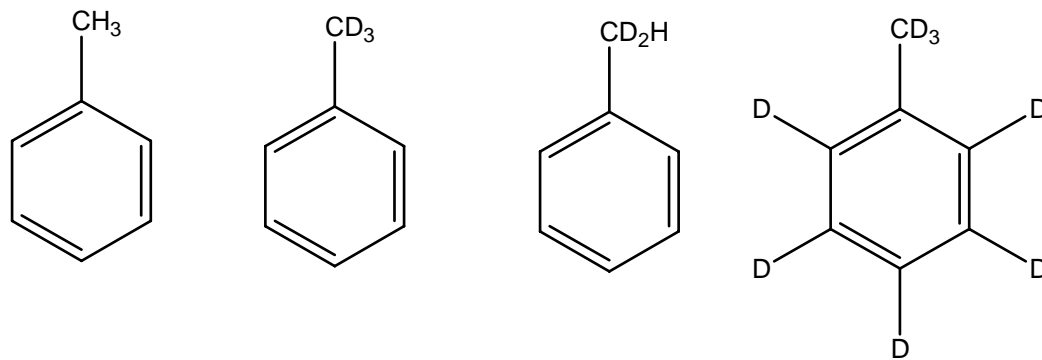


# Hmotnostní spektrum Cl<sub>2</sub>

$^{35}\text{Cl}^+$  a  $^{37}\text{Cl}^+$      $(^{35}\text{Cl}-^{35}\text{Cl})^+$      $(^{35}\text{Cl}-^{37}\text{Cl})^+$      $(^{37}\text{Cl}-^{37}\text{Cl})^+$



# Izotopomery



## Izotopická substituce

Značené sloučeniny  $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$  peptidy

IR spektrum, vibrace  $\text{AlH}_3/\text{AlD}_3$

Redukovaná hmotnost:  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

H/D kinetický izotopový efekt:  $k_{\text{H}}/k_{\text{D}} = 4 - 15$

## Hmotnost – mol – Avogadrova konstanta

Prvky se slučují ve stálých hmotnostních poměrech:

NaCl: 23.0 g sodíku s 35.5 g chloru

Škála relativních atomových hmotností:

H = 1.0, C = 12.0, O = 16.0

Definice molu: 12.0 g C = 1 mol

Pak 23.0 g Na = 1 mol

1 mol = 22.4 litru

Změřit kolik částic je v 1 molu = Loschmidt, Perrin,...

$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$



## Atomová hmotnostní jednotka

**Avogadrova hypotéza:** Při stejné teplotě a tlaku obsahují stejné objemy různých plynů stejný počet částic

Nejsnadnější bylo určit relativní atomové hmotnosti plynů

Kyslík váží 16krát více než vodík

Kyslík tvoří sloučeniny s většinou prvků, standard  $O = 16$

• **Chemická analýza dává průměrnou hmotnost**

$O = 16$  (směs izotopů)

• **Hmotnostní spektrometrie dává izotopovou hmotnost**

$^{16}O = 16$

# Atomová hmotnostní jednotka

1961 Atomová hmotnostní jednotka

kompromis mezi stupnicemi založenými na

$O^{16}O = 16$ , zvolili nuklid  $^{12}C$

$1 \text{ amu} = 1 \text{ u} = 1 \text{ m}_u = 1 \text{ d} = 1 \text{ (Dalton)} = 1/12 \text{ hmotnosti atomu nuklidu } ^{12}C$

$1 \text{ amu} = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

**Hmotnost 1 atomu  $^{12}C$  je 12 amu (definice)**

**Hmotnost 1 molu  $^{12}C$  je 12 g přesně (Počet platných číslic?)**

## Relativní atomová hmotnost

**Nuklidová hmotnost** = hmotnost čistého izotopu

**Atomová (střední) hmotnost prvku** = průměr hmotností izotopů vážený přirozeným zastoupením

**Relativní atomová hmotnost** =  $m(A) / \text{amu}$  [bezrozměrná]

1 amu =  $1.6606 \cdot 10^{-27}$  kg

$$A_r = \frac{m(\text{atomu})}{\text{amu}}$$

**Hmotnost 1 atomu  $^{12}\text{C}$  je 12 amu (definice) =  $12 \times 1.6606 \cdot 10^{-27}$  kg**

**Relativní atomová hmotnost  $^{12}\text{C} = 12$**

**Hmotnost 1 molu  $^{12}\text{C}$  je 12 g přesně**

## Střední atomová hmotnost

Přírodní C:

98.892 %  $^{12}\text{C}$  1.108 %  $^{13}\text{C}$

Nuklidová hmotnost  $^{12}\text{C} = 12$  amu

Nuklidová hmotnost  $^{13}\text{C} = 13.00335$  amu

Střední atomová hmotnost C (vážený průměr):

$$A_{\text{stř}} = (0.98892)(12) + (0.01108)(13.00335) = 12.011 \text{ amu}$$

$$1 \text{ amu} = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

# Střední atomová hmotnost

**Mo, molybden**

$$A_{\text{stř}} = 95.94$$

Hm. číslo	Nukl. Hmotnost, amu	Zastoupení, %
92	91.906808	14.84
94	93.905085	9.25
95	94.905840	15.92
96	95.904678	16.68
97	96.906020	9.55
98	97.905406	24.13
100	99.907477	9.63

## Střední atomová hmotnost

Prvek	Nuklidy	Z	N	A	Nuklidová hm., amu	PZ, %	Atomová hmotnost, amu
H	H	1	0	1	1.007825	99.985	1.0079
	D	1	1	2	2.01410	0.015	
	T	1	2	3			
He	<sup>3</sup> He	2	1	3	3.01603	0.00013	4.0026
	<sup>4</sup> He	2	2	4	4.00260	99.99987	
B	<sup>10</sup> B	5	5	10	10.01294	19.78	10.81
	<sup>11</sup> B	5	6	11	11.00931	80.22	
F	<sup>19</sup> F	9	10	19	18.99840	100	18.9984

Platné číslice

## Střední relativní atomová hmotnost



1 atom (průměrný) Mg má hmotnost 24.305 amu

1 mol Mg má hmotnost 24.305 g

## Relativní molekulová hmotnost

Výpočet  $M_r$  ze vzorce

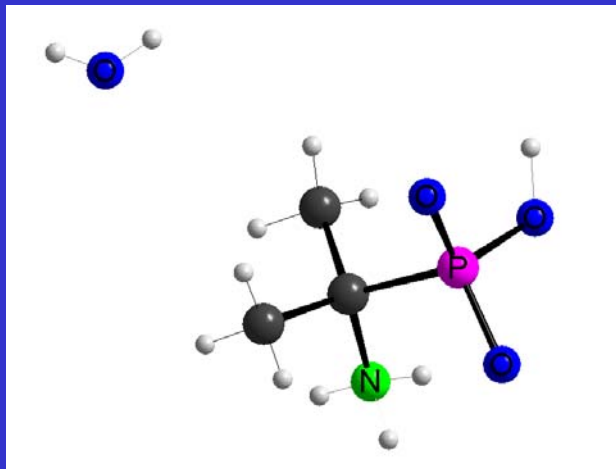
$$M_r(\text{CO}_2) = A_r(\text{C}) + 2 \times A_r(\text{O}) = 44.01$$

$$\begin{aligned} M_r(\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}) &= \\ &= A_r(\text{Cu}) + A_r(\text{S}) + (4 + 5) \times A_r(\text{O}) + 10 \times A_r(\text{H}) \\ &= 249.68 \end{aligned}$$

$$\text{Molární hmotnost } \text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O} = 249.68 \text{ g mol}^{-1}$$



## Výpočet % složení ze vzorce



$$M_r(\text{C}_3\text{H}_{12}\text{O}_4\text{PN}) =$$

$$= 3 \times A_r(\text{C}) + 12 \times A_r(\text{H}) + 4 \times A_r(\text{O})$$

$$+ 1 \times A_r(\text{P}) + 1 \times A_r(\text{N}) = 157.11$$

$$M_r(\text{C}_3\text{H}_{12}\text{O}_4\text{PN}) = 157.11 \dots\dots\dots 100\%$$

$$3 \times A_r(\text{C}) \dots\dots\dots 22.92\%$$

$$12 \times A_r(\text{H}) \dots\dots\dots 7.70\%$$

$$4 \times A_r(\text{O}) \dots\dots\dots 40.74\%$$

$$1 \times A_r(\text{P}) \dots\dots\dots 19.72\%$$

$$1 \times A_r(\text{N}) \dots\dots\dots 8.92\%$$

## Výpočet empirického vzorce

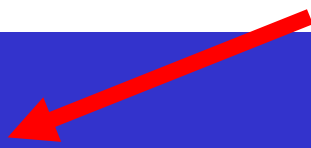
Vypočítejte stechiometrický vzorec sloučeniny, která se skládá z 26.58% K, 35.35% Cr a 38.07% O.

Hledáme stechiometrické koeficienty x, y, z

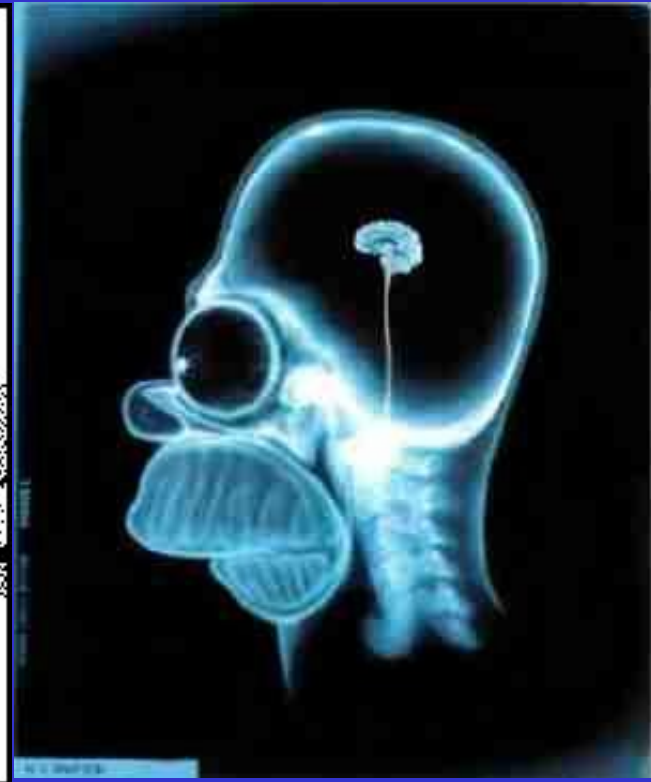
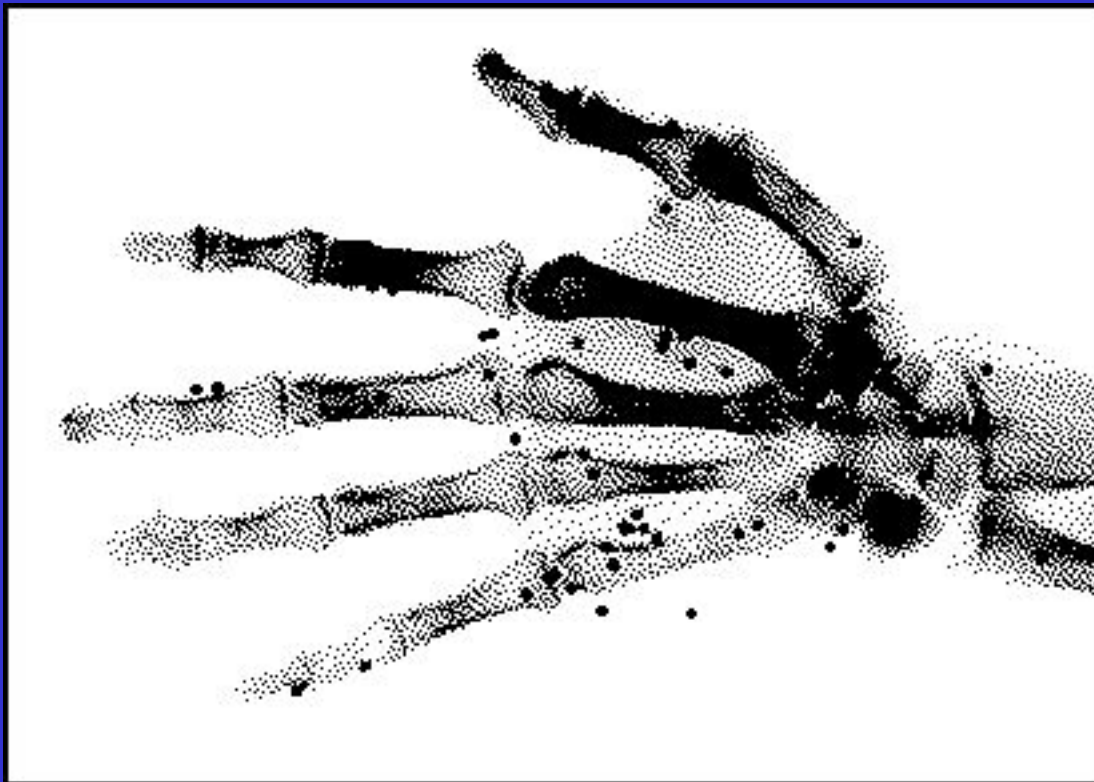


$$x = \frac{26.58}{39.098} = 0.6798\dots\dots\dots 1$$
$$y = \frac{35.35}{51.990} = 0.6799\dots\dots\dots 1.0001$$
$$z = \frac{38.07}{15.999} = 2.3795\dots\dots\dots 3.4998$$

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



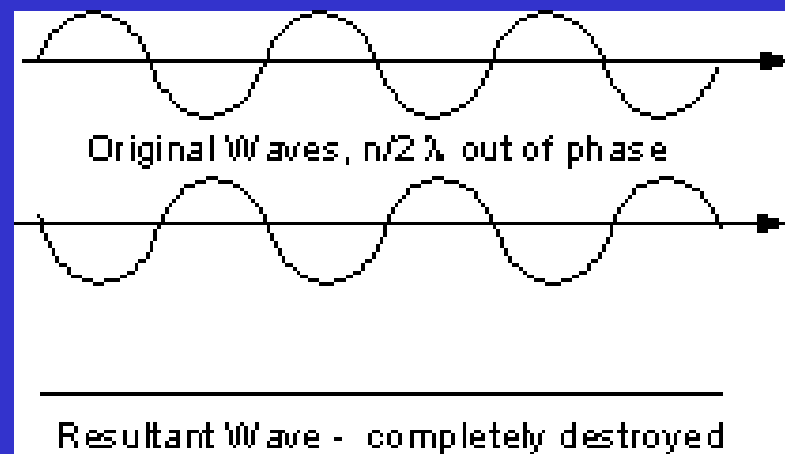
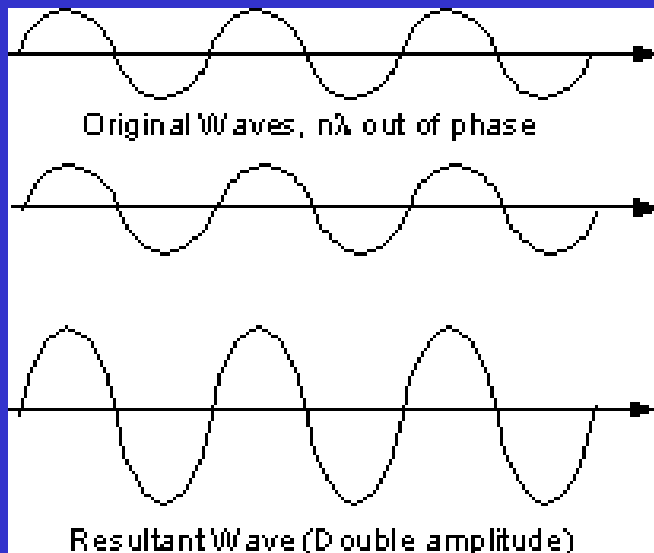
# Rentgenovo záření v medicíně a chemii



## Difrakce

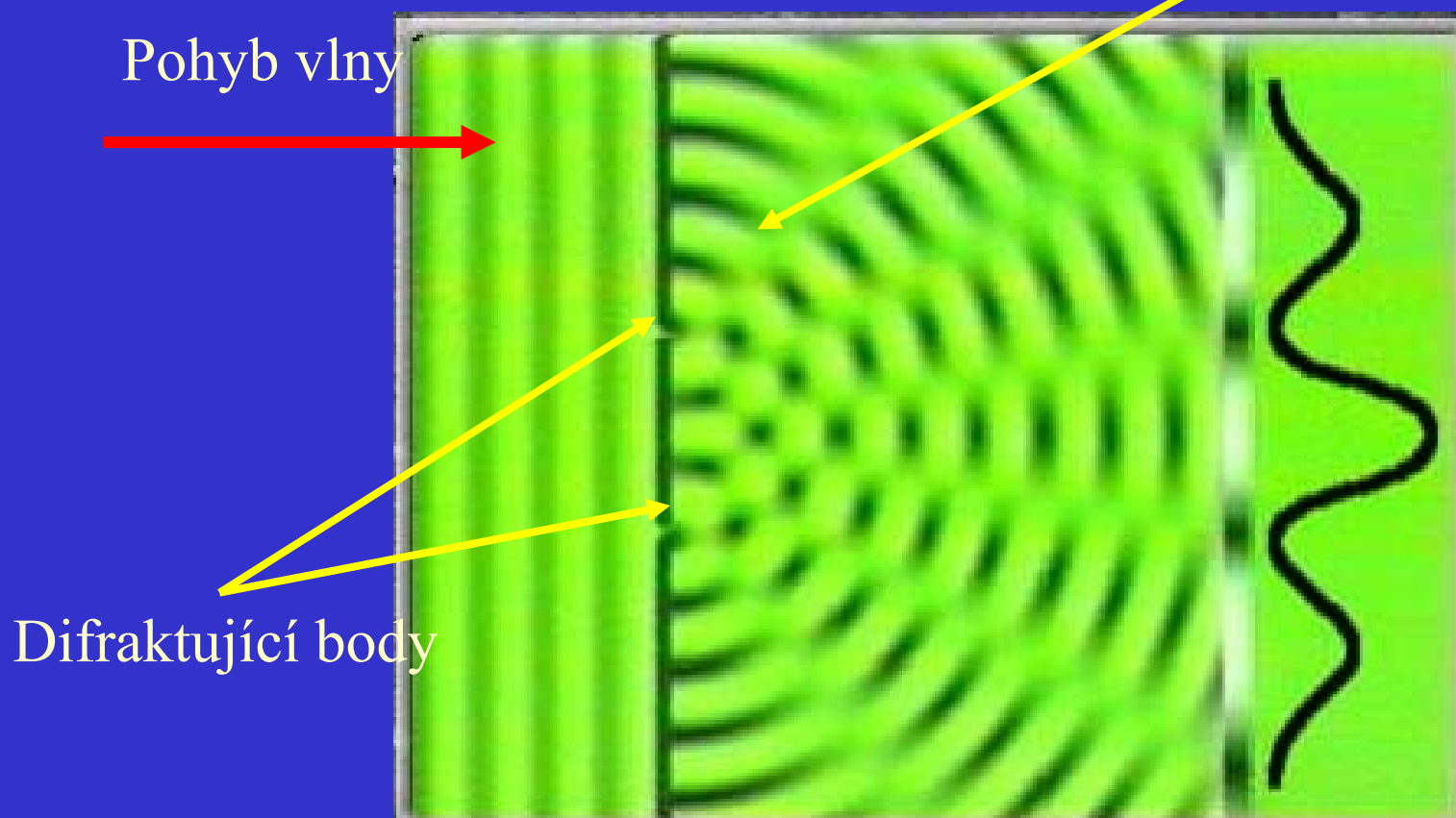
Spektroskopie – energetické hladiny, interpretace poskytne informace o vazebných parametrech

Difrakce – čistě geometrický jev, závisí na rozložení difraktujících bodů (atomů) a vlnové délce záření, poskytne přímé informace o rozložení atomů



## Difrakce záření

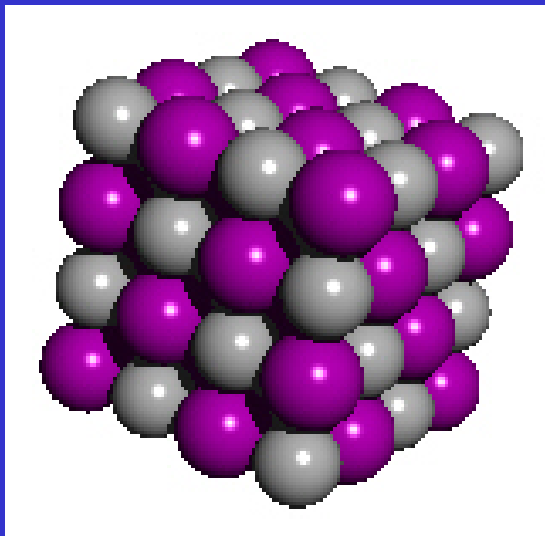
Vznikají kulové vlny  
interferují = sčítají se  
nebo odčítají



# Difrakce

1912 Difrakční experiment

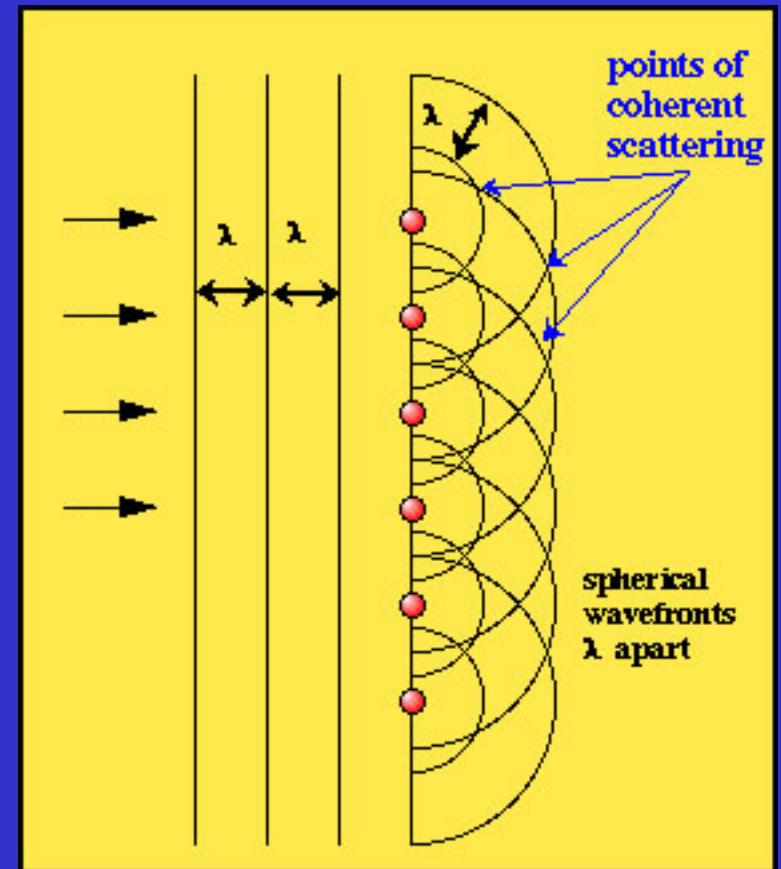
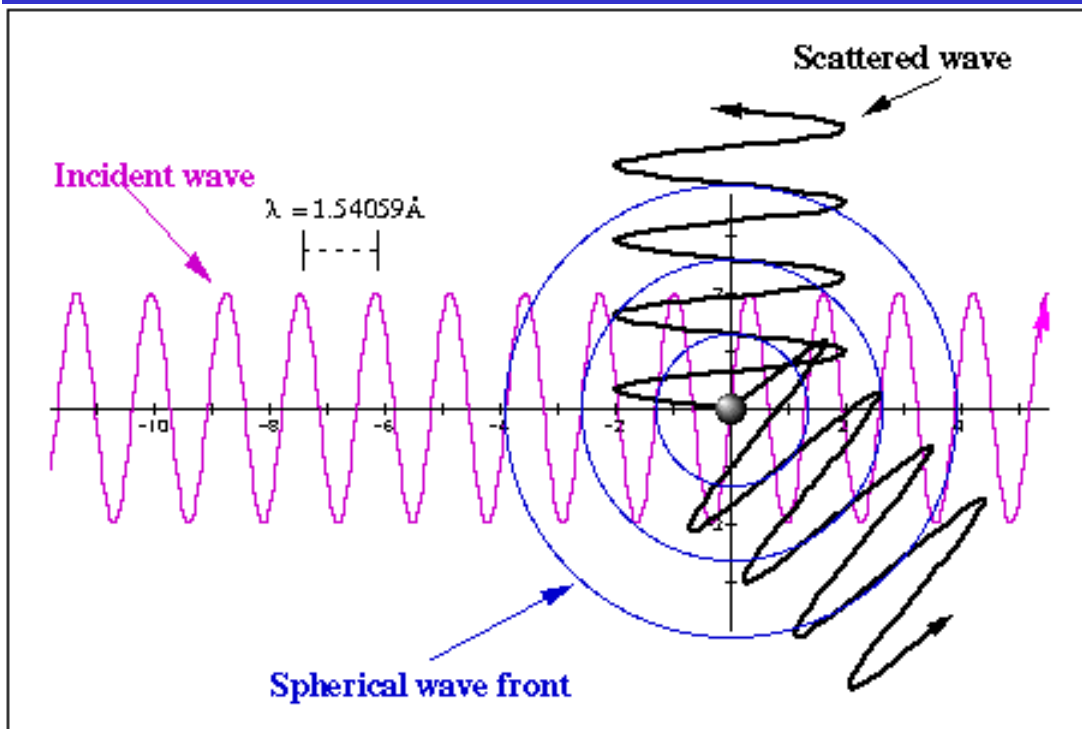
Přirozená mřížka = krystal, např. LiF, pravidelné uspořádání atomů. Vzdálenosti rovin (řádově jednotky Å) jsou srovnatelné s vlnovou délkou rentgenova záření.



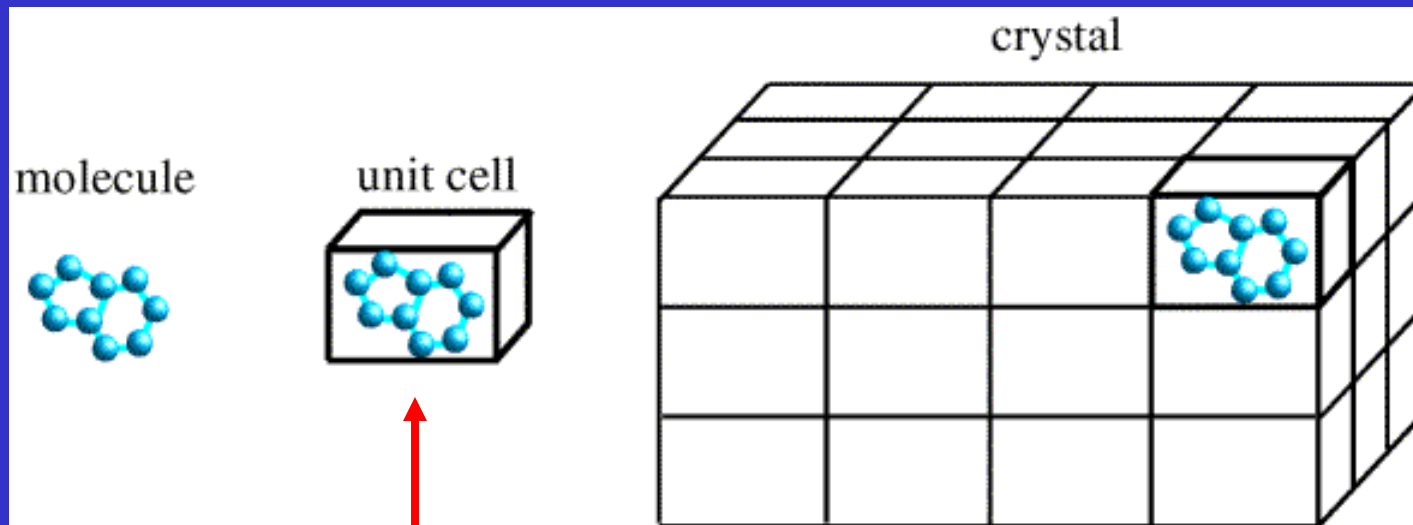
Max von Laue  
(1879-1960)

NP za fyziku 1914 78

# Difrakce na atomech



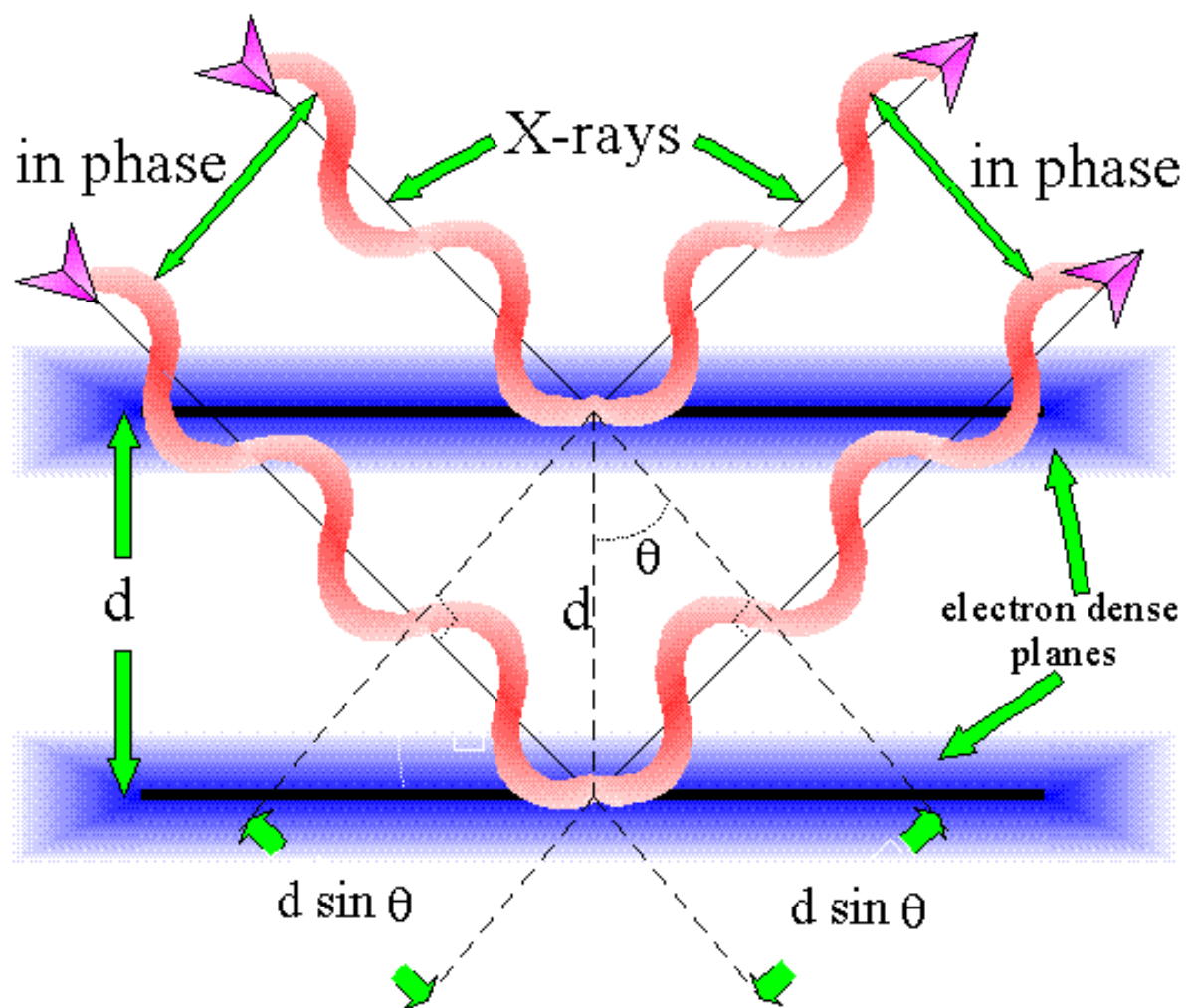
# Krystal



Základní buňka



# Difrakce na krystalových rovinách

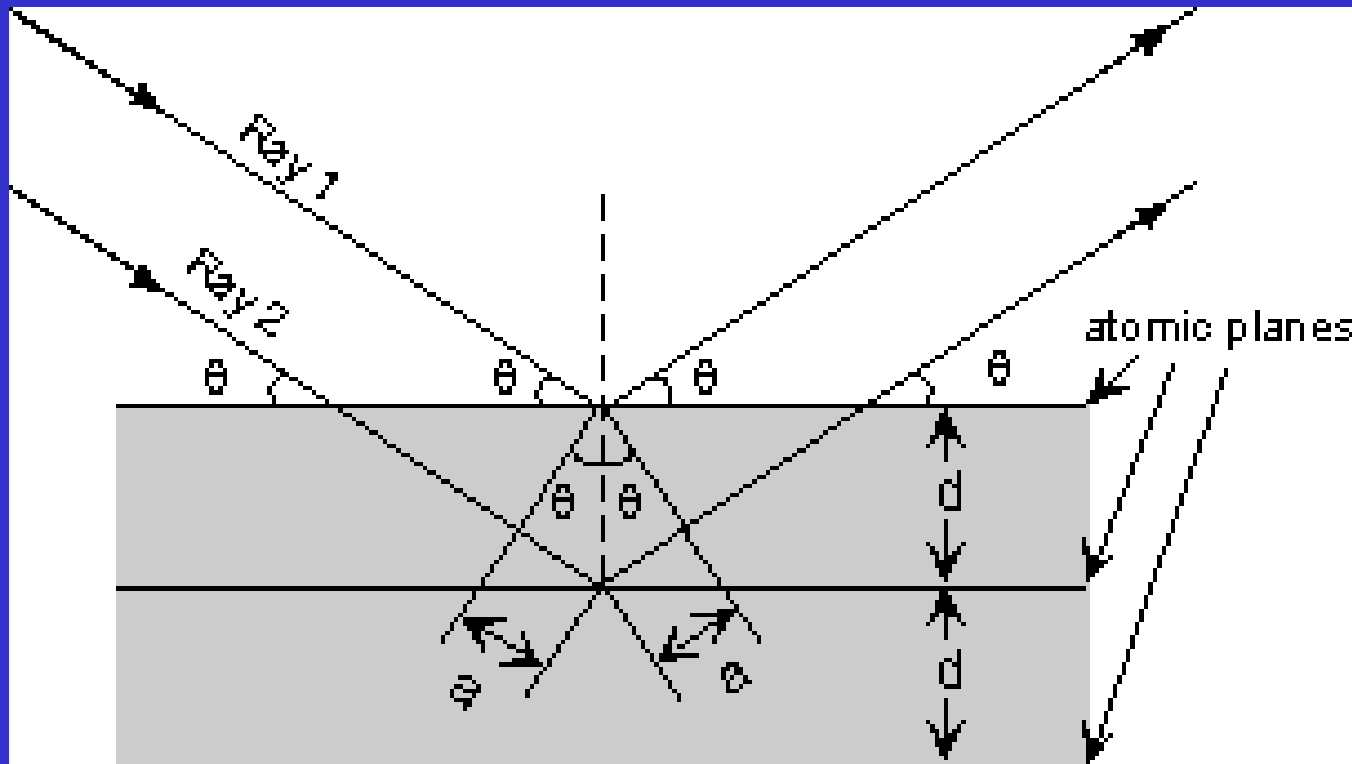


# Braggův zákon

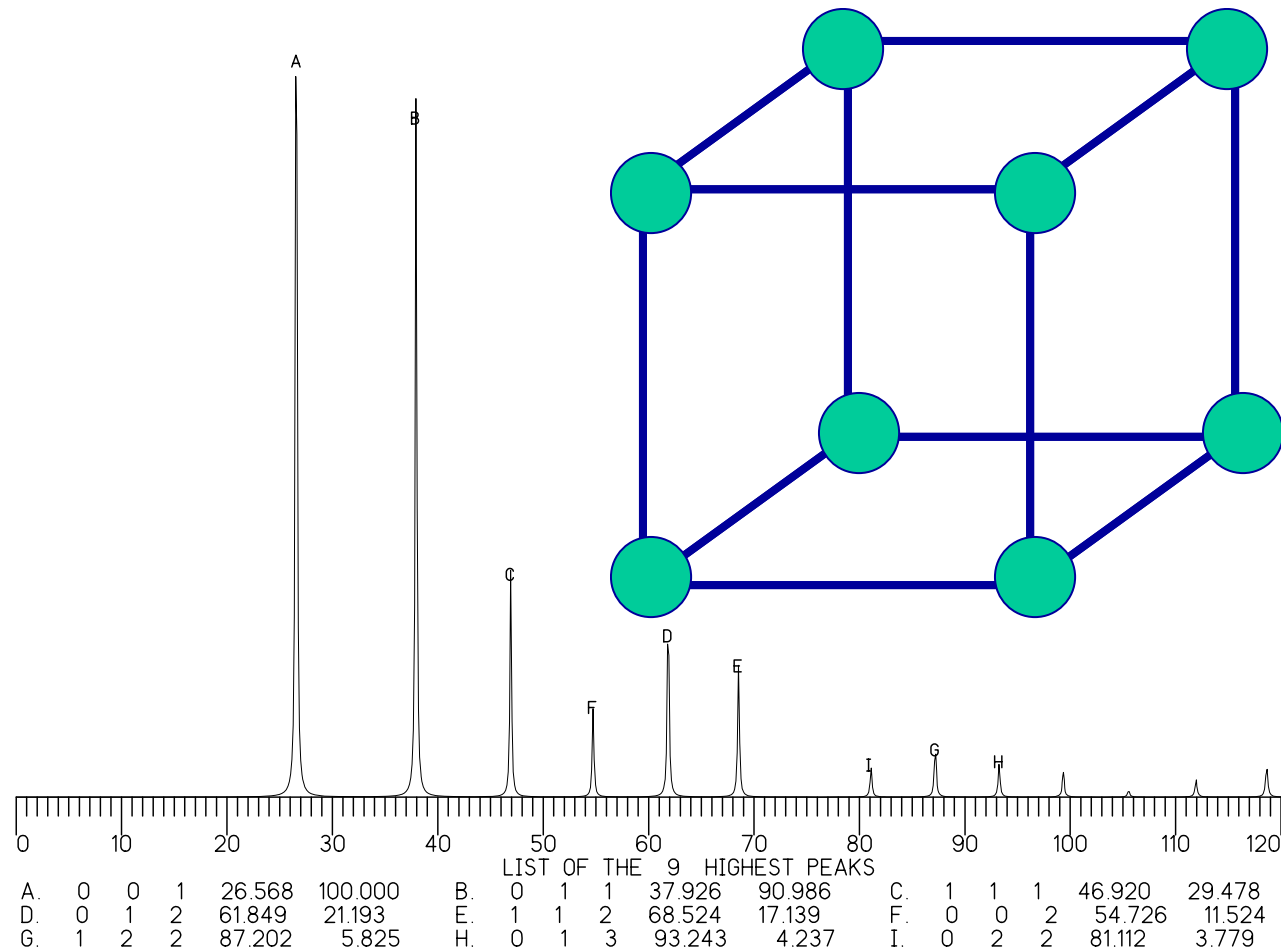


$$2 d \sin\theta = n\lambda$$

W. Henry a W. Lawrence Bragg  
NP za fyziku 1915



# Rentgenová prášková difrakce - Po



# Rentgenová strukturní analýza



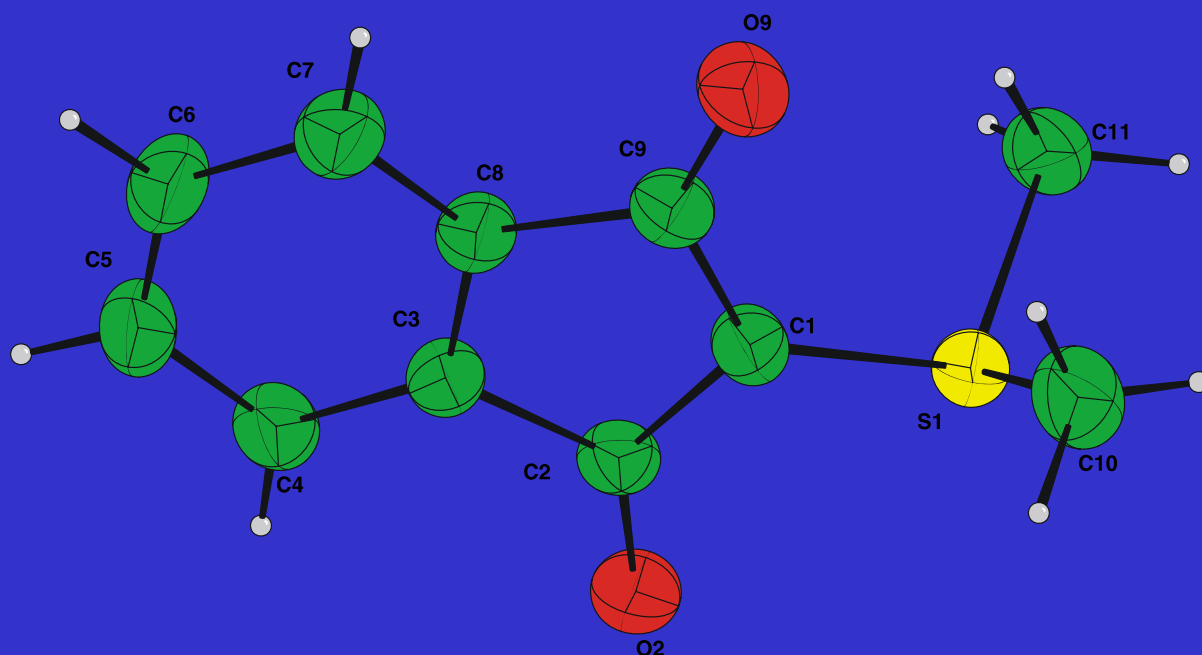
# Rentgenová strukturní analýza

Mapa elektronové hustoty

Polohy atomů v elementární buňce

Vazebné délky a úhly

Vibrace



# NMR



Jaderný spin,  $I$

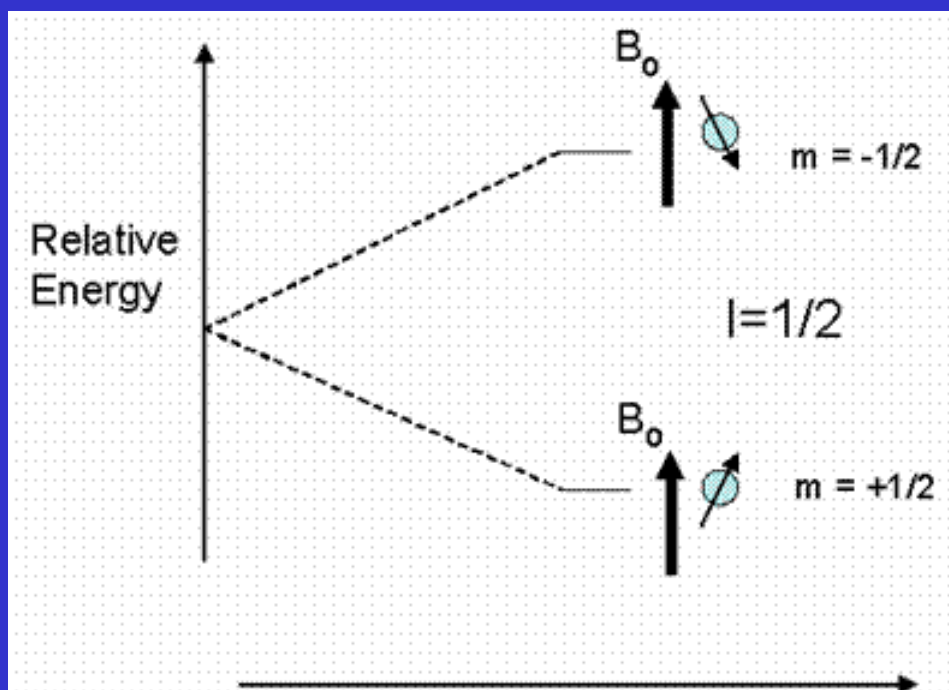
$I = 0$  :  $^{12}\text{C}$ ,  $^{16}\text{O}$  – sudo-sudá ( $Z/N$ )

$I = \frac{1}{2}$  : n, p,  $^{13}\text{C}$ ,  $^1\text{H}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{29}\text{Si}$

$I > \frac{1}{2}$  : D,  $^{27}\text{Al}$ ,  $^{14}\text{N}$



## Proton ( $I = 1/2$ ) v magnetickém poli



Rozdíl v energiích hladin

Intenzita magnetického pole  $B_0$

## Periodic Table of the Elements

<b>H</b>																	<b>He</b>
<b>Li</b>	<b>Be</b>											<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
<b>Na</b>	<b>Mg</b>											<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	<b>Ar</b>
<b>K</b>	<b>Ca</b>	<b>Sc</b>	<b>Ti</b>	<b>V</b>	<b>Cr</b>	<b>Mn</b>	<b>Fe</b>	<b>Co</b>	<b>Ni</b>	<b>Cu</b>	<b>Zn</b>	<b>Ga</b>	<b>Ge</b>	<b>As</b>	<b>Se</b>	<b>Br</b>	<b>Kr</b>
<b>Rb</b>	<b>Sr</b>	<b>Y</b>	<b>Zr</b>	<b>Nb</b>	<b>Mo</b>	<b>Tc</b>	<b>Ru</b>	<b>Rh</b>	<b>Pd</b>	<b>Ag</b>	<b>Cd</b>	<b>In</b>	<b>Sn</b>	<b>Sb</b>	<b>Te</b>	<b>I</b>	<b>Xe</b>
<b>Cs</b>	<b>Ba</b>	<b>La</b>	<b>Hf</b>	<b>Ta</b>	<b>W</b>		<b>Os</b>	<b>Ir</b>	<b>Pt</b>	<b>Au</b>	<b>Hg</b>	<b>Tl</b>	<b>Pb</b>	<b>Bi</b>	<b>Po</b>	<b>At</b>	<b>Rn</b>



NMR active nuclei



Frequently measured nuclei



Not active nuclei

<i>I</i>	Nuclide	<i>I</i>	Nuclide
0	$^{12}\text{C}, ^{16}\text{O}$	3/2	$^{11}\text{B}, ^{23}\text{Na}, ^{35}\text{Cl}, ^{37}\text{Cl}$
1/2	$^1\text{H}, ^{13}\text{C}, ^{15}\text{N}, ^{19}\text{F}, ^{29}\text{Si}, ^{31}\text{P}$	5/3	$^{17}\text{O}, ^{27}\text{Al}$
1	$^2\text{H}, ^{14}\text{N}$	3	$^{10}\text{B}$



# NMR

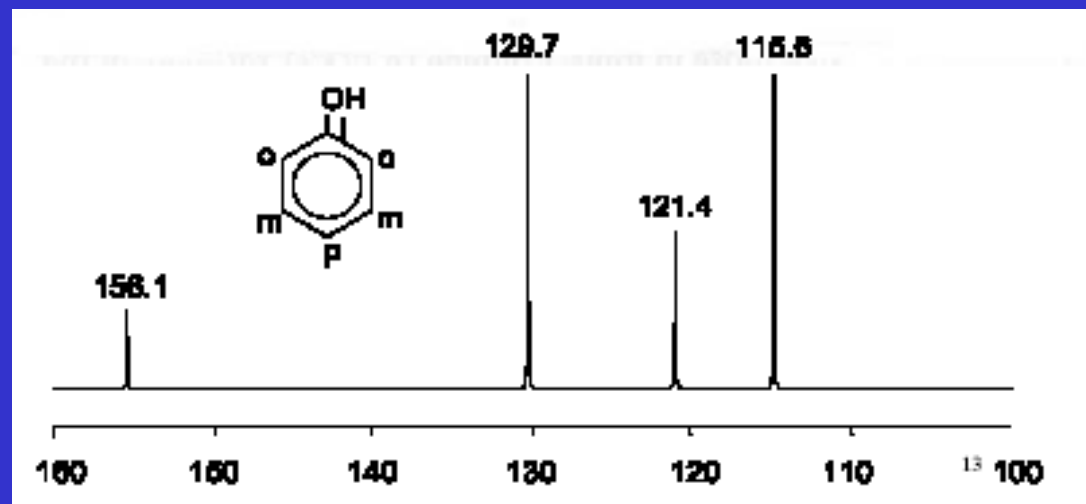
Rozliší

Geometricky (tedy i chemicky) odlišné atomy v molekule

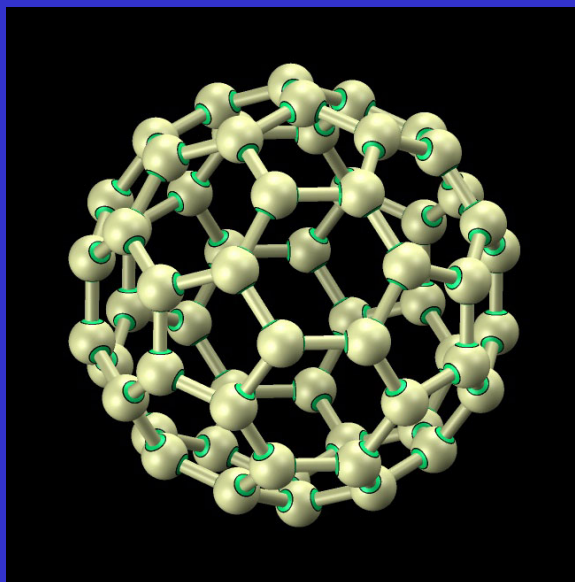
Intenzita signálu odpovídá počtu jader

Z interakcí lze zjistit propojení fragmentů v molekule

$^{13}\text{C}$  NMR



# NMR

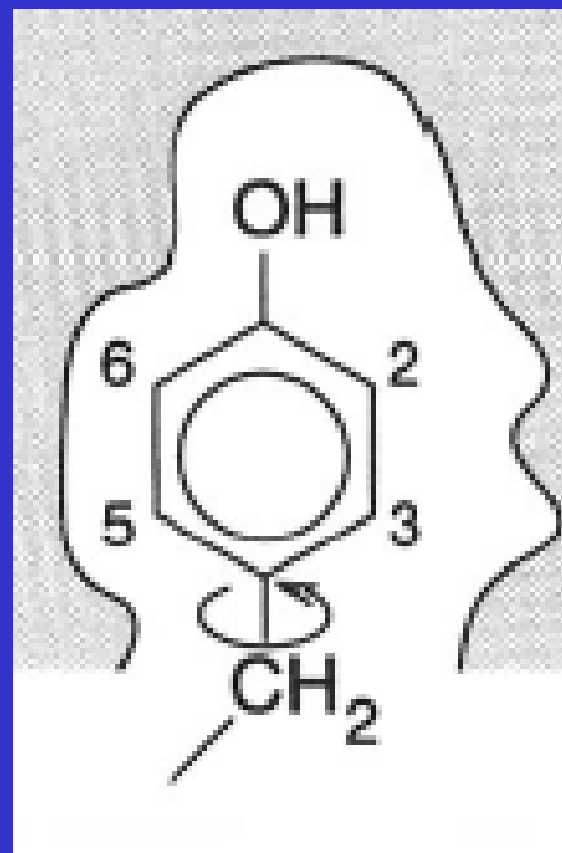
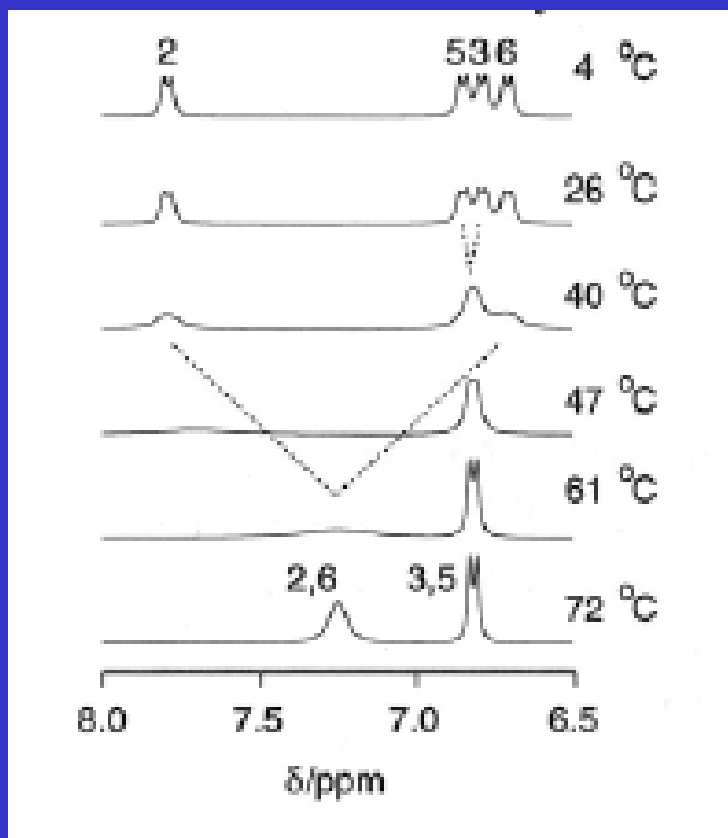


$C_{60}$  je vysoce symetrická molekula, všechny atomy jsou geometricky (tedy i chemicky) stejné.

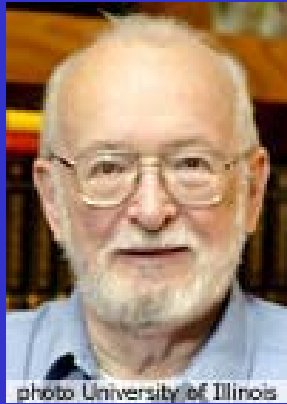
Jediný signál v  $^{13}C$  NMR spektru

# NMR

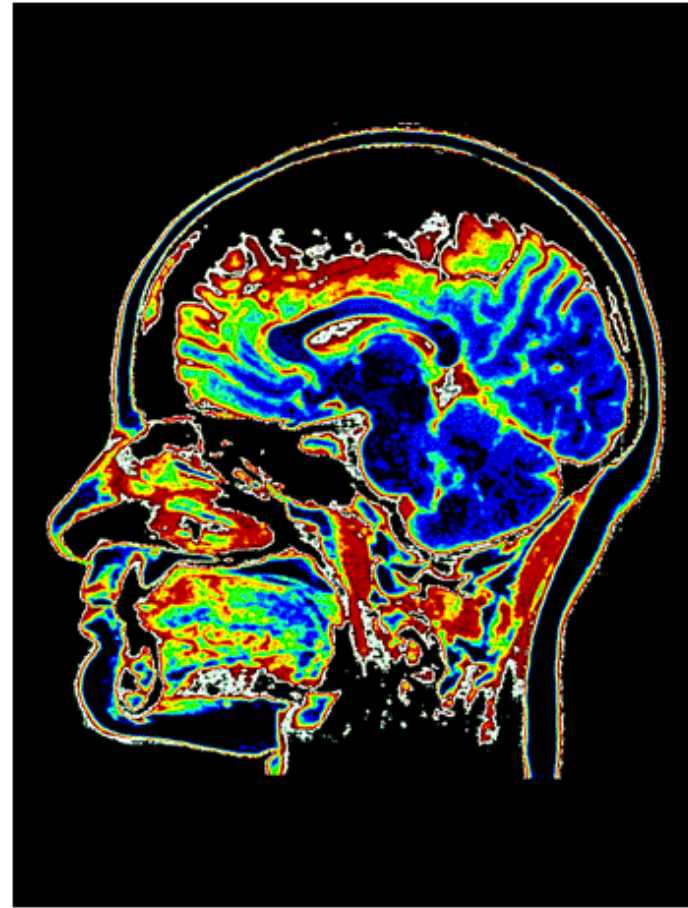
Dynamika pohybu molekul v závislosti na teplotě



# MRI-Magnetic Resonance Imaging



Paul C. Lauterbur  
(1929)



Sir Peter Mansfield  
(1933)