

Obecná chemie C1020

Sylabus přednášky

prof. RNDr. Jiří Pinkas, Ph. D.

L1. Věda a vědecká metoda. Pozorování a vysvětlení. Vědecký jazyk. Přírodní zákony, teorie, model, experiment. Historie chemie. Veličiny, rozměry a jednotky SI: hmotnost, látkové množství, délka, objem, hustota, čas, frekvence, síla, elektrický náboj, tlak, teplota, energie. Planckova a Einsteinova rovnice. Základní pojmy vazby: izolované částice, vázaný stav, potenciálová křivka, energie vazby.

L2. Měření, přesnost a správnost měření, platné číslice, operace s platnými číslicemi. Hmota, látka. Vlastnosti a stavy hmoty. Chemické látky, fyzikální a chemické vlastnosti a změny, čisté látky, směsi, dělení směsí. Základní chemické zákony: zákon zachování hmoty, ekvivalence energie a hmoty, zákon stálých slučovacích poměrů, zákon násobných poměrů. Nestechiometrické sloučeniny. Daltonova atomová teorie. Zákon stálých slučovacích objemů. Avogadrův zákon. Látkové množství, Avogadrova konstanta. Pojem prvku a atomu v historii. Prvky a sloučeniny. Prvek, allotropie, atomová hmotnost. Sloučeniny. Konstituce, topologie, izomerie. Molekula, chemické vzorce, krystalová struktura. Molární, molekulové, elektronové a atomové vlastnosti. Složení atomu, historie, objev elektronu, Thomsonův model atomu.

L3. Elektron, náboj elektronu. Rutherfordův 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.

L4. 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. Syntéza jader ve vesmíru. Štěpení jader, řetězová reakce. Kinetika radioaktivního rozpadu, poločas rozpadu. Datování pomocí ^{14}C . Leptony, kvarky, hadrony, mezony, baryony, zákony zachování baryonového a leptonového čísla.

L5. Elektronový obal atomu. Spektrum elektromagnetického záření, vlnová délka, vlnočet, frekvence. Čárová spektra prvků, záření černého tělesa, kvantování energie, fotoelektrický jev. Bohrovův 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.

L6. 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. Efektivní náboj jádra, stínění vnějších elektronů, odstranění degenerace energetických stavů, energie atomových orbitalů v atomech s dvěma a více elektrony. Elektronová konfigurace valenční slupky, Výstavbový princip, Pauliho princip, Hundovo pravidlo, stabilita zcela a úplně zaplněných atomových orbitalů, změna pořadí energií atomových orbitalů $4s$ a $3d$ u první skupiny přechodných prvků. Závislost energie atomových orbitalů na atomovém čísle: Rentgenovo záření, Moseleyho zákon.

L7. Periodická tabulka, historický vývoj. Periodický zákon, skupiny, periody, elektronové konfigurace přechodných a nepřechodných prvků, lanthanoidů a aktinoidů. Vlastnosti atomů a jejich periodičita: atomové, iontové a kovalentní poloměry, lanthanoidová kontrakce, ionizační energie, elektronová afinita, elektronegativita, polarizovatelnost. Kovy, polokovy, nekovy. Binární sloučeniny, polyatomické sloučeniny. Chemické názvosloví.

L8. 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, oktetové pravidlo, rezonanční struktury, formální náboj. Tvar molekul, metoda VSEPR, deformace vazebných úhlů.

L9. Vlnově-mechanický model vazby, překryv atomových orbitalů, integrál překryvu, typy překryvů (σ , π , δ). Hybridizace. Molekuly s násobnými vazbami, řád vazby. Delokalizované p-systémy, aromatické sloučeniny, rezonance, vazebné poměry v uhličitánovém iontu a v benzenu. Hypervalentní sloučeniny. Sloučeniny s nedostatkem elektronů, borany, klastry. Polární kovalentní vazba, indukční a mezomerní efekt. Fotoelektronová spektroskopie. Symetrie. Prvky a operace symetrie, symetrie molekul a iontů, chiralita, asymetrický atom, spirála, polarita. Dipólový moment.

L10. Molekulové orbitály (MO), LCAO-lineární kombinace atomových orbitalů, výstavbový princip MO, řád vazby, multiplicita, typy molekulových orbitalů, mísení s-p orbitalů. 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).

L11. Koordinační sloučeniny. Donor-akceptorová vazba. Centrální atom, ligand, geometrie komplexů, koordinační polyedry, cheláty, chelátový efekt, vícejaderné komplexy, strukturní 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 nízko-spinové komplexy, Jahn-Tellerův efekt, spektrální a magnetické vlastnosti komplexů. Magnetické vlastnosti látek, magnetický moment atomu a jádra, dia- a s, ferro- a antiferromagnetismus.

L12. Slabé vazebné interakce. Slabé interakce (van der Waalsovy síly, vazba vodíkovým můstkem). Potenciálová křivka slabých interakcí. Interakce van der Waalsovy: 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. Pevné skupenství a vlastnosti pevných látek. Krystalické, amorfní látky. Krystalizace, nukleace. Struktura kovů, kovová vazba, pásová teorie vazby v pevných látkách, delokalizované orbitály v krystalu kovu, síla vazby. Elektrická a tepelná vodivost kovů, kapalně rtuť za normální teploty. Slitiny: substituční tuhé roztoky, slitiny s omezenou mísitelností složek v tuhém stavu, intersticiální tuhé roztoky, slitiny obsahující intermetalické sloučeniny. Vodiče, polovodiče a izolanty.

L13. Krystalová mřížka, strukturní motiv, elementární buňka. Kubické buňky, krystalové mřížky kovů, nejtěsnější uspořádání. Základní strukturní typy. 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. Zjišťování krystalové struktury: difrakce rentgenového záření. Rentgenová strukturní analýza. Madelungova konstanta, mřížková energie.

L14. 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. Standardní stav. Exo- a endotermické děje. Enthalpie prvků, slučovací a reakční enthalpie. Hessovy zákony. Určování energie vazby pomocí Hessova zákona. Born-Haberův cyklus, mřížková energie.

L15. Entropie, uspořádanost soustavy. Gibbsova volná energie. Samovolný průběh reakce. Druhá a třetí věta termodynamiky. Energetické změny při průběhu chemických reakcí, základní termodynamické veličiny (U, H, G, S), termodynamické podmínky průběhu chemických reakcí. Vratné reakce, Guldberg-Waagův zákon rovnováhy, reakční kvocient, rovnovážná konstanta, vliv změny koncentrace, tlaku a teploty na rovnováhu, Le Chatelier-Brownův princip.

L16. 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.

L17. 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.

L18. Roztoky, vyjadřování koncentrace, solvatace a asociace iontů. Typy roztoků a rozpouštědel. Proces rozpouštění: změna volné energie, mezimolekulární a meziiontové interakce. Rozpustnost plynů v kapalinách, kovalentních látek, 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. Koligativní vlastnosti. 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. Snížení bodu tání, zvýšení bodu varu, ebulioskopie a kryoskopie. Osmotický tlak zředěného roztoku. Koloidní soustavy.

L19. Acidobázické reakce. Arrheniova, Brønstedova-Lowryho a Lewisova teorie kyselin a zásad, síla kyselin a zásad, disociační konstanta, vícesytné kyseliny, vytěsňování slabých kyselin a zásad, konjugovaný pár. 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.

L20. 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, elektrochemická řada napětí. Koncentrační článek. Oxidoredukční elektroda, Petersova rovnice. Změna Gibbsovy volné energie a rovnovážná konstanta elektrochemických reakcí. Disproporcionační reakce. Elektrolytický článek, elektrolýza roztavených solí a vodných roztoků, anodické a katodické reakce, Faradayův zákon. Elektrochemické zdroje proudu, primární, sekundární, palivový článek.

L21. Plynné skupenství. Boyleův zákon, Charlesův-Gay-Lussakův 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.

L22. Rovnováha ve vícefázovém systému, chemický potenciál, Gibbsovo pravidlo fází, základní pojmy fázových rovnováh, definice fáze, složky a stupně volnosti. Základní fázové diagramy jednosložkových systémů. Fázový diagram vody, síry a helia, CO₂, metastabilní stavy. Fázové diagramy dvousložkových soustav: dvě neomezeně mísitelné kapaliny s malými odchylkami od Raoultova zákona, frakční destilace, rektifikace, destilace s vodní parou, azeotropické směsi. Fázový diagram soustavy voda rozpustná látka, chladicí směsi, tvorba hydrátů. Fázový diagram směsi dvou kovů, dokonale mísitelné a nemísitelné v pevné fázi, pákové pravidlo, eutektikum.