

## Obecná chemie C1020

### Sylabus přednášky

Doc. RNDr. Jiří Pinkas, Ph. D.

1. Věda a vědecká metoda. Historie chemie. Přírodní zákony, teorie, model, experiment. Veličiny, rozměry a jednotky SI: délka, čas, hmotnost, elektrický náboj, síla, tlak, teplota, energie. Planckova a Einsteinova rovnice. Měření, přesnost a správnost měření, platné číslice, operace s platnými číslicemi. Hmoty, látka. Vlastnosti a stavy hmoty. Základní pojmy vazby: izolované částice, vázaný stav, potenciálová křivka, energie vazby. Chemické látky, fyzikální a chemické vlastnosti a změny, čisté látky, směsi, dělení směsí. Základní chemické zákony: zákon zachování hmoty, zákon stálých slučovacích poměrů, zákon násobných poměrů, ekvivalence energie a hmoty. Nestechiometrické sloučeniny. Daltonova atomová teorie. Zákon stálých slučovacích objemů. Avogadrův zákon. Látkové množství, Avogadrova konstanta.

2. Pojem prvku v historii. Prvky a sloučeniny. Prvek, allotropie, atomová hmotnost. Sloučeniny. Konstituce, topologie, izomerie. Molekula, chemické vzorce, krystalová struktura. Molární, molekulové, elektronové a atomové vlastnosti. Pojem atomu. Nukleární model atomu. Složení atomu, základní elementární částice, protonové, neutronové a nukleonové číslo. Roentgenovo záření. Mosleyho zákon. Hmotnostní spektrometrie, stanovení relativních atomových hmotností a izotopového složení prvků. Atomová hmotnostní jednotka, hmotnost atomů a molekul, relativní nuklidová a atomová hmotnost. Látkové množství, molární hmotnost, Avogadrova konstanta. Procentové složení, výpočet empirického vzorce. Chemické rovnice, stechiometrické výpočty, limitní reagent, teoretický a praktický výtěžek reakce, vyjadřování koncentrace. Názvosloví chemických sloučenin. Difrakce a rentgenová strukturní analýza. Jaderný spin, magnetický moment jader a NMR spektroskopie.

3. Atomové jádro, pojem prvku, nuklidu, izotopu, izotonu a izobaru, vazebná energie jádra. Radioaktivita: základní podmínka, typy radioaktivních přeměn, posunové zákony, hmotnostní úbytek, stabilita jader, alfa-, beta- a gama- radioaktivita, spontánní štěpení, Fajans-Soddyho posunová pravidla, jaderné reakce a jejich symbolika. Radioaktivní nuklidy a prvky. Kinetika radioaktivního rozpadu, poločas rozpadu. Datování pomocí  $^{14}\text{C}$ . Leptony, kvarky, hadrony, mezony, baryony, zákony zachování baryonového a leptonového čísla.

4. Elektronový obal atomu. Veličiny a jednotky: vlnová délka, vlnočet, frekvence. Čárová spektra prvků, fotoelektrický jev. Bohrov a Sommerfeldův model atomu, Bohrova teorie vodíkového atomu, emisní spektra atomu vodíku. Fyzikální rozdíly mikro- a makrosvěta, vlnově-částicový charakter mikročástic, elektronu, dualismus hmoty. Heisenbergův princip neurčitosti. Kvantování energie elektronů v atomu. Schrödingerova vlnová rovnice, vlnová funkce.

5. Vlnová funkce atomu vodíku, radiální a azimutální část, kvantová čísla  $n$ ,  $l$ ,  $m$  a  $s$ . Atomový orbital, typy atomových orbitalů, jejich tvar, hraniční plocha. Znázornění výskytu elektronu v atomovém orbitalu: pravděpodobnost výskytu částice, hustota pravděpodobnosti, elektronová hustota a distribuční funkce, maxima a uzlové roviny. Energie atomových orbitalů ve vodíkovém atomu. Elektronová konfigurace valenční slupky. Výstavbový princip, Pauliho princip, Hundovo pravidlo, stabilita zpola a úplně zaplněných atomových orbitalů, změna pořadí energií atomových orbitalů  $4s$  a  $3d$  u první skupiny přechodných prvků. Valenční sféra. Efektivní atomové číslo, stínění vnějších elektronů, odstranění degenerace energetických stavů, energie atomových orbitalů v atomech s dvěma a více elektrony. Závislost energie atomových orbitalů na atomovém čísle: Rentgenovo záření, Moseleyho zákon.

6. Periodická tabulka, periodický zákon, skupiny, periody, elektronové konfigurace prvků. Vlastnosti atomů a jejich periodicitu: atomové, iontové a kovalentní poloměry, ionizační energie, elektronová afinita, elektronegativita, polarizovatelnost. Kovy, polokovy, nekovy. Binární sloučeniny, polyatomické sloučeniny. Chemické názvosloví.

7. Chemická vazba, potenciálová křivka. Typy chemických vazeb: Kovalentní, kovová, iontová. Van Arkelův trojúhelník. Iontová vazba, mřížková energie, Born-Haberův cyklus. Kovalentní vazba, Lewisovy strukturní

vzorce, rezonanční struktury, formální náboj. Tvar molekul, metoda VSEPR. Vlnově-mechanický model vazby, překryv atomových orbitalů, integrál překryvu, typy překryvů ( $\sigma$ ,  $\pi$ ,  $\delta$ ). Hybridizace. Molekuly s násobnými vazbami. Delokalizované p-systémy, aromatické sloučeniny, resonance, vazebné poměry v uhličitánovém iontu a v benzenu. Hypervalentní sloučeniny. Sloučeniny s nedostatkem elektronů, borany, klastry. Polární kovalentní vazba, indukční a mezomerní efekt.

8. Symetrie. Prvky a operace symetrie, symetrie molekul a iontů, chiralita, asymetrický atom, spirála, polarita. Dipólový moment. Molekulové orbitály (MO) a metoda MO-LCAO, výstavbový princip MO, mísení s-p orbitalů.

9. Interakční molekulové diagramy biatomických homo- a heteronukleárních molekul, víceatomové molekuly, polarita, stupeň iontovosti, vazebný řád, délka kovalentní vazby, vazebná energie, disociační energie. Vibrační spektroskopie. Základní a excitované stavy atomu, deexcitace, atomová spektra, výběrové pravidlo, spektrum vodíkového atomu. Excitace molekul: elektronová, rotační a vibračně-rotační. Molekulová spektra, infračervená a Ramanova spektroskopie. Deexcitace molekul: luminiscence (fosforescence a fluorescence).

10. Koordinační sloučeniny. Donor-akceptorová vazba. Centrální atom, ligand, geometrie komplexů, koordinační polyedry, cheláty, chelátový efekt, vícejaderné komplexy, strukturální izomerie (vazebná, koordinační a ionizační); prostorová izomerie (geometrická, optická). Názvosloví koordinačních sloučenin. Donor-akceptorové vlastnosti ligandů, spektrochemická řada. Elektronové konfigurace d-elektronů, rozštěpení d-hladin. Základy teorie ligandového pole, oktaedrické, tetraedrické a tetragonální komplexy, vysoko- a nízkospinové komplexy, Jahn-Tellerův efekt, spektrální a magnetické vlastnosti komplexů. Magnetické vlastnosti látek, magnetický moment atomu a jádra, dia- a s, ferro- a antiferromagnetismus.

11. Slabé vazebné interakce. Slabé interakce (van der Waalovy síly, vazba vodíkovým můstkem). Potenciálová křivka slabých interakcí. Interakce van der Waalovy: disperzní síly, interakce molekul s permanentním dipólem, interakce dipól - indukovaný dipól. Vodíková vazba. Krystalové mřížky molekulárních látek. Slabé vazebné interakce a skupenské přeměny. Interakce ion - dipól: hydratace iontů. Organizace, kapalně krystalové, mesoporézní látky.

12. Pevné skupenství a vlastnosti pevných látek. Krystalické, amorfní látky. Krystalizace. Krystalová mřížka, strukturální motiv, elementární buňka. Pásová teorie vazby v pevných látkách, delokalizované orbitály v krystalu kovu, kovová vazba, síla vazby, vodiče, polovodiče a izolanty. Elektrická a tepelná vodivost kovů, kapalně krystalový stav za normální teploty. Slitiny: substituční tuhé roztoky, slitiny s omezenou mísitelností složek v tuhém stavu, intersticiální tuhé roztoky, slitiny obsahující intermetalické sloučeniny. Krystalové mřížky kovů, nejtěsnější uspořádání. Základní strukturální typy. Zjišťování krystalové struktury: difrakce rentgenového záření. Rentgenová strukturální analýza. Madelungova konstanta, mřížková energie.

13. Mezery v nejtěsnějším uspořádání, krystalové mřížky jednoduchých iontových sloučenin (CsCl, NaCl, ZnS). Pásová teorie tuhých látek v iontových krystalech, vodivost a barevnost iontových krystalů. Krystalové mřížky kovalentních látek: molekulové a kovalentní krystalové, nevodivost diamantu, vodivost grafitu, polovodiče. Allotropie, polymorfie, izomorfie.

14. Energie v chemii. Základní pojmy chemické termodynamiky: soustava, okolí, extenzivní a intenzivní vlastnosti, stav soustavy, stavová funkce. Formy energie v chemii, objemová práce plynu. Vnitřní energie, první věta termodynamiky. Reakční teplo při konstantním objemu a konstantním tlaku, enthalpie. Exo- a endotermické děje. Enthalpie prvků, slučovací a reakční enthalpie. Hessův zákon. Určování energie vazby pomocí Hessova zákona. Born-Haberův cyklus, mřížková energie.

15. Entropie, uspořádanost soustavy. Gibbsova volná energie. Samovolný průběh reakce. Energetické změny při průběhu chemických reakcí, základní termodynamické veličiny (U, H, G, S) a zákony, termodynamické

podmínky průběhu chemických reakcí. Vratné reakce, zákon rovnováhy, rovnovážná konstanta, vliv změny koncentrace, tlaku a teploty na rovnováhu, Le Chatelier-Brownův princip.

16. Chemické reakce. Reakční kinetika, rychlost reakce, rychlostní rovnice (zákon), rychlostní konstanta, řád reakce. Reakce 0., 1. a 2. řádu, poločas reakce. Srážková teorie reakční rychlosti, Arrheniova rovnice, Maxwell-Boltzmannovo rozdělení rychlostí, účinné srážky, aktivační energie, reakční koordináta. Teorie aktivovaného komplexu, Eyringova rovnice. Mechanismus reakce, molekularita reakce, krok určující rychlost reakce. Katalýza: katalyzátory, reakční koordináta katalyzované reakce, homogenní katalýza (reakce v~plynech, acidobázická a oxidoredukční katalýza). Adsorpce a chemisorpce, heterogenní katalýza. Fotochemické reakce. Řetězové reakce, radikálové reakce. Kinetika a chemická rovnováha, faktory ovlivňující chemickou rovnováhu, Le Chatelierův princip. </p>

17. Kapaliny, struktura kapalin, Eyringova děrová teorie kapalin. Povrchové napětí, viskozita. Vypařování v~otevřeném a uzavřeném prostoru, tenze par kapalin. Fázový diagram. Ideální kapaliny. Difúze, Fickův zákon.

18. Roztoky, vyjadřování koncentrace. Vodivost roztoků, elektrolytická disociace, solvatace a asociace iontů, rozpustnost. Typy roztoků a rozpouštědel. Proces rozpouštění: změna volné energie, mezimolekulární a meziiontové interakce. Rozpustnost plynů v~kapalinách. Rozpustnost kovalentních látek. Rozpustnost iontových látek, hydratační a rozpouštěcí enthalpie, vliv teploty na rozpustnost solí. Mísitelnost kapalin, parametr rozpustnosti. Elektrolytická disociace iontových látek, silné a slabé elektrolyty, elektrolytická vodivost, aktivita elektrolytu, aktivitní koeficient, iontová síla roztoku. Iontové sloučeniny málo rozpustné ve vodě: součin rozpustnosti, srážení, LeChatelier-Braunův princip v~rovnováhách málo rozpustných iontových sloučenin. Vypařování směsi dvou ideálních kapalin, Raoultův zákon, snížení tenze páry. Vypařování směsi neideálních kapalin - odchylky od Raoultova zákona. Souvislost vlastností kapalin s~mezimolekulárními silami. Tenze páry rozpouštědla nad roztokem. Vypařování roztoků netěkavých látek, tenze páry rozpouštědla nad roztokem. Osmotický tlak zředěného roztoku. Koloidní soustavy. </p>

19. Acidobázické reakce. Arrheniova, Brønstedova-Lawryho a Lewisova teorie kyselin a zásad, síla kyselin a zásad, disociační konstanta, vícesytné kyseliny, vytěšňování slabých kyselin a zásad. Acidita a bazicita vodných roztoků, autoionizace vody, stupnice pH, pH roztoků silných a slabých kyselin. Neutralizace. Amfiprotní látky. Acidobázické indikátory. Hydrolytické rovnováhy, hydrolýza solí. Tlumivé roztoky, kapacita tlumivých roztoků. HSAB Pearsonova teorie kyselin a zásad. Acidobázické reakce v~nevodných protických rozpouštědlech. Acidobázické reakce v~aprotických rozpouštědlech: solvotomie kyselin a zásad, superkyselá prostředí, síla kyselin, stupnice H. </p>

20. Oxidačně-redukční reakce a základy elektrochemie. Oxidace a redukce. Redoxní páry. Vyčíslování redoxních rovnic. Elektroda prvního druhu, Nernstova rovnice, vodíková elektroda, galvanický článek, standardní redukční potenciál. Koncentrační článek. Oxidoredukční elektroda, Petersova rovnice. Změna Gibbsovy volné energie a rovnovážná konstanta elektrochemických reakcí. Disproporcionační reakce. Elektrolytický článek, elektrolyza roztavených solí a vodných roztoků, anodické a katodické reakce, Faradayův zákon. Elektrochemické zdroje proudu. </p>

21. Plynné skupenství. Boyleův zákon, Charlesův zákon, Avogadrův zákon. Ideální plyn, stavová rovnice ideálního plynu. Daltonův zákon parciálních tlaků. Chování neideálního plynu, van der Waalsova stavová rovnice neideálního plynu. Zkapalňování plynů. Kinetická teorie plynů, Maxwell-Boltzmannova funkce rozdělení rychlostí, střední kinetická energie a rychlost molekul plynu, počet srážek molekul plynu. Transportní jevy v~plynech, Grahamův zákon. Stavová rovnice pro kapaliny, tenze páry, povrchové napětí, viskozita kapalin. </p>

22. Rovnováha ve vícefázovém systému, Gibbsovo pravidlo fází, definice fáze, složky a stupně volnosti, Srážení a součin rozpustnosti, vlastnosti zředěných roztoků, Raoultův zákon, ebullioskopie a kryoskopie, základní fázové diagramy jedno- a dvousložkových systémů, destilace, rektifikace a destilace s~vodní parou, sublimace, tavení. Heterogenní rovnováhy. Základní pojmy fázových rovnováh, Gibbsův zákon rovnováhy fází.

Fázový diagram jednosložkové soustavy, sublimace, fázový diagram síry a helia, metastabilní stavy. Fázové diagramy dvousložkových soustav: dvě neomezeně mísitelné kapaliny s malými odchylkami od Raoultova zákona, frakční destilace, azeotropické směsi; fázový diagram soustavy voda rozpustná látka, chladicí směs, tvorba hydrátů; fázový diagram směsi dvou roztavených látek. </p>