

Obecná chemie C1020

Jiří Pinkas

Ústav chemie – Univerzitní kampus Bohunice

Budova C12, 2. patro, místnost 224

Tel. 54949 6493

jpinkas@chemi.muni.cz

Dotazy - email, MS Teams

Obecná chemie C1020

Přednáška - B11/132

- Út 12:00 – 14:00 a Čt 10:00 – 12:00
- Prezentace s výkladem z přednášky v IS
- Řešené úlohy v IS
- **Zkouška písemná - leden - únor 2023**
- **Každý týden jeden zkouškový termín**
- **Nebudou předtermíny**
- **Poslední opravný termín – květen 2023**
- **Seminář C1040 - Test 0**
- **Konzultace – domluva, osobně, MS Teams**

Obecná chemie C1020

Příhoda – Toužín. *Pomůcka pro seminář z obecné chemie*

Brno : Masarykova univerzita, 2012

KUK – 225 ks a v IS jako pdf

Klikorka - Hájek - Votinský. *Obecná a anorganická chemie*
1989 a. 2. nezměn. vyd. Praha : SNTL

Hála. *Pomůcka ke studiu obecné chemie*

Brno : Masarykova univerzita, 1993

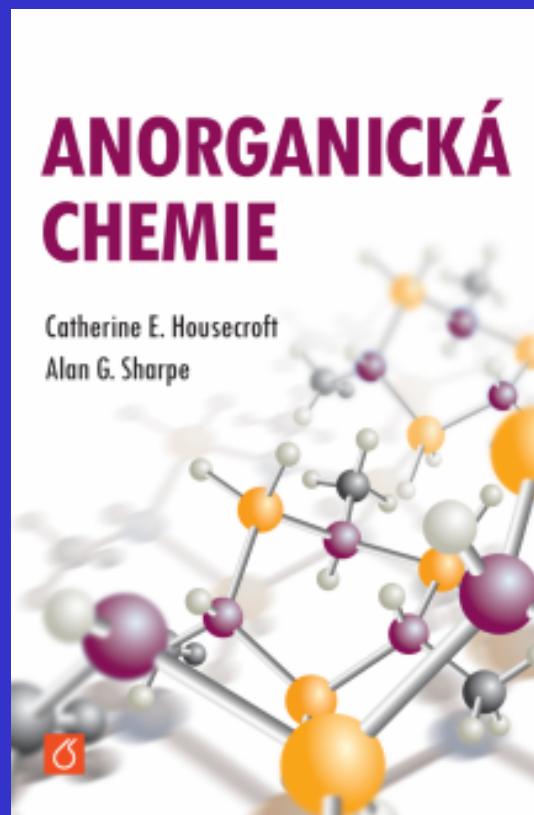
Růžička - Toužín. *Problémy a příklady z obecné chemie*

Názvosloví anorganických sloučenin

Brno : Masarykova univerzita, 2000 - 2010

Obecná chemie C1020

Anorganická chemie

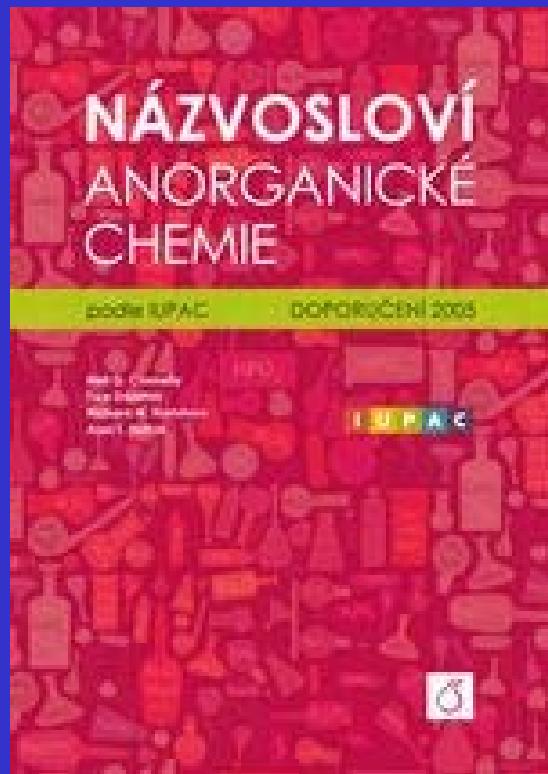


Catherine E. Housecroft
Alan G. Sharpe

Vydavatel VŠCHT Praha
(1. vydání, 2014)
ISBN 978-80-7080-872-6
Počet stran 1152
Cena 1350 Kč
950 Kč (pro studenty VŠCHT)

Výpůjčka z KUK

Obecná chemie C1020



**Názvosloví anorganické chemie
podle IUPAC: Doporučení 2005**

Connelly Neil G., Damhus Ture,
Hartshorn Richard M., Hutton Alan T.

Vydavatel VŠCHT Praha

(1. vydání, 2018)

ISBN 978-80-7080-998-3

Počet stran 380

Cena 450 Kč

240 Kč (pro studenty VŠCHT)

Obecná chemie C1020

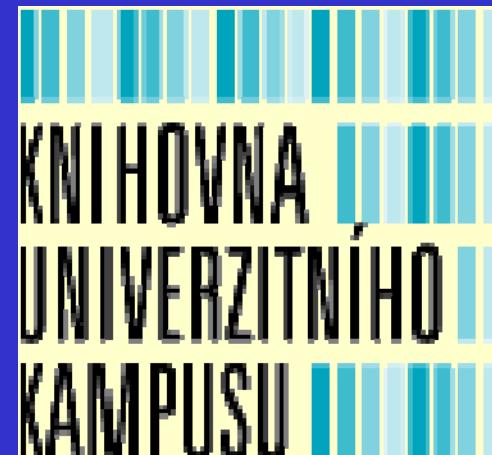
Učebnice v angličtině

C. E. Housecroft, A. G. Sharpe
Inorganic Chemistry

S. S. Zumdahl, S. A. Zumdahl
Chemistry

J. W. Hill
General Chemistry

B. E. Bursten, C. Murphy, H. E. LeMay, H. E. LeMay Jr., P.
Woodward, T. E. Brown, T. L. Brown
Chemistry The Central Science



Angličtina = liqua franca chemie

Počátky chemie

První písemná zmínka o chemii - popis destilace
Mezopotámie 1200 př. n. l.

Tapputi-Belatekallim a (---)ninu
- výrobkyně parfémů



Věda - výzkum - aplikace - technologie

Technologie – aplikace znalostí k přeměně okolí,
výrobky k prodeji a použití

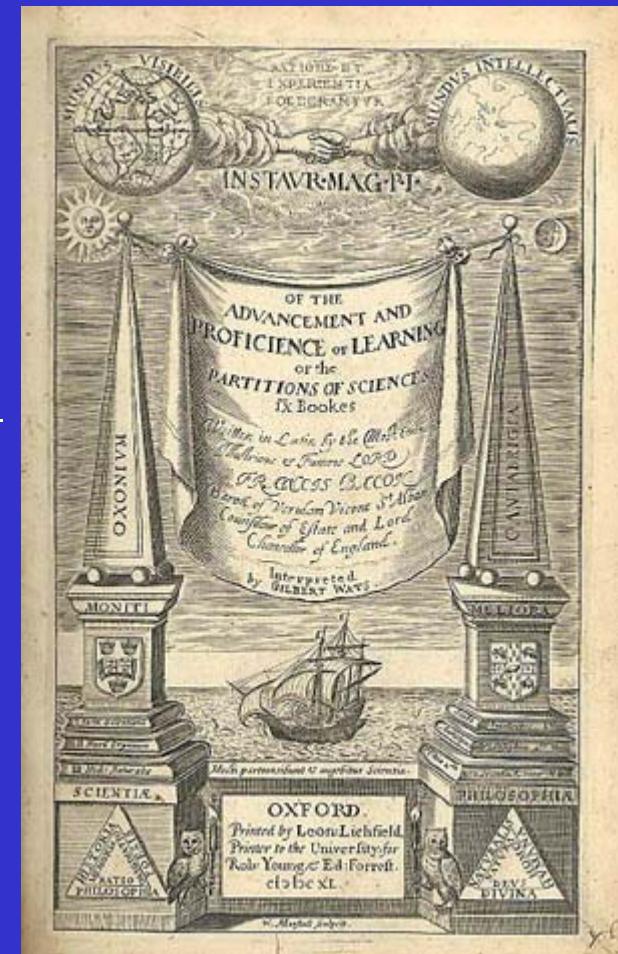
Aplikovaný výzkum – krátkodobý, používá poznatky
základního výzkumu, praktické **aplikace**

Základní výzkum – dlouhodobý, cílem nejsou aplikace ale
objevování nových **přírodních zákonů** a získávání nových
poznatků a principů – výzkumné skupiny Ústavu chemie,
biochemie, RECETOX, NCBR a CEITEC

Věda

- Systematizovaný soubor **znaností, vědomostí a zobecnění**, které jsou považovány za **pravdivé**
- Vědecká metoda, jíž jsou tyto znalosti získávány - **pozorování, pokus, dedukce – vedoucí k objektivním zákonům**
- Vědecký jazyk
 - přesně definované **pojmy**

1605 – Sir Francis Bacon
The Proficiency and Advancement of Learning
Formulace vědecké metody



Věda a vědecká metoda

Věda – Kvantitativní studium přírody a přírodních zákonů
Proces, při kterém se získávají nové **poznatky** a formulují **zákony** popisující přírodní jevy

Empirické postupy řešení problému - **pokusy a pozorování**

Zabývá se pouze **racionálními** výroky, které lze potvrdit nebo vyvrátit pozorováním nebo experimenty

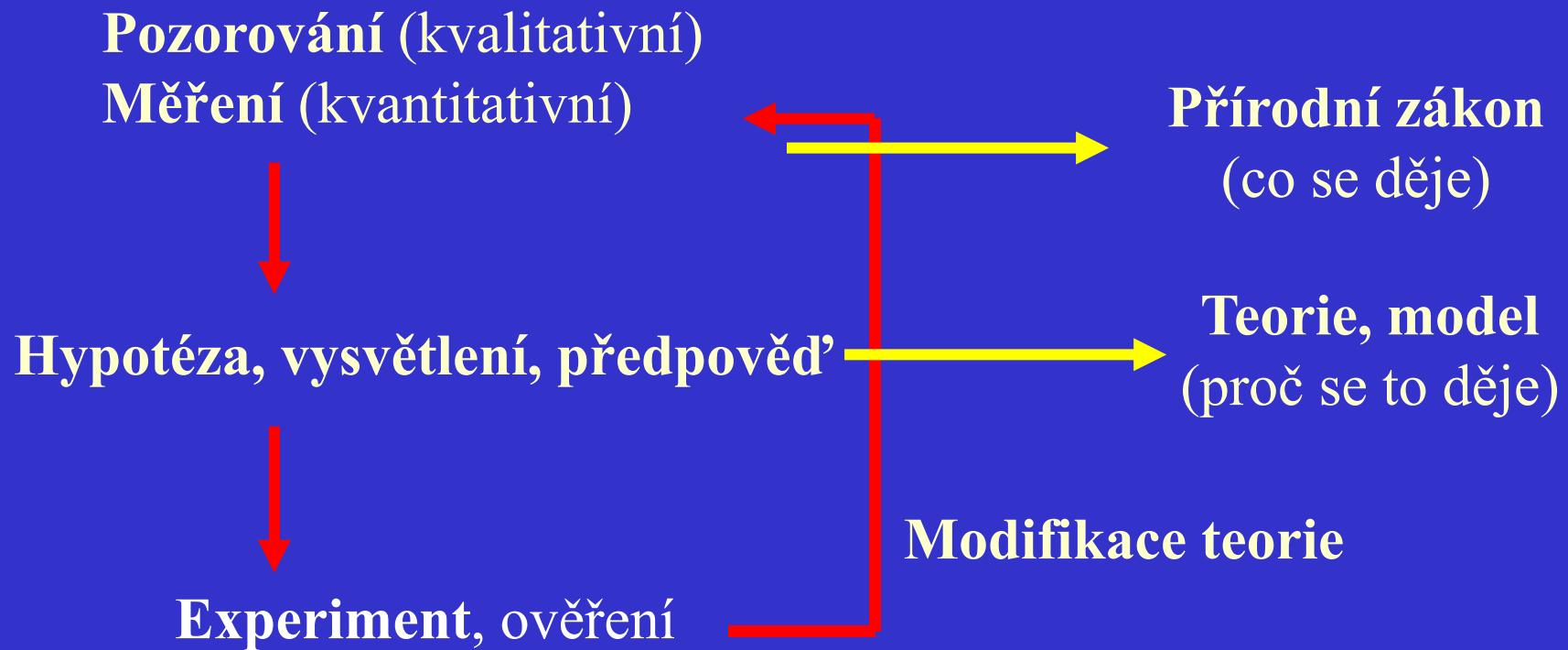


Sir Francis Bacon
(1561 - 1626)

Zakladatel empirismu



Vědecká metoda



Správně navržený pokus (např. měřit jednu proměnnou, ostatní konstantní) potvrdí nebo vyvrátí pravdivost hypotézy.
Hypotéza, která neobstojí musí být odmítnuta. Pokusy potvrzující hypotézu musí být reprodukovatelné.

Pozorování a vysvětlení

První vysvětlení přírodního jevu – hypotéza úspěšně testovaná vyplněnou předpovědí:

Tháles Milétský (624 - 543 př. n. l.)



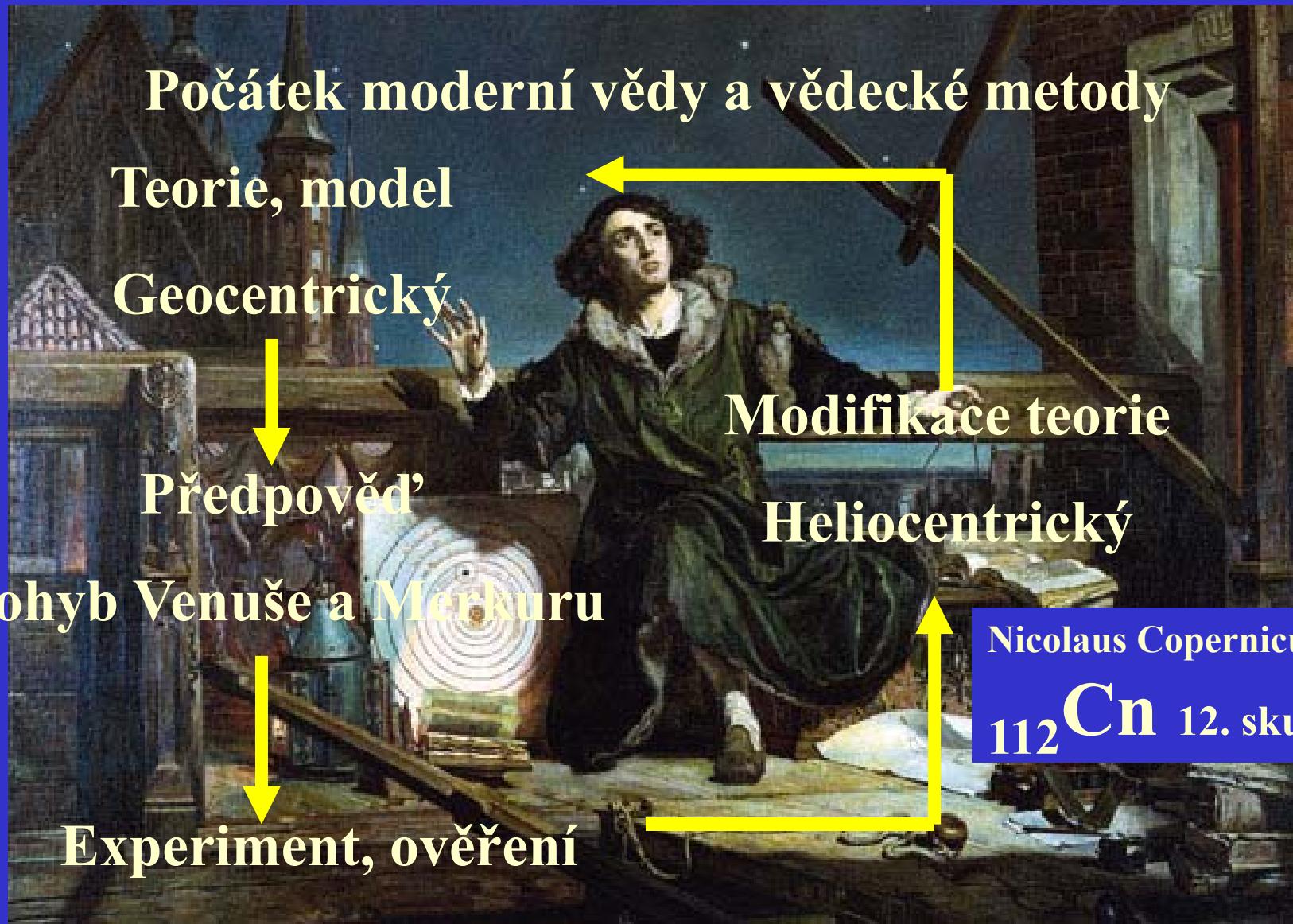
Vysvětlil zatmění Slunce – měsíc v novu přejde přes sluneční kotouč

Předpověď dalšího zatmění Slunce 585 př. n. l.

(nebližší zatmění v Česku - 25. 10. 2022)

Počátek vědeckého myšlení, racionální přístup bez mystiky a náboženských představ

Chemie - Základní prvek je **Voda**



1543 Mikoláš Koperník



Pozorování a vysvětlení

Johann Joachim Becher
(1635 - 1682)



První konzistentní vysvětlení několika souvisejících přírodních jevů:

Georg Ernst Stahl
(1660 - 1734)
Flogiston

- 1) Hoření uhlí = uvolnění **flogistonu**
- 2) Hoření kovů = uvolnění **flogistonu** + vznik oxidu
- 3) Reakce uhlí s oxidy kovů (rudy) = redukce na kov
přenos **flogistonu** z uhlí na oxid (kov = oxid + flogiston)

Počátky **kvantitativních** experimentů

PROBLÉM: Kov hoří = oxid + **flogiston**

Při oxidaci kovů je hmotnost produktů **vyšší** = flogiston má₁₄
negativní hmotnost ☺

Pozorování a vysvětlení

Vyvracením flogistonové teorie se vytvářela moderní chemie
Nesprávná teorie je postupně vyvrácena na základě experimentů,
které odpovídají nové teorii

Hoření = slučování s O₂
Vyšší hmotnost produktů - **vážení**

Zákon zachování hmoty

Flogiston = -O₂

Zahřívání $2 \text{ HgO} \rightarrow 2 \text{ Hg} + \text{O}_2$
(redukce na kov bez flogistonu z uhlíku)
Který další oxid lze použít?



Antoine Laurent Lavoisier
(1743 – 1794)

Banicka akademia 1763
Banská Štiavnica
Mikuláš Jozef von Jacquin

Tři objevitelé kyslíku



Carl Wilhelm Schelle
(1742 – 1786)
1771 připravil O₂
publikoval až 1777
(ochutnával chemikálie)



Joseph Priestley
(1733 – 1804)
přípravu publikoval
1774, plyn nazval
deflogistonovaný
vzduch



Antoine Lavoisier
(1743 – 1794)
1783
Oxygen = **prvek**

Zdroj kyslíku - zahřívání HgO, Ag₂CO₃, Mg(NO₃)₂, NaNO₃

Přírodní zákony a teorie

Přírodní zákon

– tvrzení, které sumarizuje opakovaná pozorování přírodních jevů, mění se jen zřídka (Coulombův zákon, Periodický zákon, ~~Trestní~~)
Pravdivý, univerzální, absolutní, stabilní, reverzibilní, jednoduchý

Teorie

– tvrzení, které vysvětluje známá fakta a zákony z nich vyplývající, jsou produktem **lidského myšlení** a mohou se měnit nebo být úplně odmítnuty pod vlivem vývoje nových experimentálních metod, přesnějších měření

Objektivita – platí vždy při splnění potřebných podmínek

Schopnost předpovědi

– předpoví existenci dosud nepozorovaných jevů

Periodický zákon

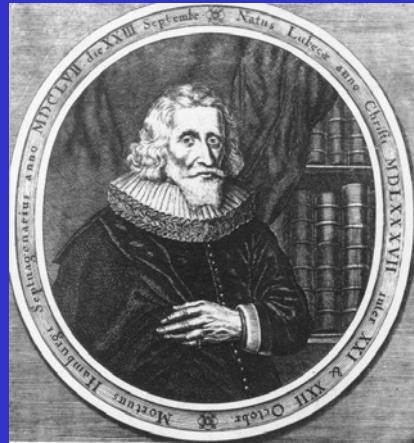
IUPAC Periodic Table of the Elements

1	1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]	2																			18 He helium 4.0026														
3	Li lithium 6.94 [6.938, 6.997]	4 Be beryllium 9.0122																			10 Ne neon 20.180														
11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.305 [24.304, 24.307]	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.079(4)	21 Sc scandium 44.966	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium 101.07(2)	44 Ru ruthenium 102.91	45 Rh rhodium 106.42	46 Pd palladium 107.87	47 Ag silver 112.41	48 Cd cadmium 114.82	49 In indium 118.71	50 Sn tin 121.76	51 Sb antimony 127.60(3)	52 Te tellurium 126.90	53 I iodine 131.29																			
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 Lanthanoids lanthanoids 178.49(2)	72 Hf hafnium 180.95	73 Ta tantalum 183.84	74 W tungsten 186.21	75 Re rhenium 190.23(3)	76 Os osmium 195.08	77 Ir iridium 196.97	78 Pt platinum 196.97	79 Au gold 199.68	80 Hg mercury 200.68	81 Tl thallium 204.38 [204.38, 204.39]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium 208.98	85 At astatine 210.22	86 Rn radon 222.01																		
87 Fr francium 223.01	88 Ra radium 226.02	89-103 Actinoids actinoids 232.04	104 Rf rutherfordium 231.04	105 Db dubnium 238.03	106 Sg seaborgium 238.03	107 Bh bohrium 239.03	108 Hs hassium 239.03	109 Mt meitnerium 251.03	110 Ds darmstadtium 257.03	111 Rg roentgenium 257.03	112 Cn copernicium 257.03	113 Nh nihonium 258.03	114 Fl florium 258.03	115 Mc moscovium 258.03	116 Lv livemorium 258.03	117 Ts tennessine 258.03	118 Og oganesson 258.03																		
																		57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium 150.36(2)	62 Sm samarium 151.98	63 Eu europium 157.25(3)	64 Gd gadolinium 158.90	65 Tb terbium 162.50	66 Dy dysprosium 164.93	67 Ho holmium 167.26	68 Er erbium 166.93	69 Tm thulium 173.05	70 Yb ytterbium 174.97	71 Lu lutetium 175.05			
																		89 Ac actinium 223.04	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium 238.03	94 Pu plutonium 239.03	95 Am americium 243.03	96 Cm curium 247.03	97 Bk berkelium 247.03	98 Cf californium 251.03	99 Es einsteinium 252.03	100 Fm fermium 257.03	101 Md mendelevium 258.03	102 No nobelium 259.03	103 Lr lawrencium 259.03			

INTERNATIONAL UNION OF
PURE AND APPLIED CHEMISTRY

For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 28 November 2016.
Copyright © 2016 IUPAC, the International Union of Pure and Applied Chemistry.

Vědecký jazyk - přesná definice pojmu



Joachim Jungius
(1587 - 1657)

Zakladatel vědeckého jazyka
Potřeba přesné definice pojmu

Základem vědy je experiment
a závěry z něho vyvozené

- Chemické názvosloví (jména prvků, obecné a systematické názvy sloučenin)
- Názvy laboratorního nádobí a přístrojů (Bunsenův kahan, Erlenmeyerova baňka, Soxletův extraktor)
- Jmenné reakce (Grignard, Wittig, Heck, Suzuki)
- Názvy zákonů, rovnic a principů (Boyle, Schroedinger, Boltzman, Avogadro, Arrhenius)

Vědecký jazyk - přesná definice pojmu

Guyton de Morveau 1782

Počátky systematického chemického názvosloví

Lavoisier, Berthollet, de Fourcroy, Berzelius, Werner

Jan Svatopluk Presl (1791–1849)

Lučba čili chemie zkusná (1835)

P = Kostík, Cr = Barvík

IUPAC (English)

Red Book – názvosloví anorganické chemie

Blue Book – názvosloví organické chemie

Green Book – názvosloví fyzikální chemie

White Book – názvosloví biochemie

Gold Book – kompendium chemické terminologie

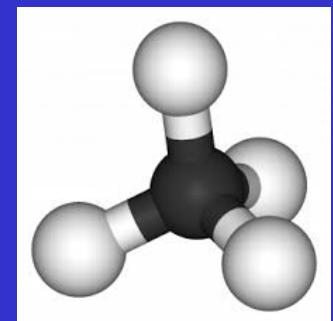
Model

Reálný svět existuje (Matrix)



Model je pokus popsat reálné objekty pomocí myšlených ideálních objektů. Vysvětlit přírodní jevy na mikroskopické úrovni (např. atomy) pomocí pozorování a zkušeností na makroskopické úrovni

Model je zjednodušený obraz skutečnosti, který usnadní vysvětlení problému, používá **idealizace** a **aproximace**

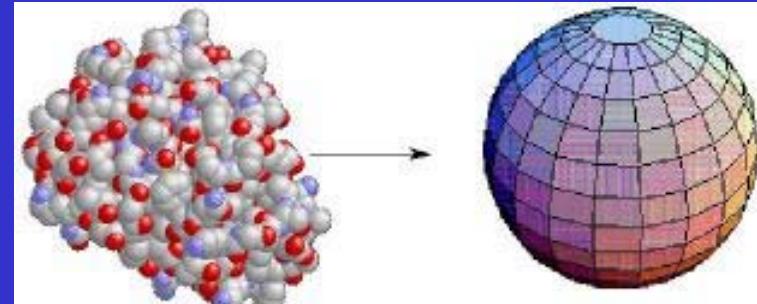


Model není totožný s realitou, je to lidský výtvor založený na nedokonalém poznání a pochopení přírody

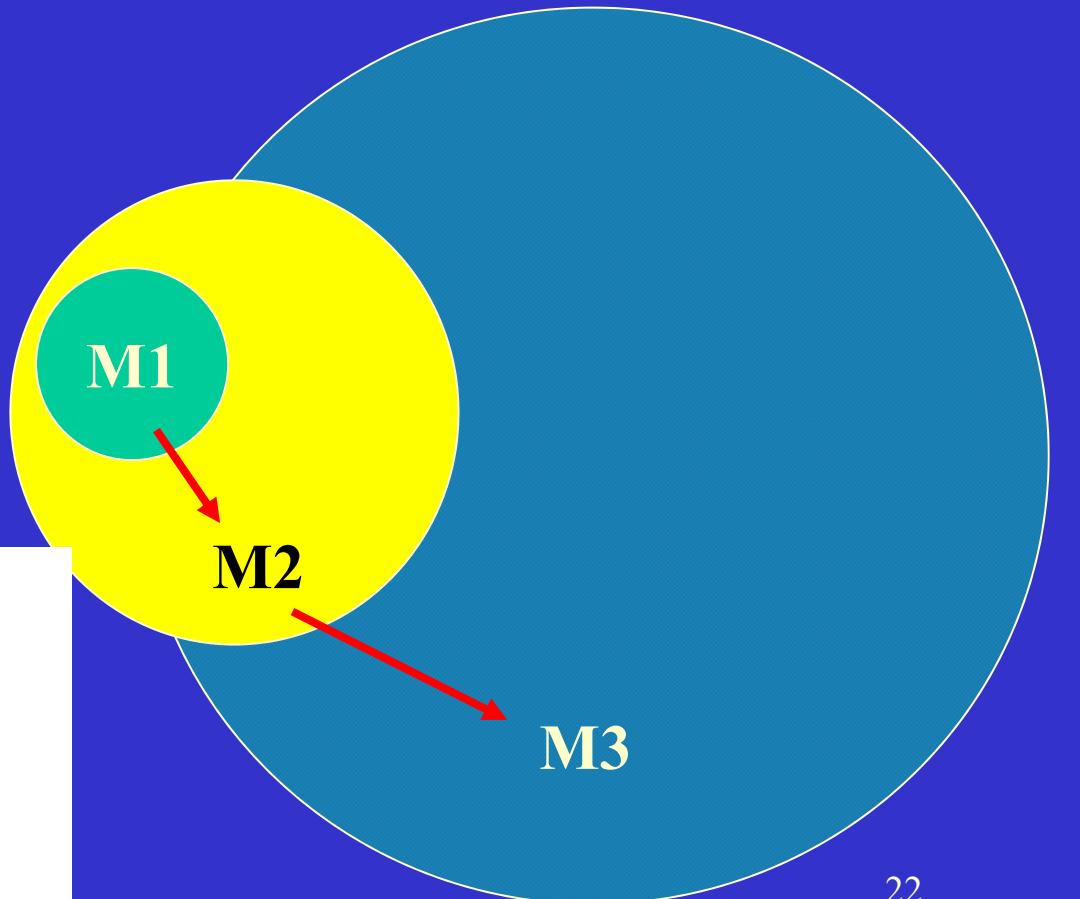
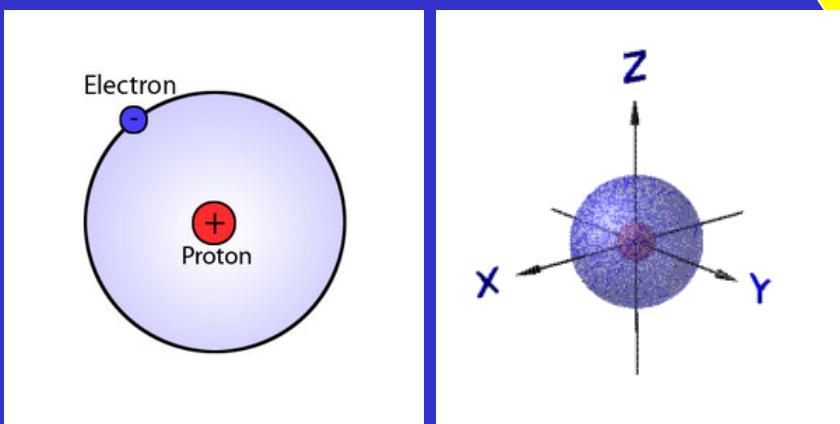
Modely se stávají komplikovanějšími a podrobnějšími s vývojem našeho poznání

Nový přesnější model s
příchodem přesnějších
metod měření

Model



Pokročilejší model
obsahuje předešlé (správné)
modely jako zvláštní
případy
(Bohrův poloměr H atomu)



Model

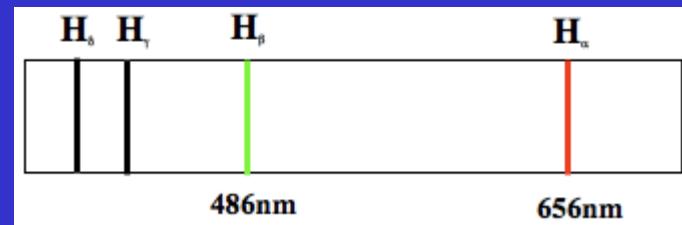
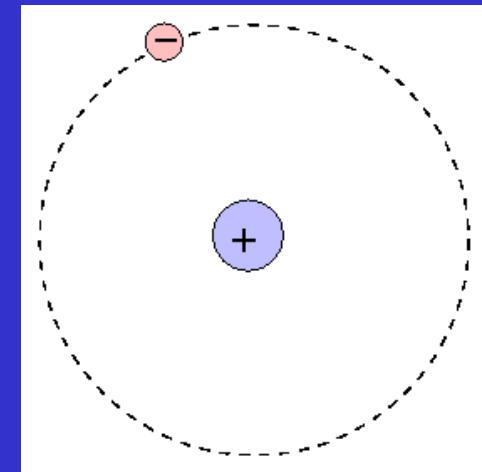
Jednoduché modely obsahují mnoho **zjednodušujících a omezujících** podmínek a předpokladů, mohou tedy poskytnout jen kvalitativní informace

Atom H – Bohrův model

Pro efektivní použití modelu je nutno znát jeho předpoklady a omezení, jeho přednosti a slabiny

Lze klást jen takové otázky, na které může daný model odpovědět

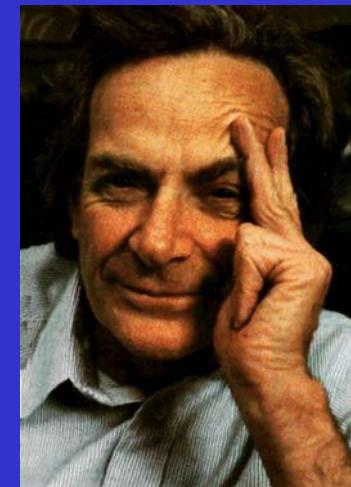
I když je model užitečný pro vysvětlení velkého počtu jevů, nelze předpokládat, že bude fungovat v každém případě



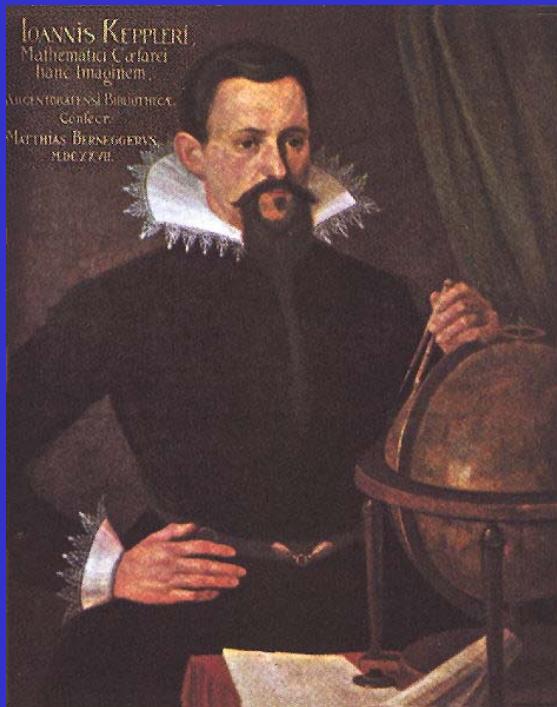
Model

"Jediné, co mě zajímá, je najít soubor pravidel, která by souhlasila s chováním přírody, a nezkoušet jít příliš daleko za to. Zjistil jsem, že většina filozofických diskuzí je psychologicky užitečná, ale nakonec, když se podíváte zpátky do historie, zjistíte, že to, co bylo kdysi řečeno s takovou pádností, je téměř vždy - do jisté míry - nesmyslné!"

Richard P. Feynman
(1918 – 1988)
NP za fyziku 1965
Manhattan Project
Nanotechnologie



Teorie a experiment



Johannes Kepler
(1571 – 1630)

Aby byl experiment přijat za pravdivý,
musí být **nezávisle** verifikovaný,
zopakovaný

Samočisticí vlastnost vědecké metody

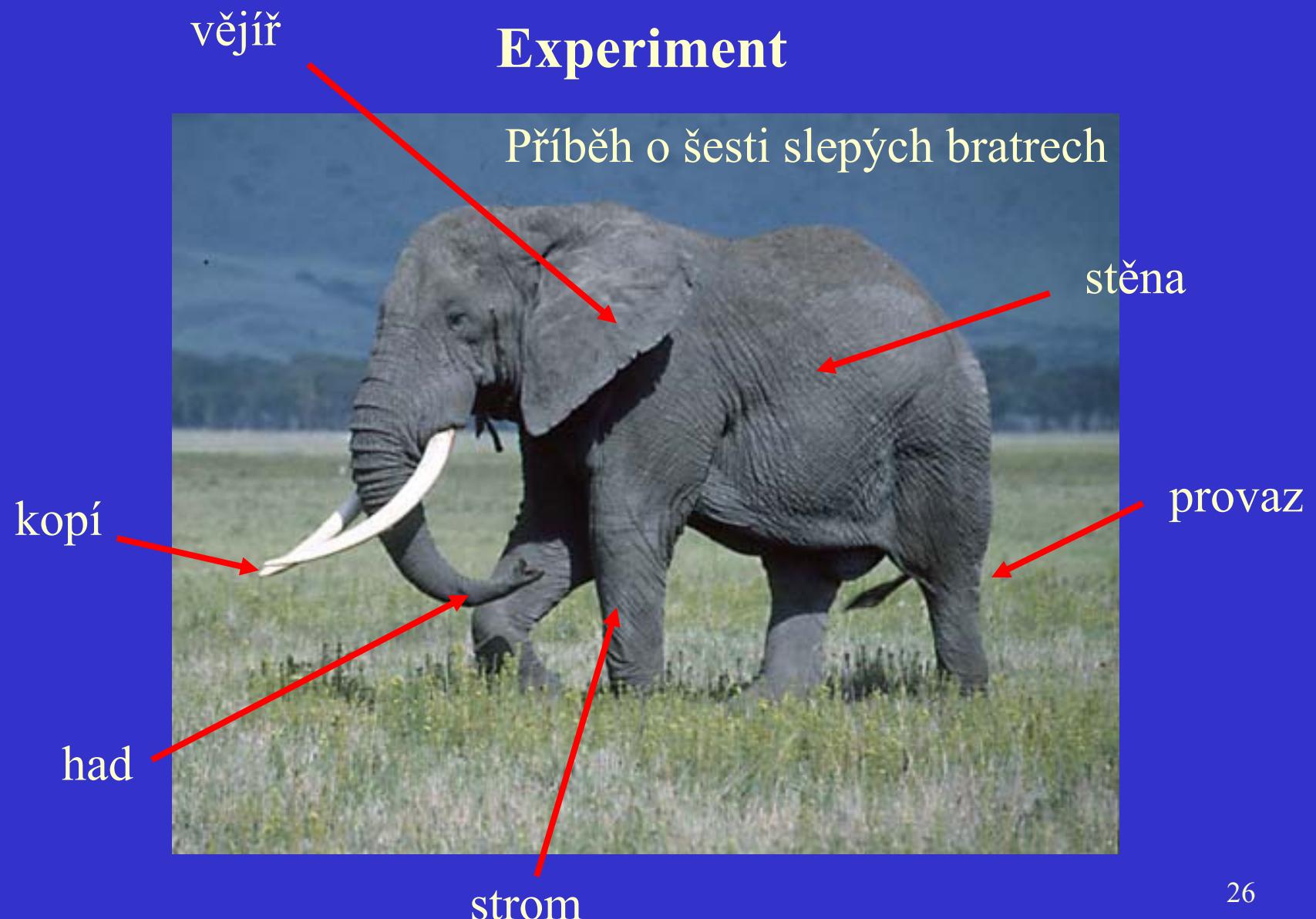
Ubi materia, ibi geometria

Kde je hmota, tam je geometrie

Měření

Experiment

Příběh o šesti slepých bratrech



Elementární analýza

Experiment

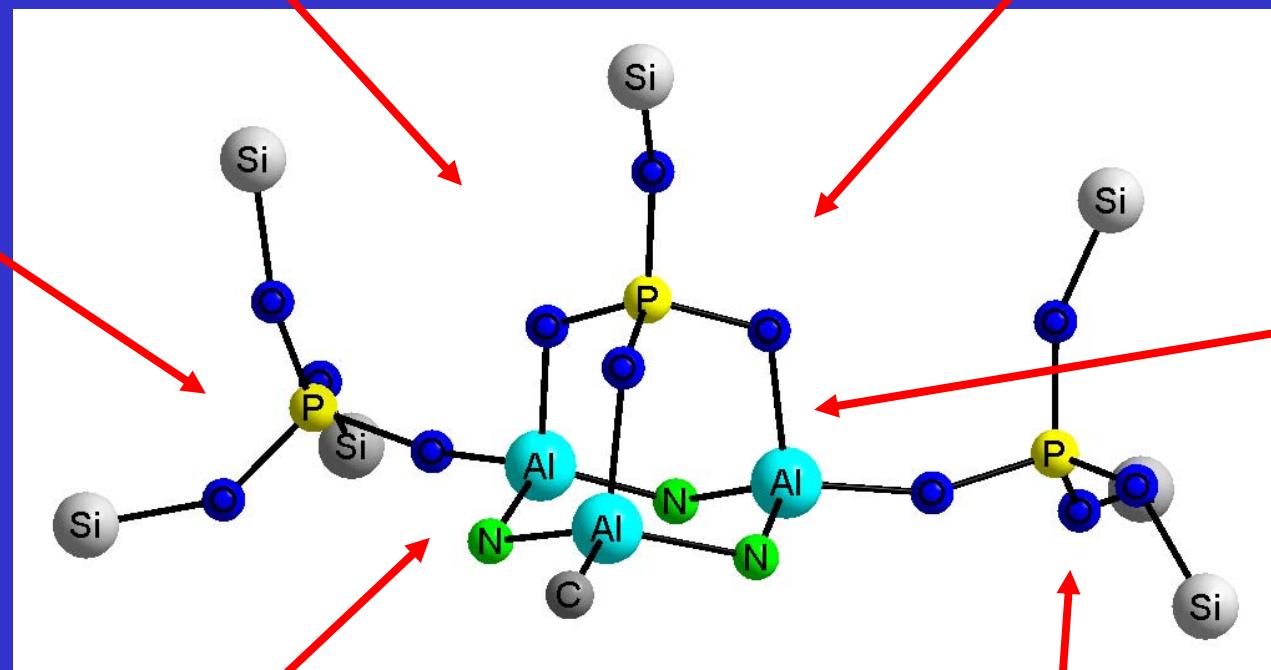
RTG strukturní analýza

NMR

UV-vis

Hmotnostní spektrometrie, MS

Vibrační spektroskopie, IR, RA₂₇



Kvantitativní experiment

Johann Baptista van Helmont
(1579 - 1644)

Měření

Robert Boyle
(1627 - 1691)



Objemy plynů

Joseph Black
(1728 - 1799)

Hmotnost reaktantů a produktů

Henry Cavendish
(1731 - 1810)

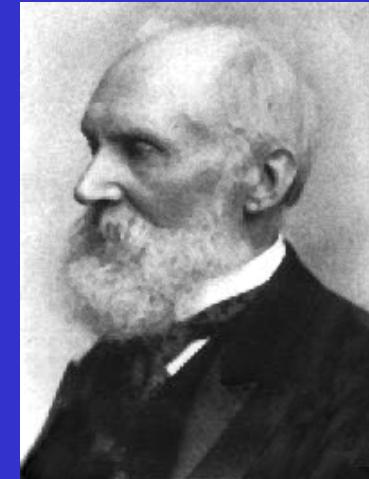
Kvantitativní experiment = měření

Hmotnost, délka, čas - od nepaměti

Teplota - 1592 Galileo, 1724 Daniel Fahrenheit

Messen heist Wissen

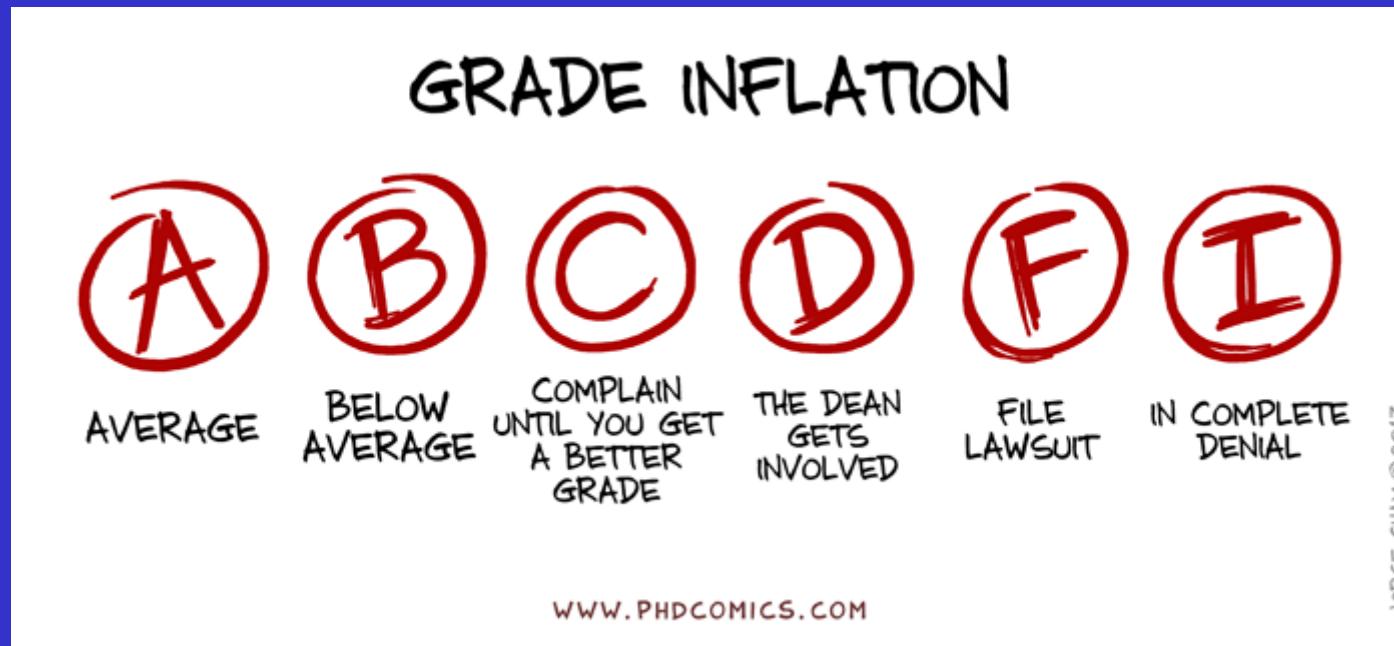
"When you can measure what you are speaking about, and express it in numbers, you know something about it; but when you cannot measure it, when you cannot express it in numbers, your knowledge is of a meagre and unsatisfactory kind. It may be the beginning of knowledge, but you have scarcely, in your thoughts, advanced to the stage of science."



Lord Kelvin
(William Thomson)
(1824–1907)

Kvantitativní experiment = měření

Hodnocení zkoušky



Fyzikální vlastnosti

Aditivní - závisí na **počtu a druhu** atomů v molekule
molekulová hmotnost,

Konstitutivní - závisí na **uspořádání** atomů v molekule
optická rotace, dipolový moment,.....

Koligativní - závisí **jen na počtu** atomů nebo molekul v soustavě
tlak plynu, osmotický tlak,.....

Veličiny, Rozměry, Jednotky

Příklad:

Veličina: E , energie

<http://www.labo.cz/mftabulky.htm>

Rozměr: $\text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$

Jednotka: J, eV, kalorie,.....

Základní rozměry: délka, čas, hmotnost, elektrický náboj, mol,...

Složené rozměry: rychlosť = délka \times (čas) $^{-1}$

Bezrozměrové veličiny:

Poměry dvou stejných veličin (např. molární a hmotnostní zlomek)

Argumenty log (např. pH), ln, exp, sin, cos, tan

Rozměrová kontrola výpočtu: např. molární koncentrace

$$c = n / V \quad [\text{mol} / \text{l}]$$

Základní jednotky SI

Veličina	Jednotka	Zkratka
Hmotnost	Kilogram	kg
Délka	Metr	m
Čas	Sekunda	s
Teplota	Kelvin	K
Elektrický proud	Amper	A
Látkové množství	Mol	mol
Svítivost	Kandela	cd

Výsledek výpočtu = číselná hodnota + jednotka

Základní jednotky SI

Mezinárodní výbor pro míry a váhy

Nové definice (2019) - konstanty: $\nu(^{133}\text{Cs})$, c , h , k_B , e , N_A , K_{cd}

Sekunda [s] = doba rovnající se 9 192 631 770 periodám záření, které odpovídá přechodu mezi dvěma hladinami velmi jemné struktury základního stavu atomu ^{133}Cs

Metr [m] = rychlosť světla ve vakuu, c

$299\ 792\ 458\ \text{m s}^{-1}$ ($c = \lambda \times v$)

Kilogram [kg] = Planckova konstanta, h

$6,626\ 070\ 15 \times 10^{-34}\ \text{kg m}^2\ \text{s}^{-1}$

měření pomocí tzv. wattové váhy, které porovnávají tíži tělesa s magnetickou silou

Základní jednotky SI

Ampér [A] = elementární elektrický náboj, e ,
 $1,602\ 176\ 634 \times 10^{-19}$ C (= A × s), náboj = proud × čas

Kelvin [K] = Boltzmannova konstanta, k_B
 $1,380\ 649 \times 10^{-23}$ J K⁻¹ (= kg m² s⁻² K⁻¹)
kinetická energie plynu = $3/2 k_B \times$ teplota

Kandela [cd] = světelná účinnost monochromatického
záření o frekvenci 540×10^{12} Hz, K_{cd}
 683 lm W⁻¹ (= cd sr kg⁻¹ m⁻² s³)

Základní jednotky SI

Látkové množství [1 mol] = soustava, která obsahuje právě tolik částic (atomů, molekul, elektronů, nebo jiných entit),

NOVÁ DEFINICE:

- jako Avogadrova konstanta, $N_A = 6,022\ 140\ 76 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

STARÁ DEFINICE:

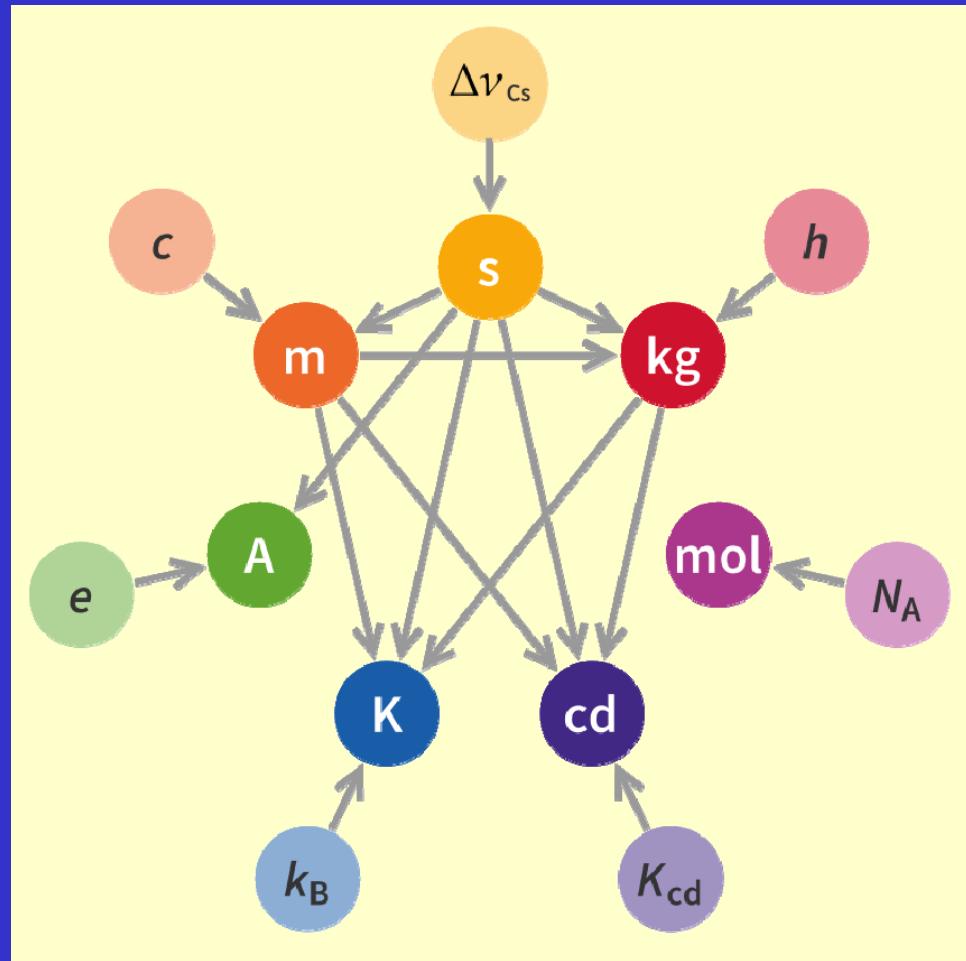
- kolik je atomů v 12 g (přesně) nuklidu ^{12}C

Počítání atomů vážením

Kolik atomů je v 1 kg Si?



Základní konstanty a základní jednotky SI



Násobky – předpony

Y	Yotta	10^{24}	1		10^0
Z	Zetta	10^{21}	m	mili	10^{-3}
E	Exa	10^{18}	μ	mikro	10^{-6}
P	Peta	10^{15}	n	nano	10^{-9}
T	Tera	10^{12}	p	piko	10^{-12}
G	Giga	10^9	f	femto	10^{-15}
M	Mega	10^6	a	atto	10^{-18}
k	kilo	10^3	z	zepto	10^{-21}
1		10^0	y	yokto	10^{-24}

Bezrozměrové jednotky

Procento % = 0,01 = 1 atom v 10^2 atomech

Promile ‰ = 0,001 = 1 atom v 10^3 atomech

**ppm = 1 g v 1 t nebo 1 atom v 10^6 atomech
(part per million)**

Obsah Li v rudách na Cínovci

ppb = 1 mg v 1 t nebo 1 atom v 10^9 atomech

Obsah Au v mořské vodě

ppt = 1 µg v 1 t nebo 1 atom v 10^{12} atomech

Hmotnost ***m*** / kg

1 kg – jediná jednotka, která byla do roku 2018 definovaná fyzickým objektem



Nová definice (2019):

**Planckova konstanta je přesně
 $6.626\ 070\ 15 \times 10^{-34}$ kg m² s⁻¹**

Wattovy váhy - hmotnost

A. Einstein: hmotnost tělesa v pohybu je **větší** než hmotnost v klidu

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Rychlosť tělesa v

Klidová hmotnost tělesa m_0

Rychlosť světla $c = 2,9979 \cdot 10^8$ m s⁻¹

Chemická definice 1 kg ?



Koule z velmi čistého ^{28}Si
Objem koule změřen laserovou interferometrií
Objem na jeden atom Si z rtg. difrakce
Počet atomů v kouli
Avogadrova konstanta
Kolik atomů je v 1 kg Si?

Hmotnost m / kg

Atomová hmotnostní jednotka - počítání atomů vážením

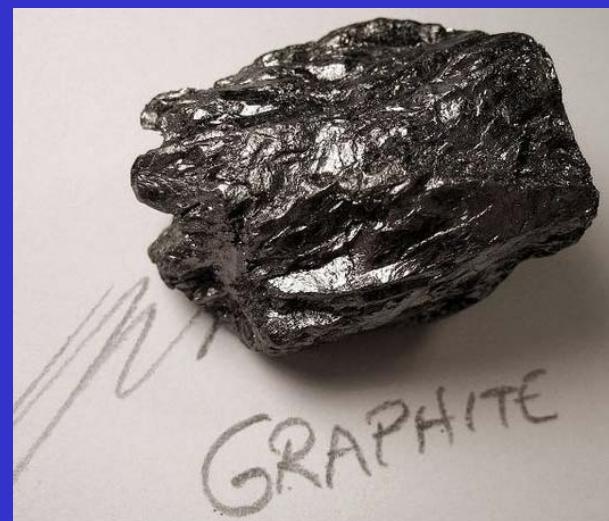
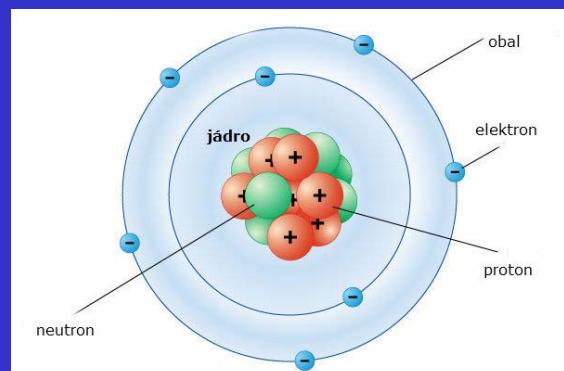
$\frac{1}{12}$

1/12 hmotnosti atomu **nuklidu ^{12}C**

$$1 \text{ } u = (1 \text{ amu}) = 1,6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$1 \text{ mol uhlíku} = 12 \text{ g}$$

1 atom



Látkové množství n / mol

Počet částic (atomů, molekul, elektronů, nebo jiných entit)
Avogadrova konstanta

$$N_A = 6,022\ 140\ 76 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Počet atomů uhlíku v 0,012 kg (12 g) nuklidu ^{12}C

Látkové množství n , jednotka mol

n = podíl počtu částic N (atomů, molekul, elektronů,...) a N_A

$$n = \frac{N}{N_A}$$

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

Látkové množství n / mol

Počítání atomů vážením

- A) Jaké látkové množství vlašských ořechů je v 10 kg pytli, když 1 ořech váží 10 g?
- B) Jaké látkové množství máku je v 10 kg pytli, když 1 zrnko váží 1 mg?
- C) Jaké látkové množství Si je v 10 kg Si?

Atomová a molární hmotnost

Atomová A_m a molární hmotnost M_m

Hmotnost 1 molu látky, kg mol^{-1}

$$A_m(^{12}\text{C}) = 12 \times u \times N_A =$$

$$= 12 \times 1,6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \times 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} =$$

$$= 0,01200 \text{ kg mol}^{-1} = 12,00 \text{ g mol}^{-1}$$

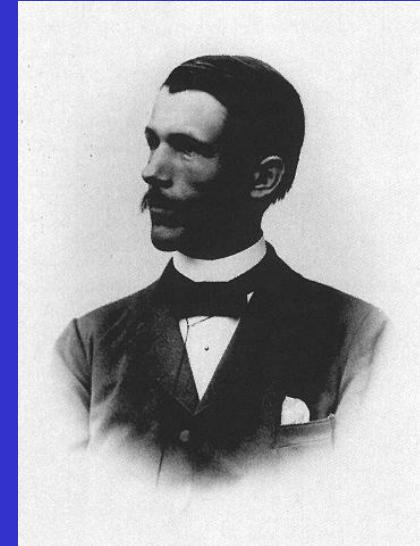
Délka l / m

1 Ångström = 10^{-10} m
(není SI jednotka)

$$1 \text{ \AA} = 100 \text{ pm} = 0,1 \text{ nm}$$

Bohrův poloměr atomu H
 $a_0 = 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0,53 \text{ \AA}$

Délky vazeb v molekulách 1 až 4 \AA
Průměr atomu Cu je 2,55 \AA



Anders Jonas Ångström
(1814 - 1874)

Průměr vesmíru: 17 miliard světelných let = $1,6 \cdot 10^{26}$ m

Průměr atomového jádra = 10^{-15} m

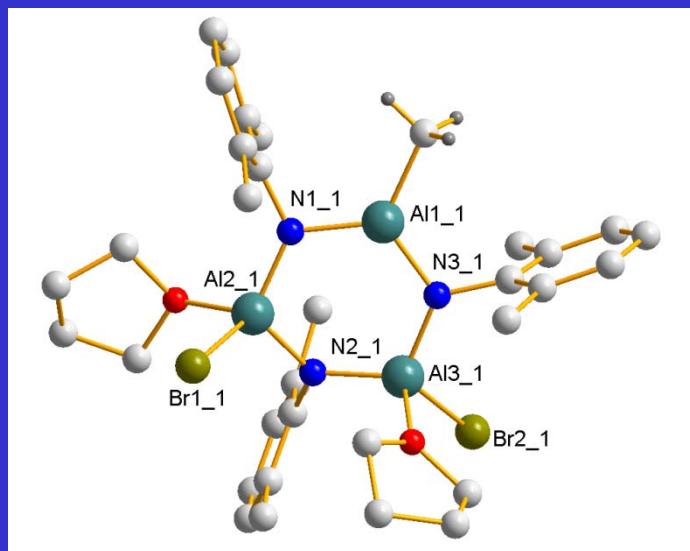
Vazebné vzdálenosti

Vazebné vzdálenosti (v Å)

Vazba	CC	CN	CO	CH	NH	OH
Jednoduchá	1,53	1,47	1,42	1,09	1,00	0,96
Dvojná	1,34	1,27	1,21			
Trojná	1,20	1,15				

Kolik pm?

Rentgenová
strukturní analýza



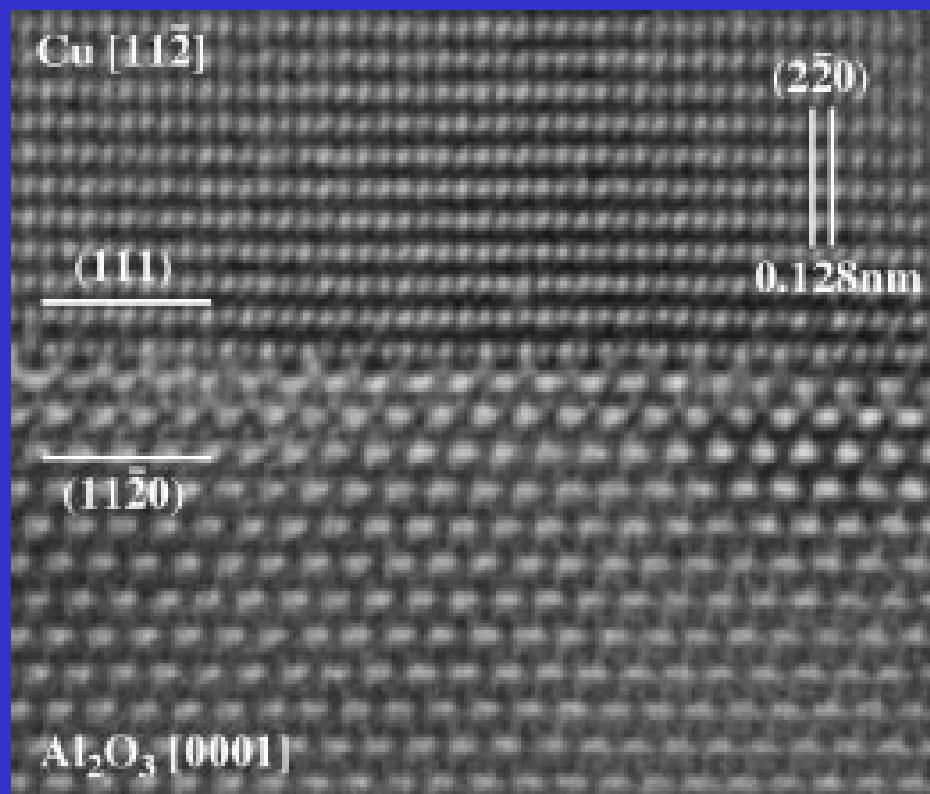


Atomové poloměry (pm)

H 37		B 88	C 77	N 70	O 66	F 64	He 32
Li 152	Be 113						
Na 186	Mg 160	Al 143	Si 117	P 110	S 104	Cl 99	Ar 97
K 227	Ca 197	Ga 122	Ge 122	As 121	Se 117	Br 114	Kr 110
Rb 247	Sr 215	In 163	Sn 140	Sb 141	Te 143	I 133	Xe 130
Cs 265	Ba 217	Tl 170	Pb 175	Bi 155	Po 167	At 140	Rn 145

$$1 \text{ \AA} = 100 \text{ pm} = 0,1 \text{ nm}$$

TEM = transmisní elektronová mikroskopie

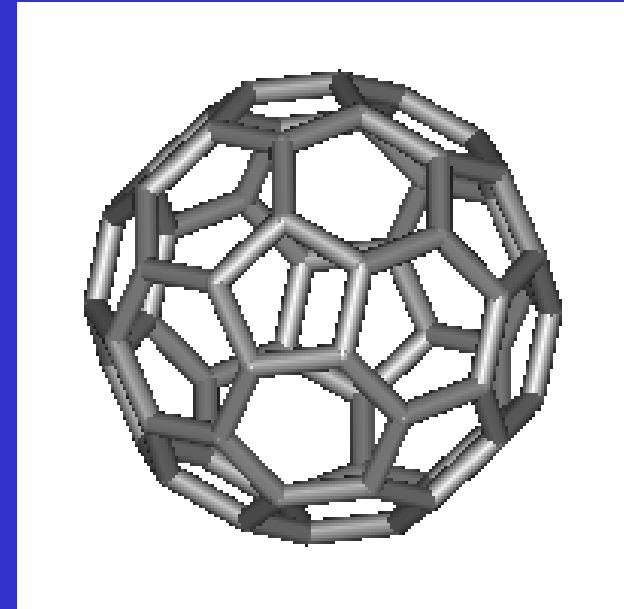


Objem V

$$1 \text{ pm}^3 = 10^{-6} \text{ \AA}^3$$

Objem molekuly fullerenu C_{60}
asi 500 \AA^3

Molární objem ideálního plynu
= objem 1 molu plynu



při teplotě 0°C a tlaku 101 325 Pa (STP)

$$V_M = 22,414 \text{ l mol}^{-1}$$

při teplotě 0°C a tlaku 100 000 Pa (1 bar)

$$V_M = 22,711 \text{ l mol}^{-1}$$

$$\rho = \frac{m}{V}$$

g cm^{-3}

Hustota závisí
na teplotě a tlaku

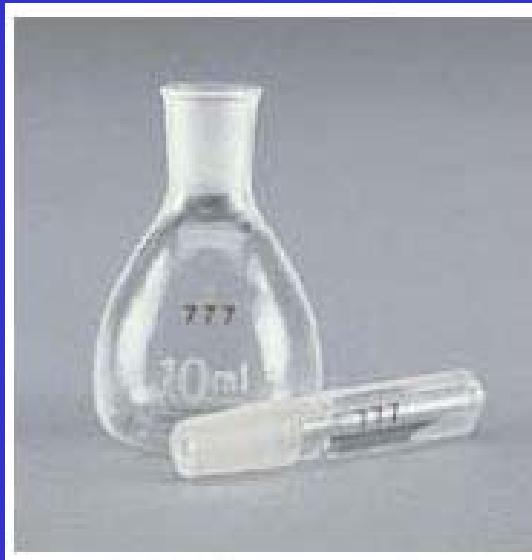
Hustota ρ

Látka	Hustota při 20 °C / g cm ⁻³	Stav
Kyslík	0,00133	g
Benzen	0,880	l
Lithium	0,535	s
Voda	0,9982 (1,00 pro lab. výpočty)	l
Hliník	2,70	s
Železo	7,87	s
Olovo	11,34	s
Rtuť	13,6	l
Zlato	19,32	s
Iridium	22,65	s

$$\rho = \frac{m}{V}$$

g cm⁻³

Měření hustoty



Hustota závisí na teplotě

Pyknometr

Při 20 °C

**Nádoba na dolití IN
Nádoba na vylití EX**



Čas

Kinetika dějů, chemických reakcí

t / s	Událost
10^{-21}	Jaderné srážky
10^{-15}	Excitace elektronu fotonem, femtosekundová spektroskopie
10^{-12}	Radikálové reakce, přenos energie, valenční vibrace
10^{-9}	Fluorescence, rotace, přenos protonu
10^{-6}	Fosforecence, difuze, konformační
10^{-3}	Rychlé bimolekulární reakce
10^0	Úder srdce, pomalé bimolekulární reakce

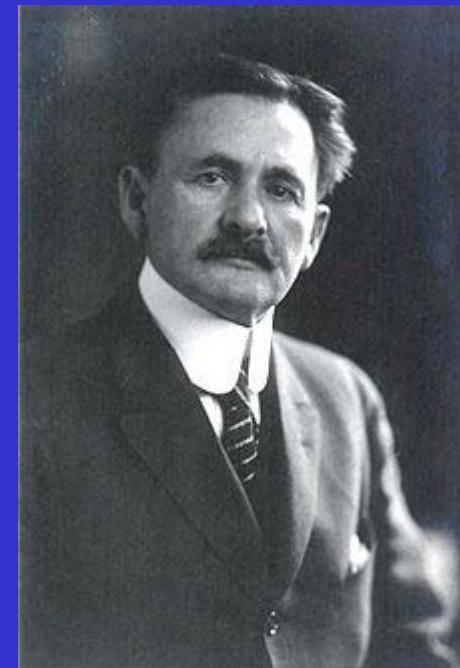
Rychlosť v

Rychlosť svetla ve vakuu

$$c = 2,99\ 792\ 458\ 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

(presně)

$$3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$$
$$300\ 000 \text{ km s}^{-1}$$



Albert Abraham Michelson
(1852 - 1931)
NP za fyziku 1907

$$E = m c^2 \quad v \times \lambda = c$$

Frekvence, vlnová délka, vlnočet

Počet periodických dějů za časový interval

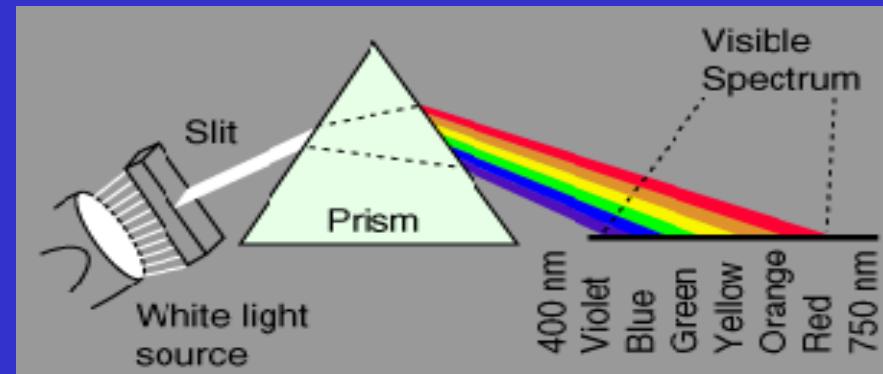
Frekvence $\nu = 1 / t$, Hz = s⁻¹

Kmity

Vibrace

Rotace

Srážky molekul



Vzdálenost mezi dvěma maximy

Vlnová délka λ , m

Počet vln na jednotku délky

Vlnočet $\tilde{\nu} = 1 / \lambda$, cm⁻¹

$$\nu \times \lambda = c$$

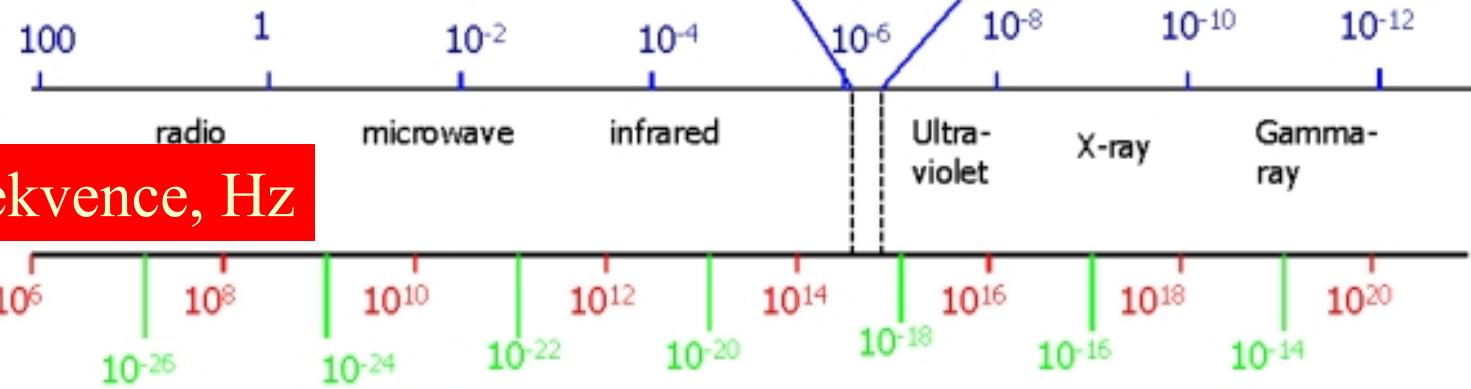
$$c = 2,99\ 792\ 458 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

Frekvence, vlnová délka, vlnočet

$$\nu \times \lambda = c$$

$$c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

Vlnová délka, m



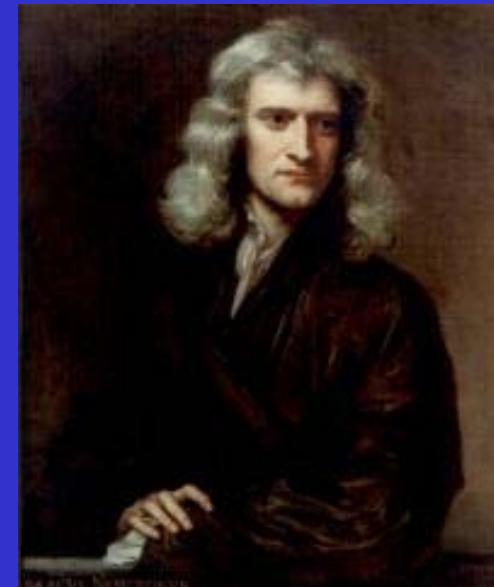
Energie fotonu, J

$$E = h \times \nu$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

Síla F

1 Newton = gravitační síla působící na jablko



$$F = m \ g$$

$$g = 9,80665 \text{ m s}^{-2}$$

Isaac Newton
(1642 - 1727)

Čtyři základní síly - interakce

Gravitační

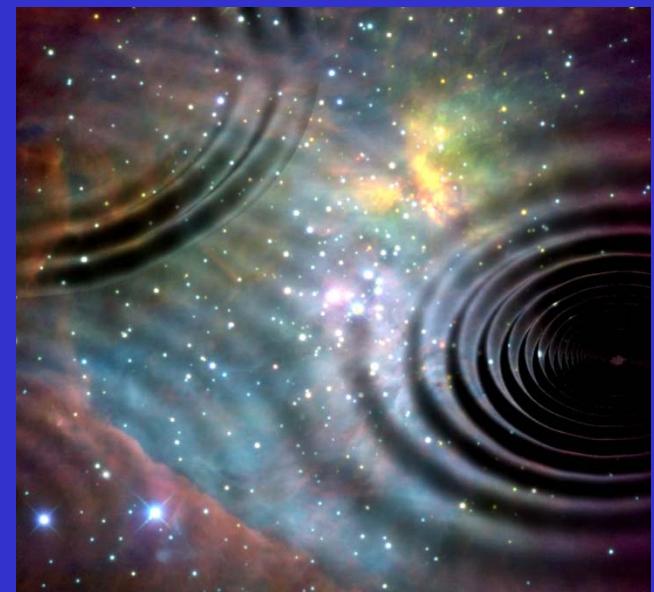
Elektromagnetická - CHEMIE
(e-e repulze, p-e přitažlivost)

Silné interakce

(jaderné, drží pohromadě protony
a neutrony v jádře)

Slabé interakce

(drží pohromadě proton a elektron
v neutronu)



LIGO - Laser Interferometer
Gravitational-Wave
Observatory 2015

Elektrický náboj q

Elementární náboj, e

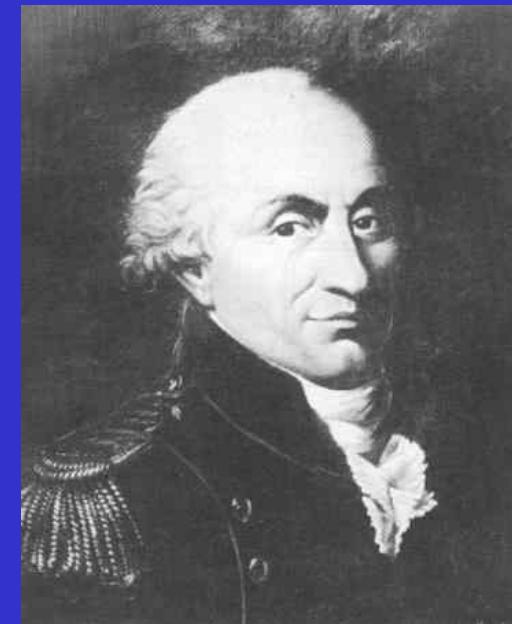
$$e = 1,602\ 176\ 634 \times 10^{-19} \text{ C} \quad (1 \text{ C} = 1 \text{ A s})$$

Všechny náboje jsou celistvým násobkem e

$$q = Z e$$

Coulombův zákon

Přitažlivá síla F mezi dvěma náboji opačného znaménka je nepřímo úměrná druhé mocnině vzdálenosti r mezi nimi a přímo úměrná velikosti nábojů q



Charles A. Coulomb
(1736 - 1806)

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

Tlak p

$$1 \text{ Pa} = 1 \text{ N m}^{-2}$$

1 Pascal = tlak kterým působí jablko na 1 m²

Převody jednotek

$$1 \text{ atm} = 101\,325 \text{ Pa} = 760 \text{ mm Hg (Torr)} = 1,01325 \text{ bar}$$

$$1 \text{ kg cm}^{-2} = 98\,066 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa} = 100 \text{ kPa}$$

Standardní tlak

$$1 \text{ bar} = 100\,000 \text{ Pa}$$



Teplota T

Kelvin, K

Boltzmannova konstanta, k_B

$1,380\ 649 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ ($= \text{kg m}^2 \text{ s}^{-2} \text{ K}^{-1}$)

Kinetická energie plynu

$$E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} k_B \times T$$

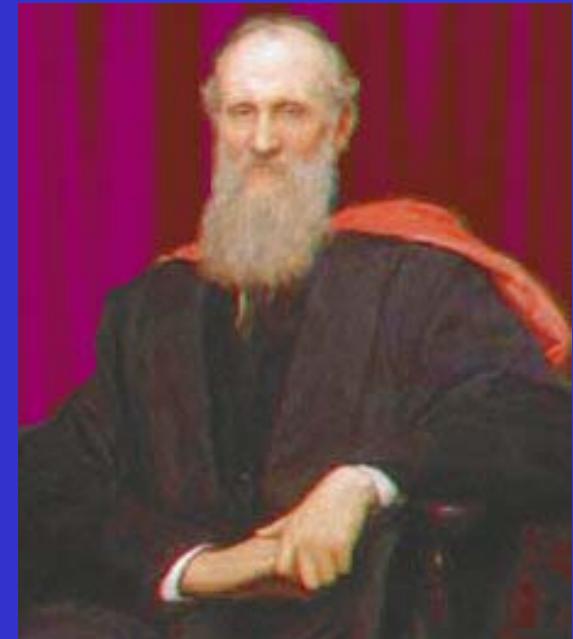
Absolutní nula (0 K, $-273,15^\circ\text{C}$)

- Nedosažitelná
- Entropie dosahuje minima

Současný rekord: $\sim 100 \text{ pK}$

Celsius, $^\circ\text{C}$

$$0^\circ\text{C} = 273,15 \text{ K} \quad T[\text{ }^\circ\text{C}] = T[\text{K}] - 273,15$$



Lord Kelvin
(William Thomson)
(1824 - 1907)

Standardní teplota (termodynamika) = 25 $^\circ\text{C}$ = 298 K

Teploměr

1592 Galileo

1629 teploměr plněný brandy
Joseph Solomon Delmedigo, lékař a rabín

1724 Daniel Fahrenheit (1686 - 1736) Hg



Změna fyzikální vlastnosti závislé na teplotě:

- Objemová roztažnost rtuti
- Délková roztažnost kovů
- Elektrický odpor kovů
- Stav kapalných krystalů
- Radiace IČ záření

Definice Celsiovy stupnice
Teplota tání ledu při 1 atm = 0 °C
Teplota varu vody při 1 atm = 100 °C
Rozděl na 100 dílků

ITS-90

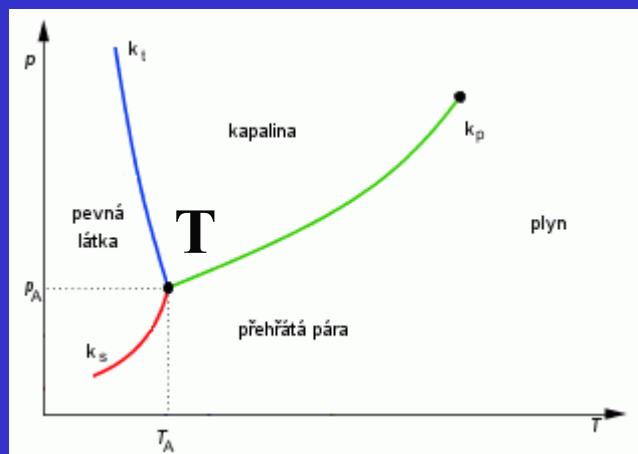
ITS-90 Mezinárodní teplotní stupnice

- Body tání čistých látek
- $T = \text{Trojný bod}$

Interpolace

Kalibrace

Trojný bod vody = 0,01 °C = 273,16 K



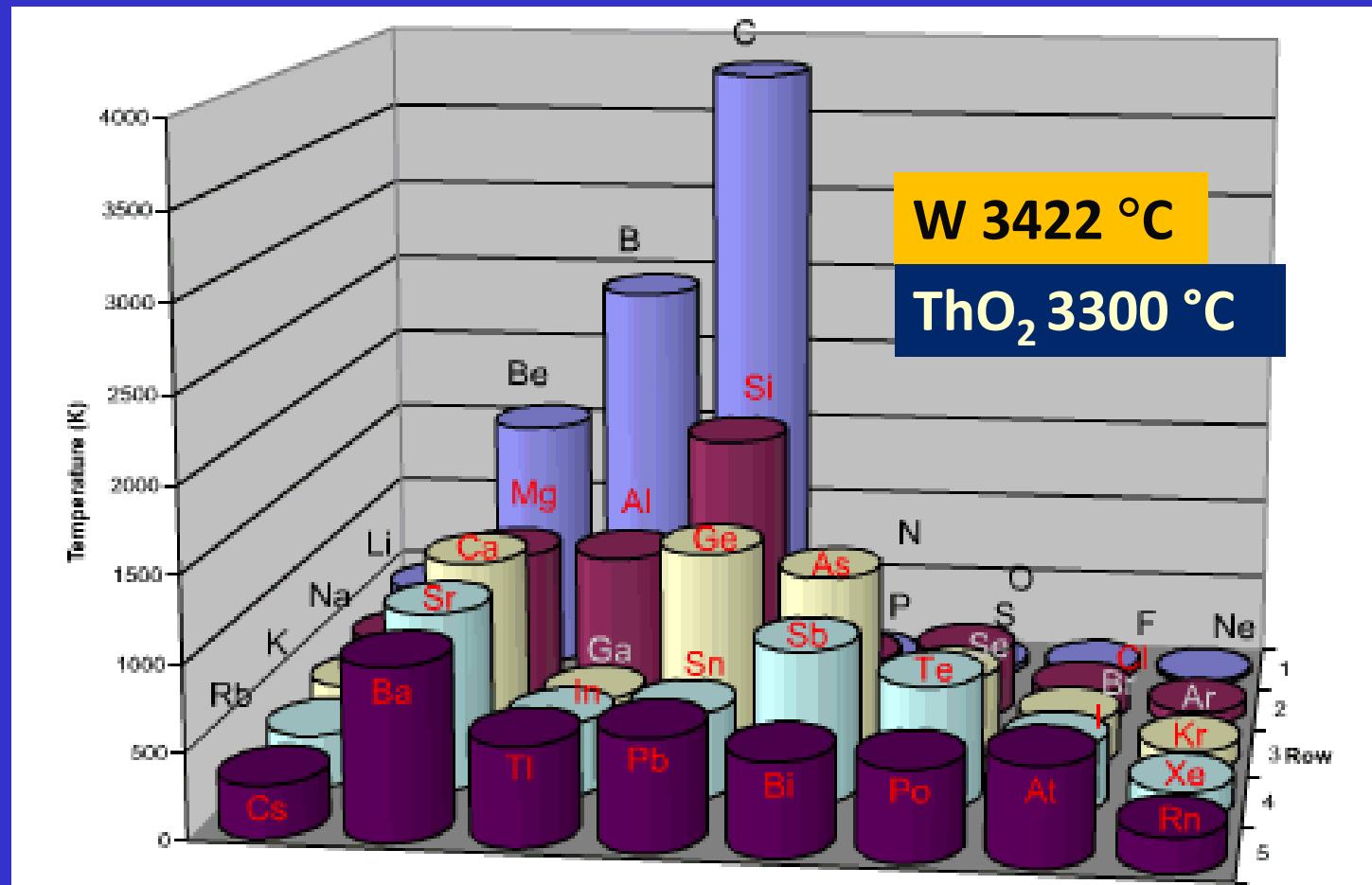
T, K

e-Hydrogen (T)	13,8033
Neon (T)	24,5561
Oxygen (T)	54,3584
Argon (T)	83,8058
Mercury (T)	234,3156
Water (T)	273,16
Gallium	302,9146
Indium	429,7485
Tin	505,078
Zinc	692,677
Aluminium	933,473
Silver	1234,93
Gold	1337,33
Copper	1357,77

Teplota tání

Teploty tání prvků

Kapalné prvky



Energie *E*

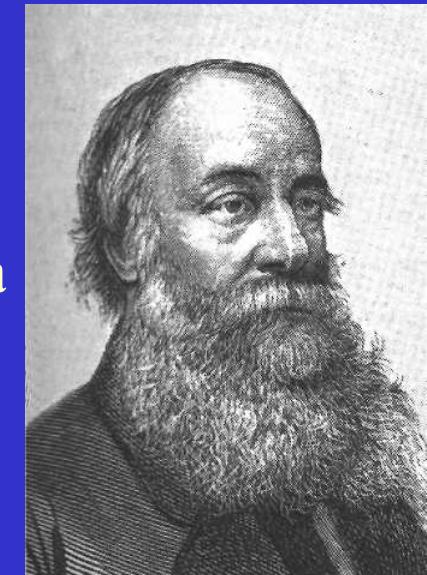
1 Joule = energie úderu lidského srdce

Zákon ekvivalence mechanické práce a tepla

1 cal = 4,184 J

1 eV = kinetická energie elektronu,
který je urychlen potenciálem 1 V

$$E = e U = 1,602\ 176\ 634 \times 10^{-19} \text{ C} \times 1 \text{ V} = \\ = 1 \text{ eV} = 1,602\ 10^{-19} \text{ J}$$



James Prescott Joule
(1818 - 1889)
žák J. Daltona

$$1 \text{ eV (molekula)}^{-1} = 1 \text{ eV} \times N_A = 96\ 485 \text{ J mol}^{-1}$$

Energie E

$$E = m c^2 = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \times (3,00 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2 \\ = 1,49 \cdot 10^{-10} \text{ J}$$

$$1 \text{ amu} = 931,4 \text{ MeV}$$

Rychlosť svetla ve vakuu, c

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2} m v^2$$

$$E_{\text{kin}} = 3/2 k_B T$$

$$k = 1,380662 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad \text{Boltzmannova konstanta, } k_B$$

$$kT = 1 \text{ zJ pro laboratorní teplotu}$$

$$E = h \nu$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\nu = \text{frekvence záření}$$

Planckova konstanta, h

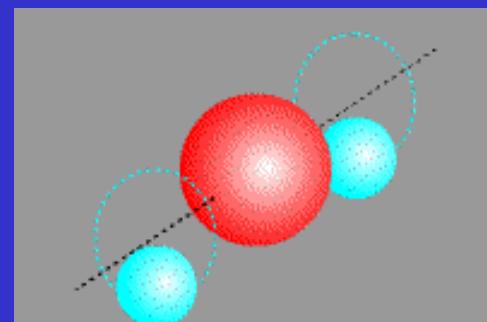
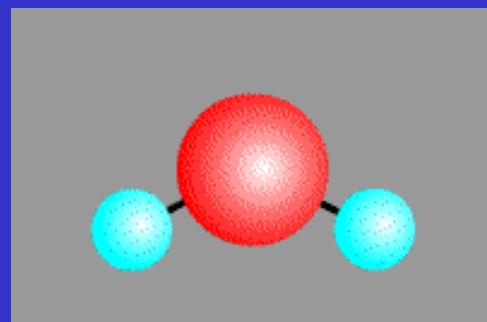
Energie *E*

$$E_{\text{celk}} = E(\text{elektronová}) + E(\text{vibrační}) + E(\text{rotační}) + E_{\text{ost}}$$

E(elektronová) 100 kJ mol^{-1}

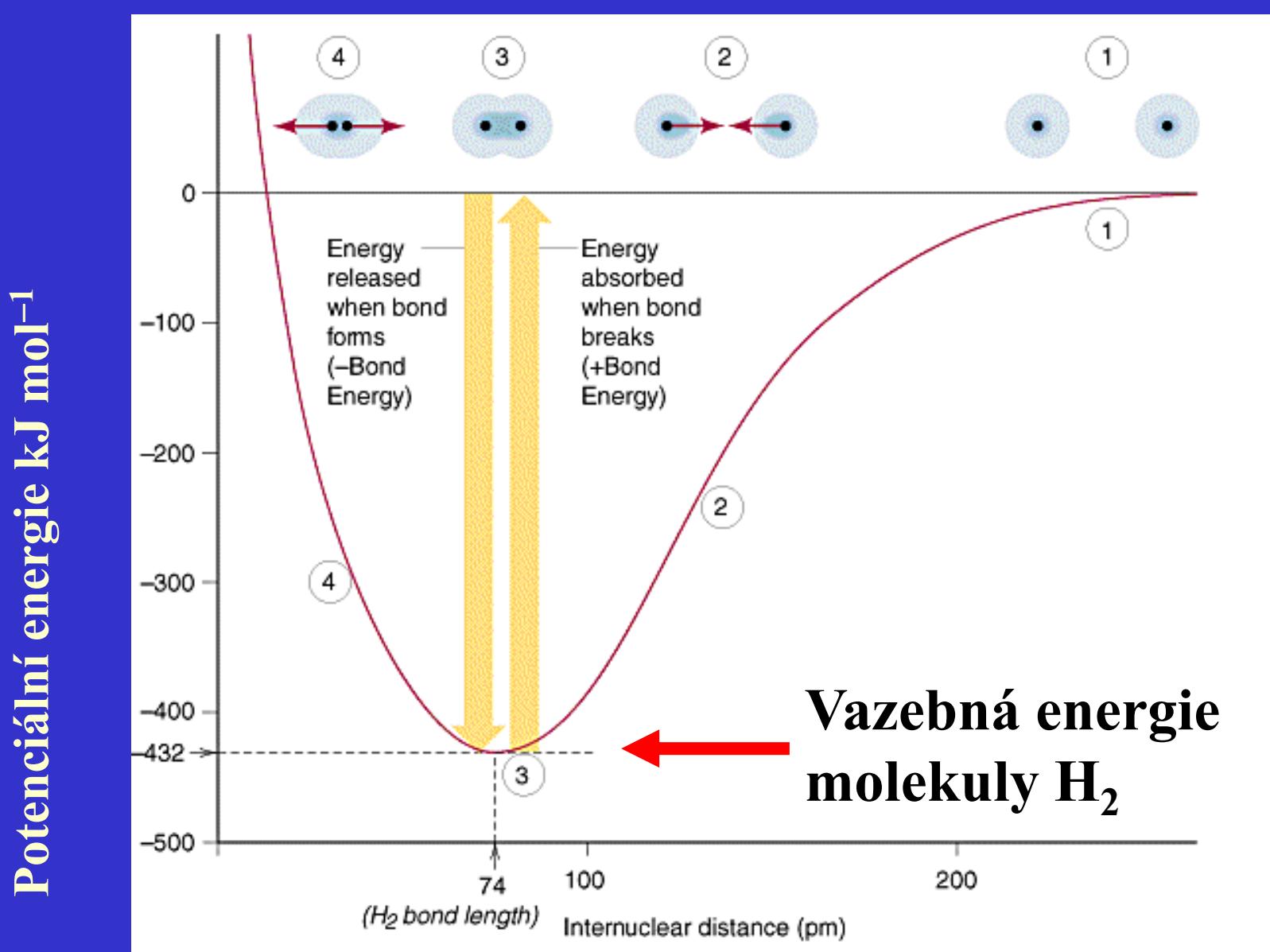
E(vibrační) $1,5 - 50 \text{ kJ mol}^{-1}$

E(rotační) $0,1 - 1,5 \text{ kJ mol}^{-1}$



Vazebné energie, kJ mol^{-1} (jednoduché vazby)

	H	C	N	O	S	F	Cl	Br	I
H	432								
C	411	346							
N	386	305	167						
O	459	358	201	142					
S	363	272	---	---	226				
F	565	485	283	190	284	155			
Cl	428	327	313	218	255	249	240		
Br	362	285	---	201	217	249	216	190	
I	295	213	---	201	---	278	208	175	149



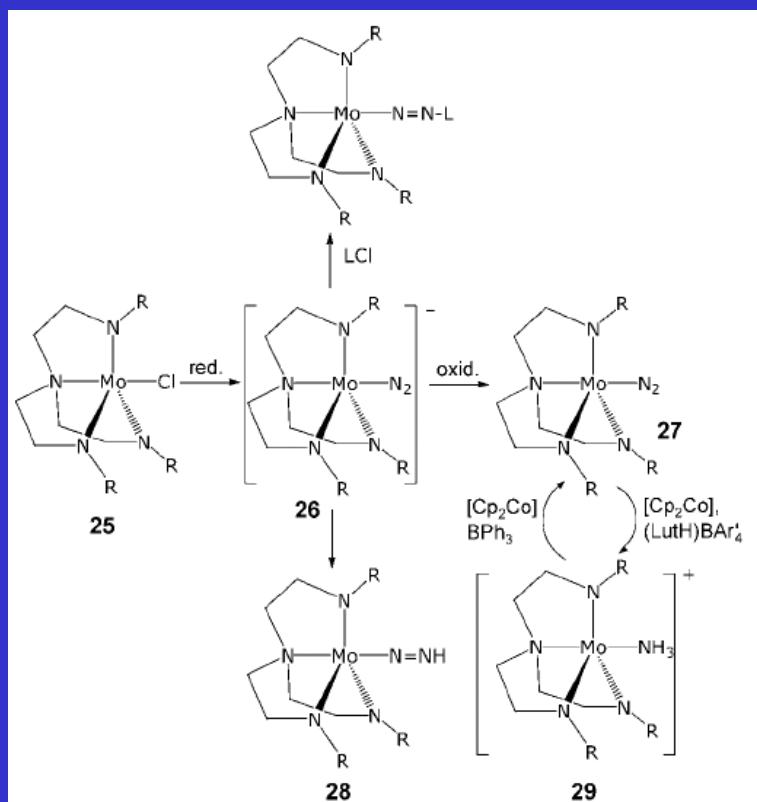
Vazebná vzdáenosť v molekule H_2

Vazebná energie N₂

$$E_{\text{vaz}} = 942 \text{ kJ mol}^{-1}$$



Použití
80% hnojiva
10% plasty
5% výbušniny



1909 Fritz Haber
 $\mathbf{N}_2(\mathbf{g}) + \mathbf{H}_2(\mathbf{g}) \text{ exo}$
500 °C, 250 atm, Fe katalyzátor
výtěžek 20%

NP za chemii 1918