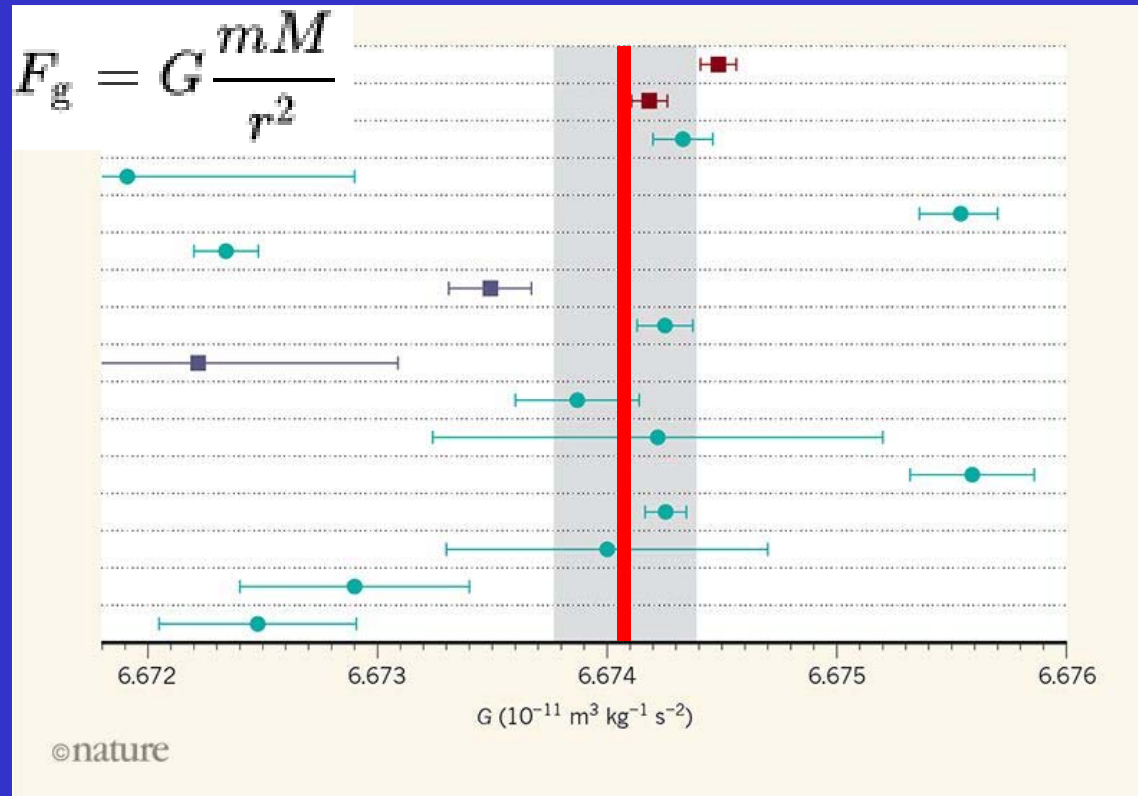


Měření a platné číslice



Měření Newtonovy gravitační konstanty v minulých 40 letech

$$G = (6,674\ 08 \pm 0,000\ 31) \times 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$$

The Committee on Data for Science and Technology

Měření a platné číslice

Měření = určení velikosti veličiny v daných jednotkách

Měření = **odečtení** hodnot na stupnici + **odhad** posledního místa výsledku na **desetinu** nejmenšího dílku stupnice

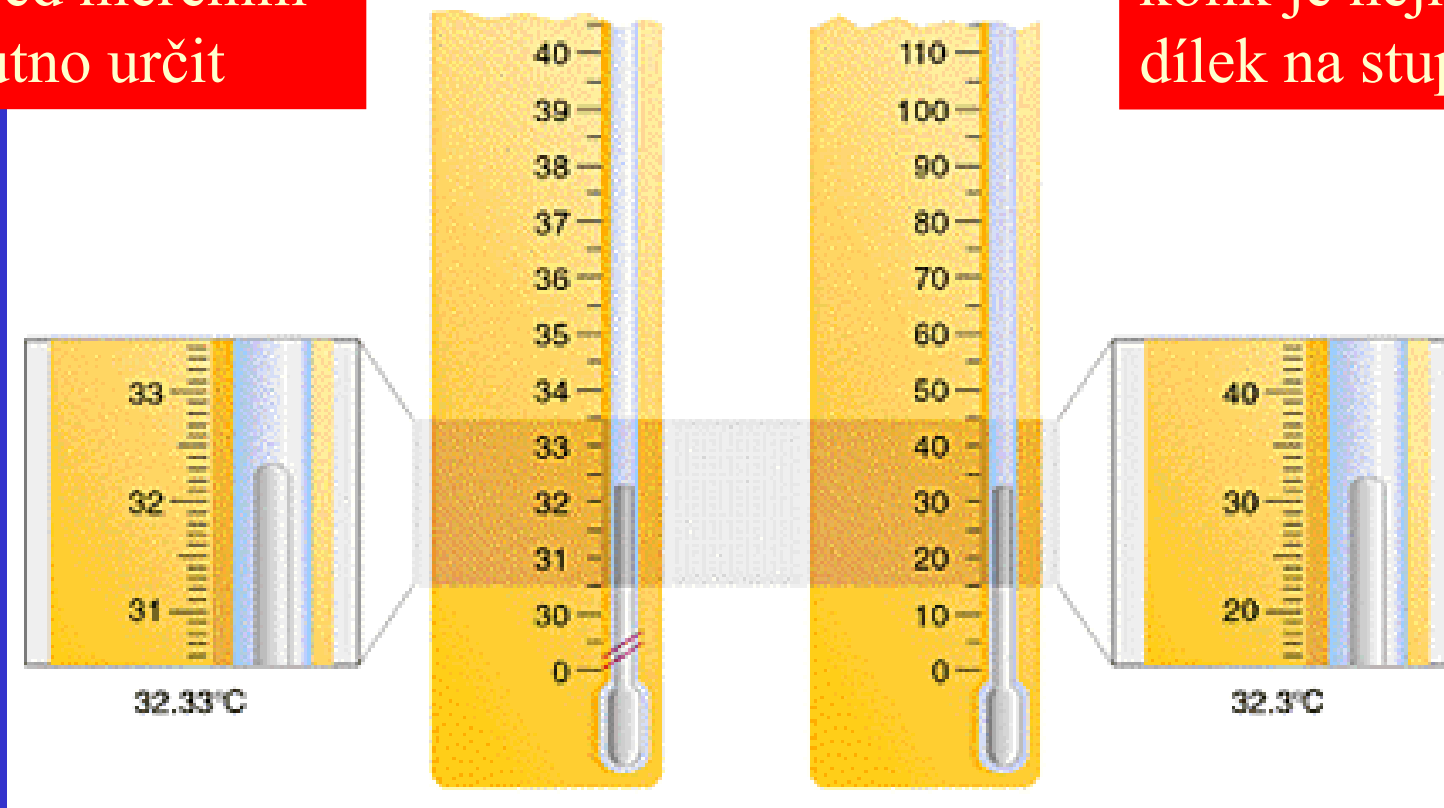
Chybu měření předpokládáme minimálně
 ± 1 posledního místa

Platné číslice = čísla odečtená ze stupnice + poslední **odhadnuté** místo

Měření

Před měřením
nutno určit

kolik je nejmenší
dílek na stupnici



32,33 °C

32,3 °C

Odečtení hodnot na stupnici + **odhad** posledního místa výsledku
na **desetinu** nejmenšího dílku stupnice

Vážení

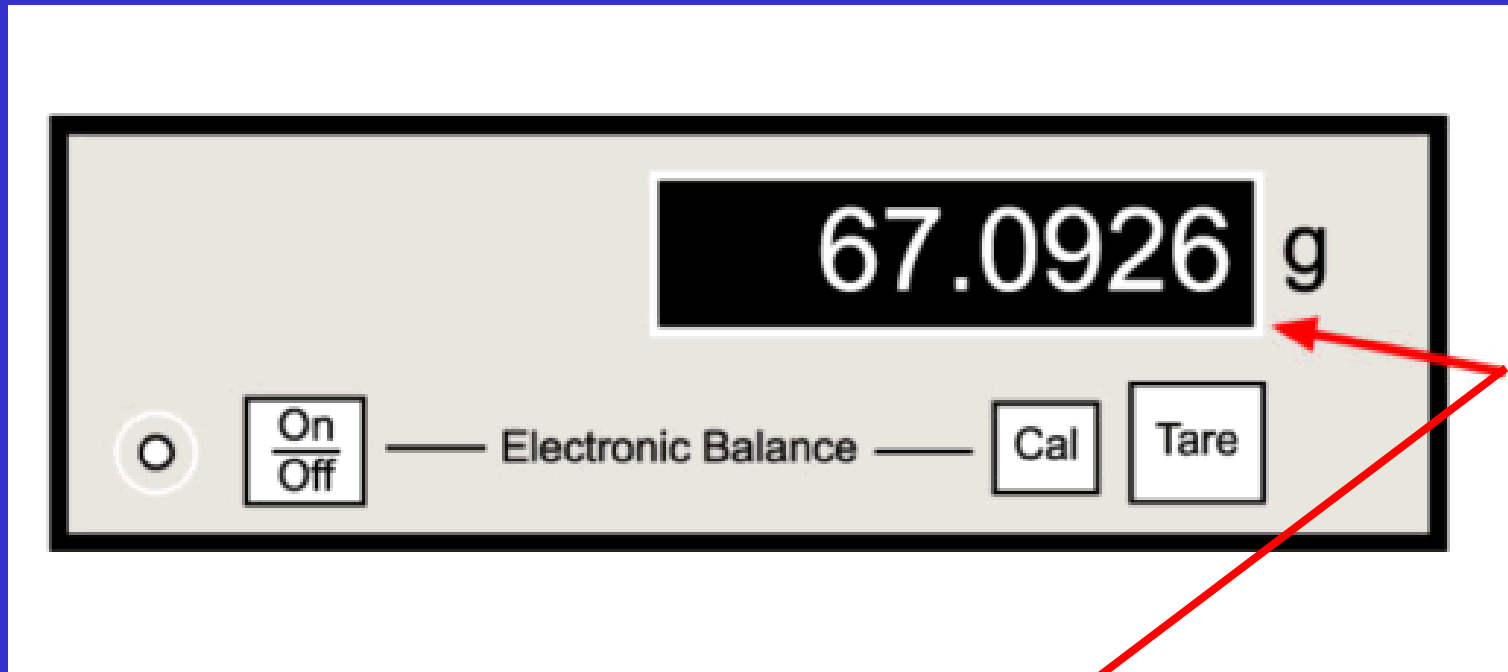


Analytická chemie



Syntetická chemie

Odečtení z digitální stupnice



**Chybu měření předpokládáme ± 1 posledního místa
nebo najdeme v manuálu**

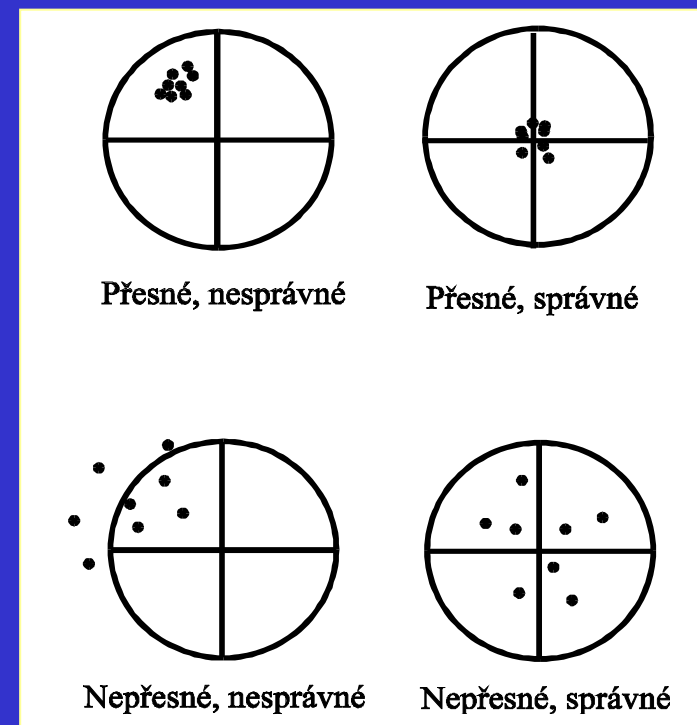
Přesnost a správnost (pravdivost) měření

Měření každé fyzikální veličiny je spojeno s určitou nepřesností – **chybou**

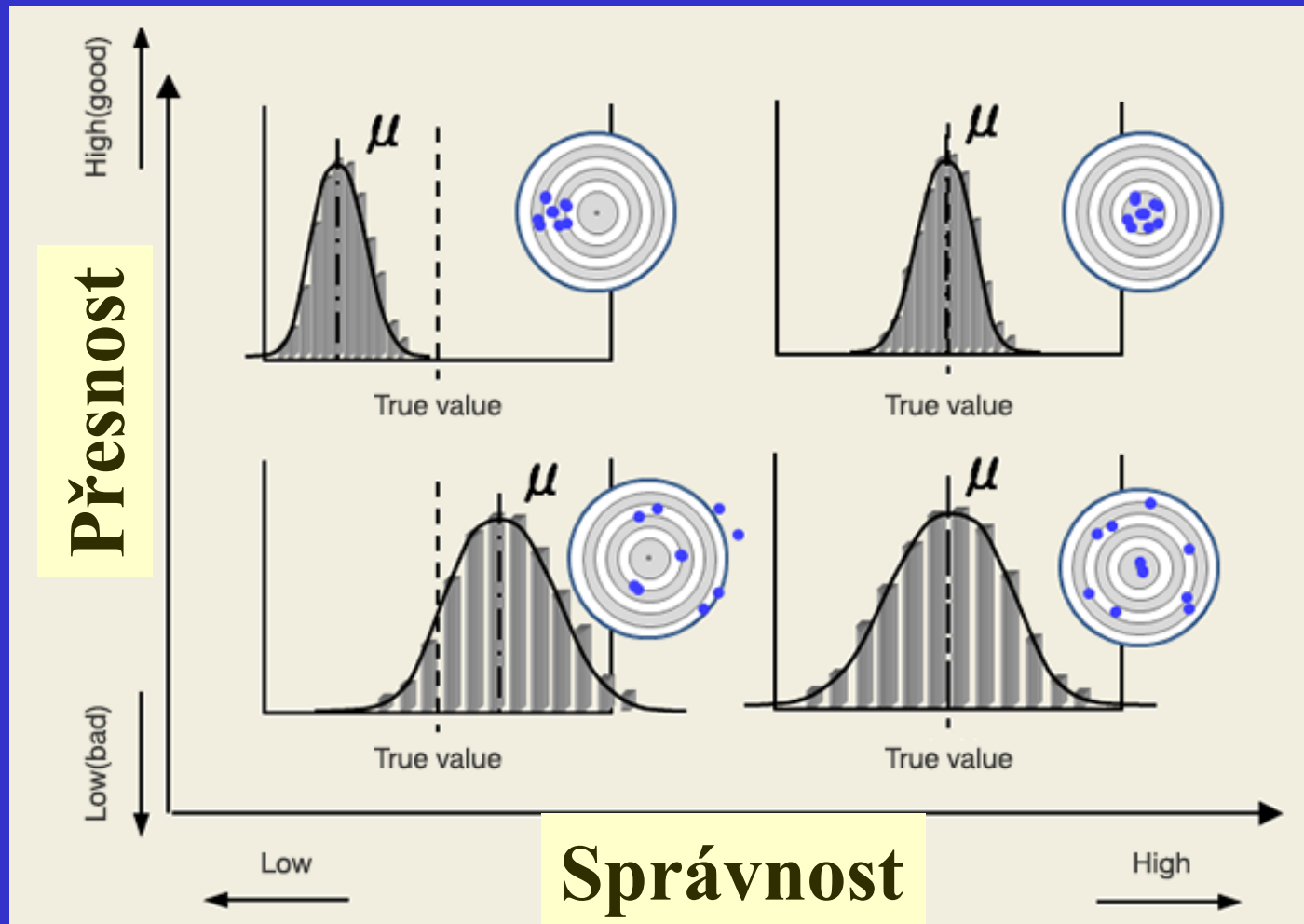
Opakovaná měření se od sebe liší – drobné odchylky jsou obvykle na posledním místě výsledku

Přesnost = rozdíl mezi jednotlivými výsledky měření, závisí na schopnostech experimentátora

Správnost (pravdivost) = rozdíl mezi výsledky měření a **skutečnou hodnotou**, závisí na kvalitě měřícího přístroje



Přesnost a správnost (pravdivost) měření



Platné číslice

Nuly mezi desetinnou čárkou a první nenulovou číslicí nejsou platné číslice **0,003400**

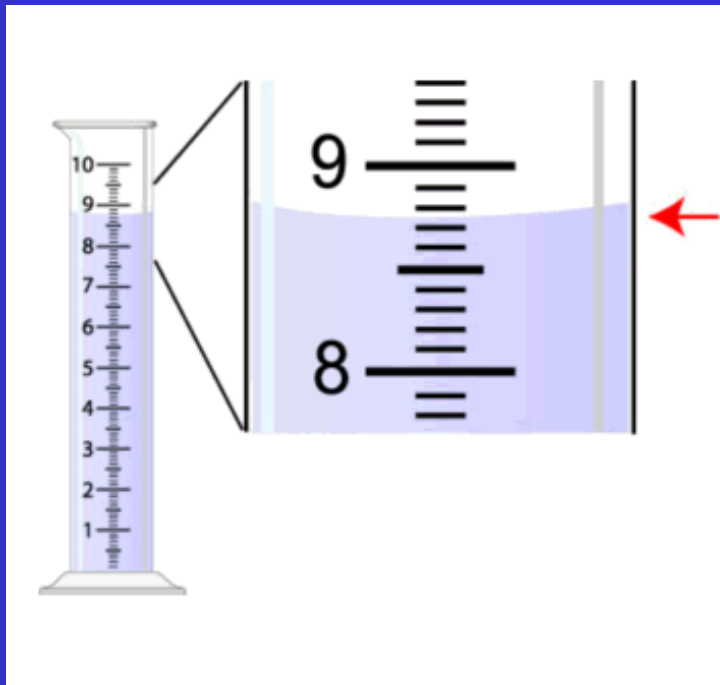
Nuly za nenulovými číslicemi ve výsledku vyjádřeném desetinným číslem jsou platnými číslicemi **0,003400**

Nuly na konci výsledku, který neobsahuje desetinnou čárku, MOHOU, ale NEMUSÍ být platnými číslicemi, záleží na přesnosti měření **1200**

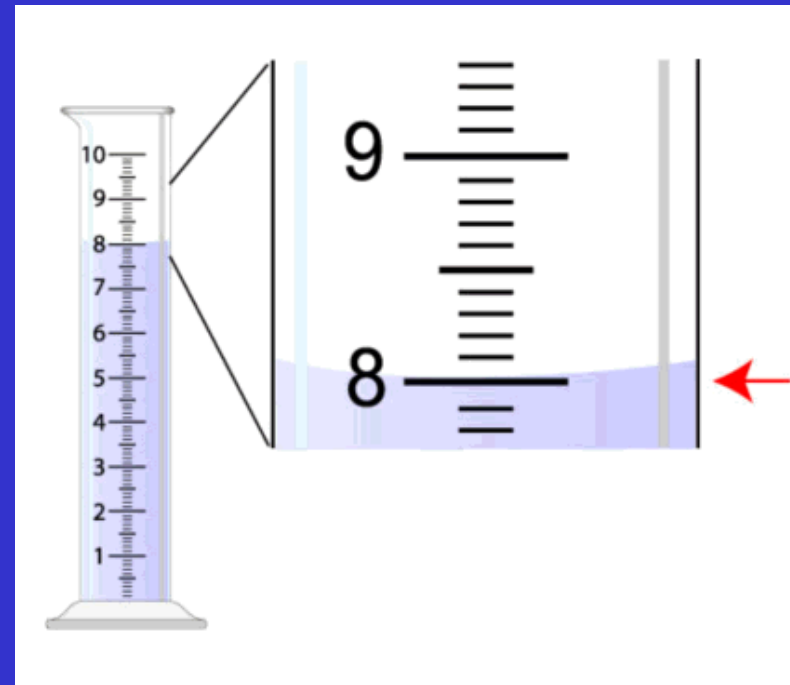
Proto pro jednoznačnost se používá EXPONENCIÁLNÍ zápis: jedno místo před desetinnou čárkou, desetinná místa odpovídající přesnosti měření, exponent, jednotka: **1,2** 10^3 8

Platné číslice

Odečtení ze stupnice – počet platných číslic určen kvalitou přístroje



8,75 cm³



8,00 cm³

NE 8 cm³ !!!!

Číslo odečtená ze stupnice + poslední **odhadnuté** místo⁹

Platné číslice

Exaktní čísla = nekonečný počet platných míst (nuly), nemají chybu měření, neovlivňují počet platných číslic výsledku výpočtu při výpočtech (násobení/dělení)

- počet lidí, pokusů, ...

- převodní faktory 1 týden = 7 dní (7,000000000...)
1 inch = 2,54 cm

- definice 0 °C = 273,15 K

Operace s platnými číslicemi

Násobení a dělení: výsledek má tolik **PLATNÝCH** číslic jako má číslo s **nejmenším** počtem **platných** číslic

$$p V = n R T$$
$$p = 748 \text{ Torr} = 99,7 \cdot 10^3 \text{ Pa}$$
$$V = 1254 \text{ ml} = 1,254 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$
$$T = 298 \text{ K}$$
$$R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

$$n = pV/RT = 5,0462226 \cdot 10^{-2} \text{ mol} = 5,05 \cdot 10^{-2} \text{ mol}$$

Zaokrouhlování - zaokrouhlovat až konečný výsledek

Operace s platnými číslicemi

Sčítání a odčítání: výsledek má tolik **DESETINNÝCH** míst jako má číslo s **nejmenším** počtem **desetinných** míst

Příklad:

Naměříme 2,5 cm pomocí pravítka a 1,2 μm pomocí mikrometru

sečteme	2,5 cm	s chybou $\pm 0,1$ cm
	+0,00012 cm	s chybou $\pm 0,00001$ cm
výsledek není		2,50012 cm
ale		2,5 cm

protože chyba prvního měření převyšuje **řádově** hodnotu druhého měření

Operace s platnými číslicemi

Dekadický a přirozený logaritmus: výsledek má tolik **DESETINNÝCH** míst jako má logaritmované číslo platných číslic

Příklad:

Naměříme koncentraci $2,35 \text{ mol l}^{-1}$ 3 platné číslice
 $\log 2,35 = 0,371$ 3 desetinná místa za čárkou

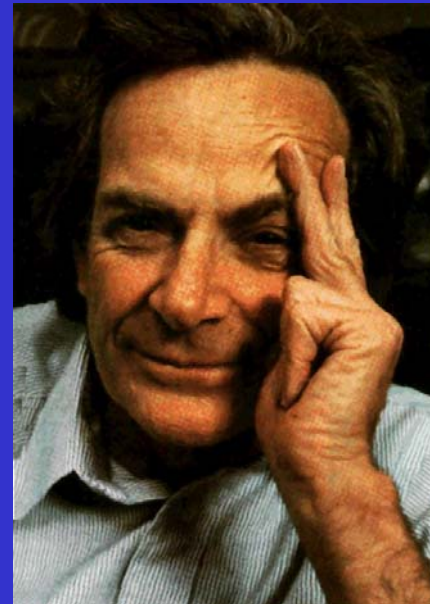
Roztok HCl má koncentraci $1,5 \cdot 10^{-2} \text{ mol l}^{-1}$
 $\text{pH} = -\log [\text{H}^+] = -\log 1,5 \cdot 10^{-2} = 1,82$

Hmota

Cokoliv zabírá prostor a má hmotnost je **hmota**

Veškerá hmota sestává z pozitivně a negativně nabitých částic, které jsou v neustálém pohybu, na krátké vzdálenosti se vzájemně přitahují, odpuzují se pokud jsou stlačeny příliš blízko k sobě

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



Zákon zachování hmoty

Lavoisierův zákon 1785

Hmota se netvoří ani nemůže být zničena

Při chemických reakcích zůstává hmotnost všech zúčastněných sloučenin konstantní

Zákon je výsledkem přesného měření: **vážení** reaktantů a produktů (a naopak z vážení získáme informace o chemických reakcích)



Antoine Laurent Lavoisier
(1743 – 1794)
gilotina

Zákon zachování hmotnosti a energie

Hmotnost je mírou gravitačních vlastností a setrvačnosti

Ekvivalence hmoty a energie $E = m c^2$

$$u = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 931,4 \text{ MeV}$$

Soustava:

Izolovaná = Hmotnost a energie je konstantní

Uzavřená = Hmotnost je konstantní, energie se vyměňuje s okolím

Úbytek hmotnosti při uvolnění energie:

- Chemické reakce ng na mol
- Jaderné reakce mg na mol

Zákon stálých slučovacích poměrů

Proustův zákon konstantního složení

1788/1799

Prokázal konstantní složení vody

(1783 H. Cavendish: voda = $H_2 + O_2$)

Existují SnO a SnO_2 , ale nic mezi nimi

$CuCO_3$ - daná sloučenina vždy obsahuje přesně stejná relativní hmotnostní množství prvků, ze kterých se skládá, nezáleží na způsobu vzniku nebo postupu přípravy, přírodní nebo syntetický vzorek



Louis Joseph Proust
(1754 - 1826)

1,000 g UHLÍKU se vždy sloučí s 1,333 g KYSLÍKU na CO ¹⁷

Zákon násobných slučovacích poměrů

Daltonův zákon 1803

Tvoří-li dva prvky řadu sloučenin (N_2O , NO , N_2O_3 , NO_2 , N_2O_5) hmotnosti druhého prvku, který se slučuje s 1 g prvního prvku lze vždy vyjádřit malými celými čísly

Tabulka relativních atomových hmotností 14 prvků vzhledem k vodíku ($\text{H} = 1$) jako standardu



John Dalton
(1766 - 1844)

Oxidy chromu

$$r = \frac{m(O)Cr_xO_y}{m(O)CrO}$$

Sloučenina	$m(\text{Cr}) / \text{g}$	$m(\text{O}) / \text{g}$	Poměr, r
CrO	1,000	0,3077	1,000
Cr ₂ O ₃	1,000	0,4615	1,499
CrO ₂	1,000	0,6154	2,000
CrO ₃	1,000	0,9231	3,000

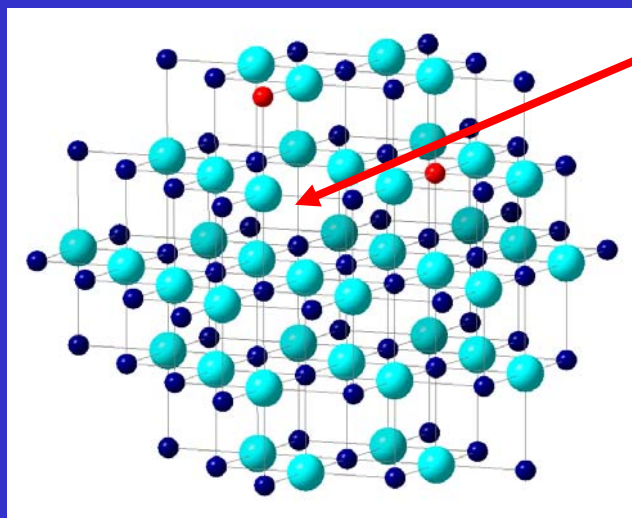
Nestechiometrické sloučeniny - bertholidy

Sloučeniny s kovem ve více oxidačních stavech

Oxidy, sulfidy, nitridy,...



3 pozice Fe^{2+} = 2 pozice Fe^{3+} + 1 vakance (Fe)



Strukturní typ NaCl

Fe^{2+} = modrá

Fe^{3+} = červená

O^{2-} = 

Vakance = neobsazená pozice



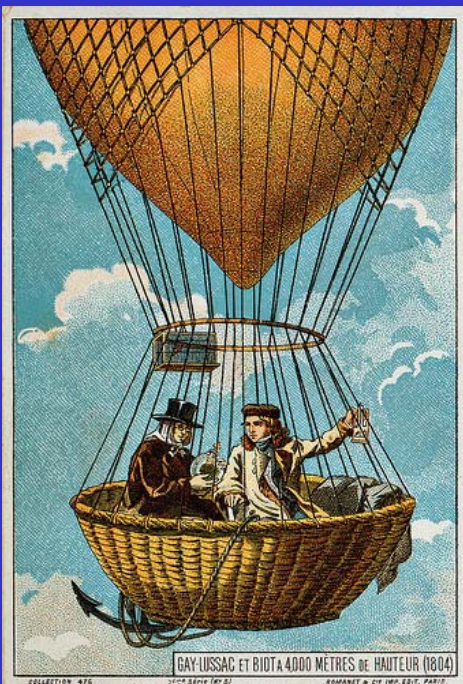
C. L. Berthollet
(1748 - 1822)

Daltonova atomová teorie

1805

- Každý **prvek** se skládá z malých nedělitelných a nezničitelných částic – **atomů** (ne pro jaderné přeměny, $\text{Ra} \rightarrow \alpha + \text{Rn}$)
- **Atomy** stejného prvku mají identické vlastnosti a hmotnost (ne pro nuklidy, ^{12}C , ^{13}C), atomy různých prvků se podstatně liší ve vlastnostech a hmotnosti (ne pro izobary, ^{14}C - ^{14}N)
- **Sloučeniny** jsou tvořeny spojením atomů různých prvků, pro danou sloučeninu vždy stejné typy atomů ve stejném poměru
- **Chemická reakce** je reorganizace vzájemného uspořádání atomů

Zákon nebo teorie ?



Zákon stálých objemů

Joseph Louis Gay-Lussac
(1778 - 1850)

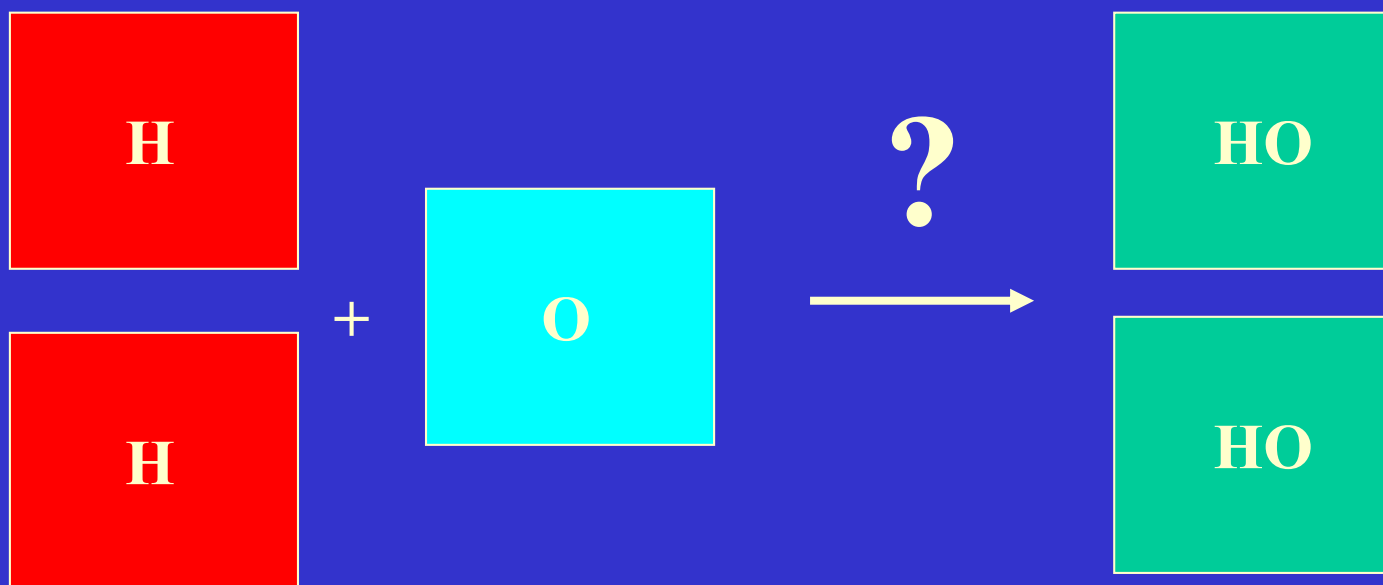


1809 Plyny se slučují v jednoduchých poměrech objemových

2 objemy vodíku + 1 objem kyslíku → 2 objemy vodní páry

Zákon stálých objemů + Daltonova atomová teorie

2 objemy vodíku + 1 objem kyslíku → 2 objemy vodní páry



Daltonova atomová teorie
Prvek se skládá z atomů

Sloučeniny jsou tvořeny
spojením atomů různých prvků

Avogadrova hypotéza

1811 - A. Avogadro z Daltonovy **atomové** teorie a Gay-Lussakova zákona vyvodil:

Při stejné teplotě a tlaku obsahují stejné objemy různých plynů stejný počet částic

Plyny jsou dvouatomové molekuly

H₂, N₂, O₂

Objem 1 molu plynu je **22,4** litru
při 0 °C a 101325 Pa

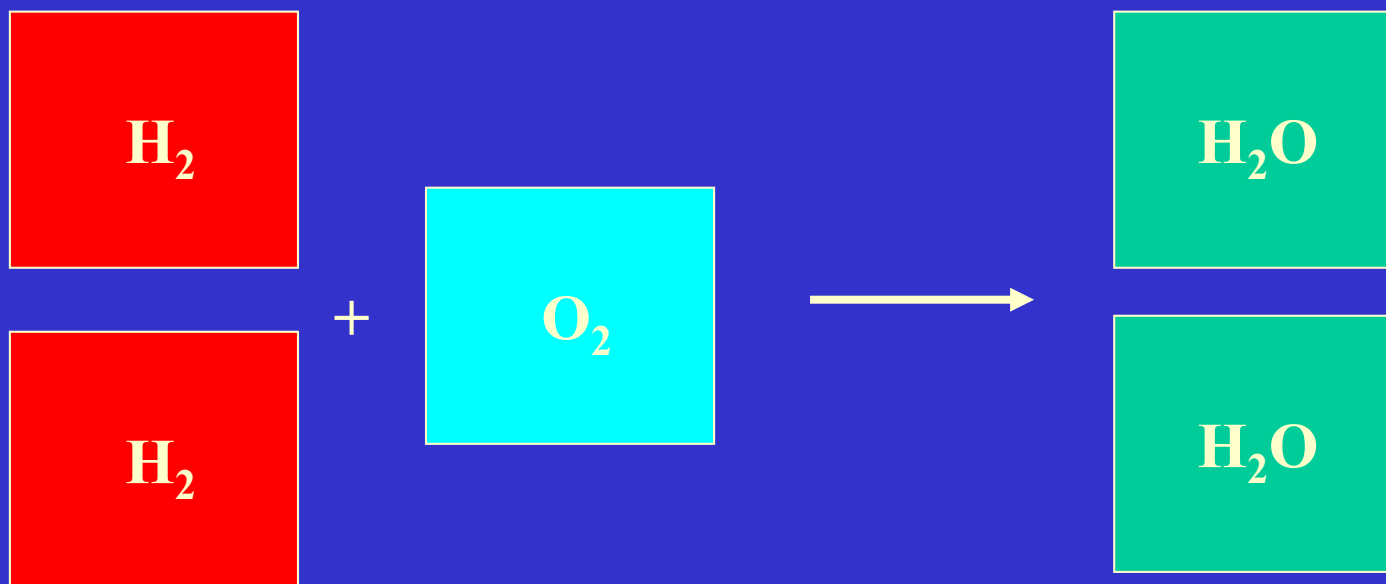
$$V_m = 22,4 \text{ l mol}^{-1}$$



Amadeo Avogadro
(1776 - 1856) ²⁴

Zákon stálých objemů + Avogadrova hypotéza

Plyny jsou dvouatomové molekuly



2 objemy vodíku + 1 objem kyslíku \rightarrow 2 objemy vodní páry

Avogadrova molekula

Poprvé odlišil pojem **atom** a **molekula**

Molekuly = nejmenší částice látky schopné samostatné existence

Určují chemické vlastnosti látek

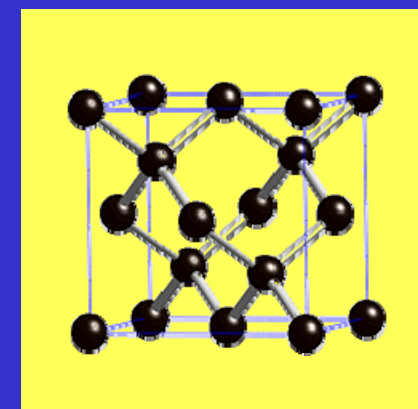
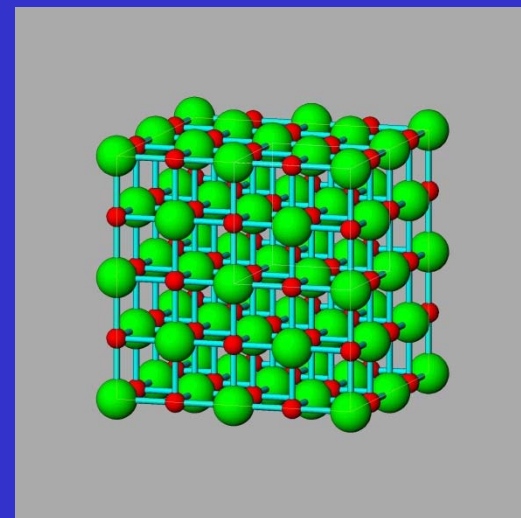
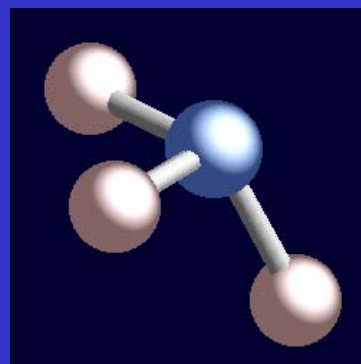
He, Ne, Ar,

N_2 , P_4 (bílý), S_8 , C_{60} ,

BCl_3 , CH_4 , H_2O , NH_3 , CO_2

Nejsou molekuly:

$NaCl$, SiO_2 , BeF_2 , C (grafit, diamant),



Látkové množství

1 mol = takové množství částic (atomů, molekul, elektronů,...)
jako

Avogadrova konstanta = počet částic v 1 molu čisté látky

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

Chemické vzorce $\text{Na}_2\text{SO}_4 = 2 \text{ moly Na} + 1 \text{ mol S} + 4 \text{ moly O}$

$\text{Na}_2\text{SO}_4 = 2 \text{ atomy Na} + 1 \text{ atom S} + 4 \text{ atomy O}$

Stechiometrie chemických rovnic



Hmotnost – mol – Avogadrova konstanta

Prvky se slučují ve stálých hmotnostních poměrech:

NaCl = 23,0 g Na s 35,5 g chloru

Škála relativních atomových hmotností:

H = 1,0 C = 12,0 O = 16,0

Definice molu: 12,0 g ^{12}C = 1 mol

Pak 23,0 g Na = 1 mol

1 mol plynu = 22,4 litru

Změřit kolik částic je v 1 molu (Loschmidt, Perrin,...)

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

Měření Avogadrovy konstanty

Loschmidtovo číslo = počet molekul v jednotce objemu ideálního plynu

1865 z kinetické teorie plynů

(měřitelná viskozita ~ střední volná dráha)

vypočetl

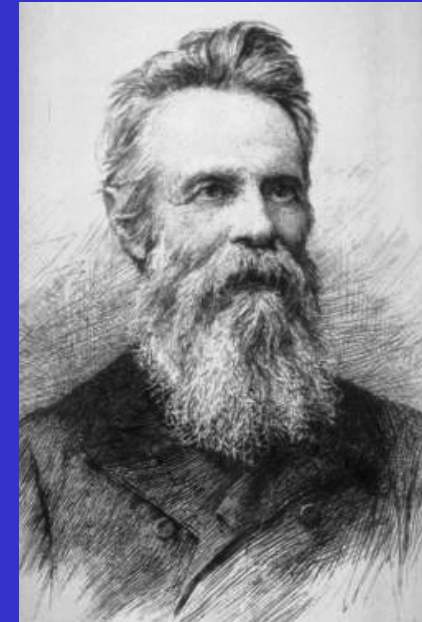
$$n_0 = 1,8 \times 10^{18} \text{ molekul cm}^{-3}$$



Avogadrova konstanta

$$N_A = 4,1 \times 10^{22} \text{ mol}^{-1}$$

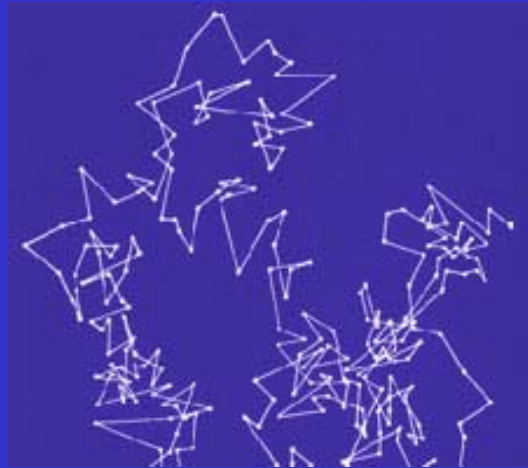
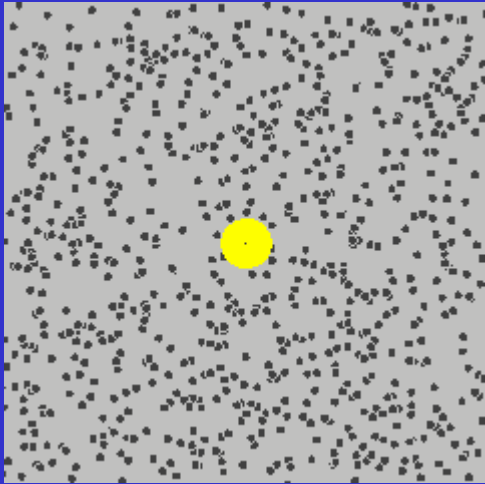
Velká chyba



Johann Josef Loschmidt
(1821 - 1895)

Počerny u KV 29

Měření Avogadrovy konstanty



Brownův pohyb částic v kapalině,
sedimentace, difuze

1908 Experimentální důkaz existence molekul

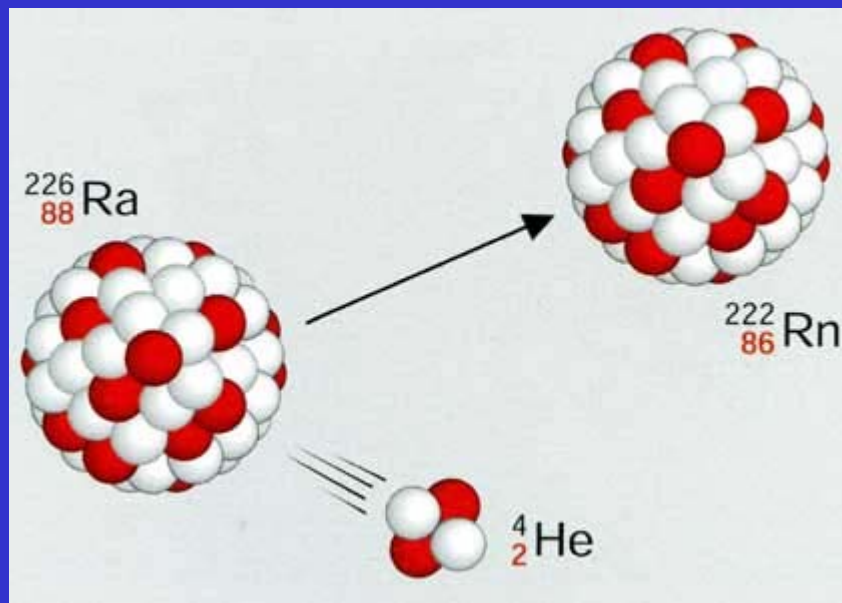
Zavedl pojem Avogadrova konstanta
a experimentálně zjistil její hodnotu:

$$7 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Jean Baptiste Perrin
(1870 - 1942)
NP za fyziku 1926

Měření Avogadrovy konstanty

1911 Ernest Rutherford a Bertram B. Boltwood



1 g radia emituje
 $6,2 \times 10^{10}$ alfa částic
za sekundu
(Geigerův počítač)

Za 132 dní
při $0\text{ }^\circ\text{C}$ a 760 mmHg
získali $10,38\text{ mm}^3$ helia

$$N_A = 6,16 \times 10^{23}$$

Měření Avogadrovy konstanty

Z rentgenové strukturní analýzy monokrystalů Ti

Příklad:

Ti tělesně centrovaná kubická buňka

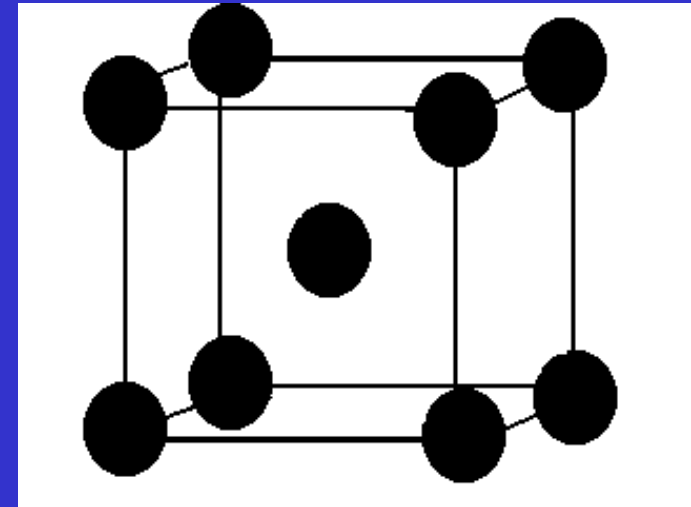
počet atomů v buňce $Z = 2$

Délka hrany $a = 330,6 \text{ pm}$

Hustota Ti $\rho = 4,401 \text{ g cm}^{-3}$

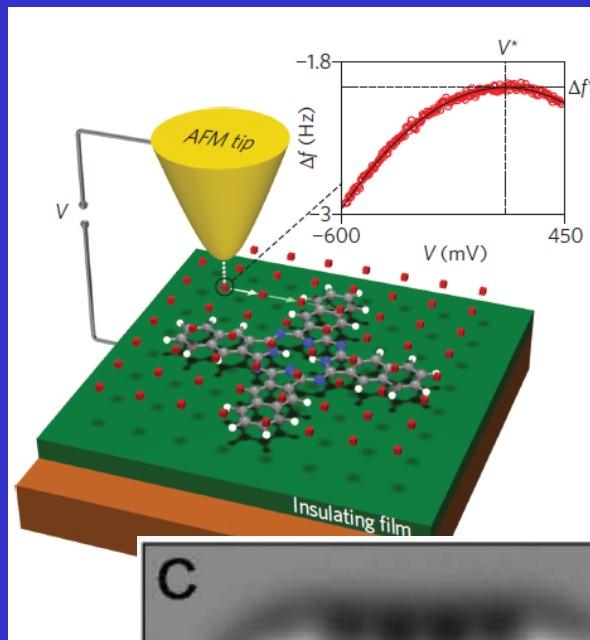
$A(\text{Ti}) = 47,88 \text{ g mol}^{-1}$

2 Ti na 1 buňku o objemu $V = a^3$

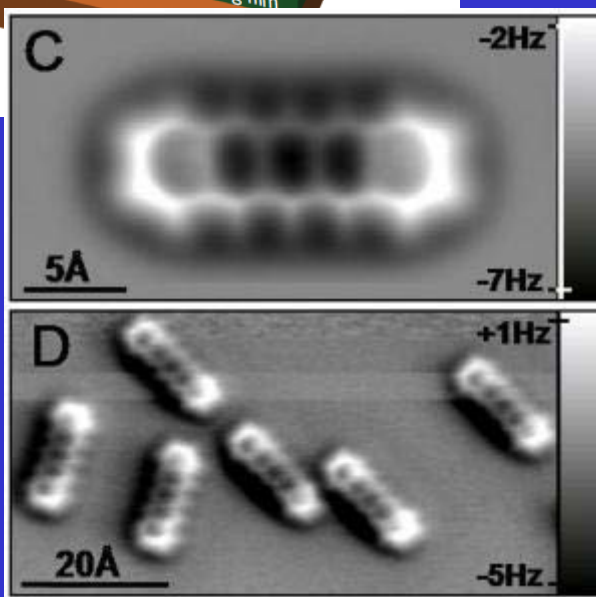
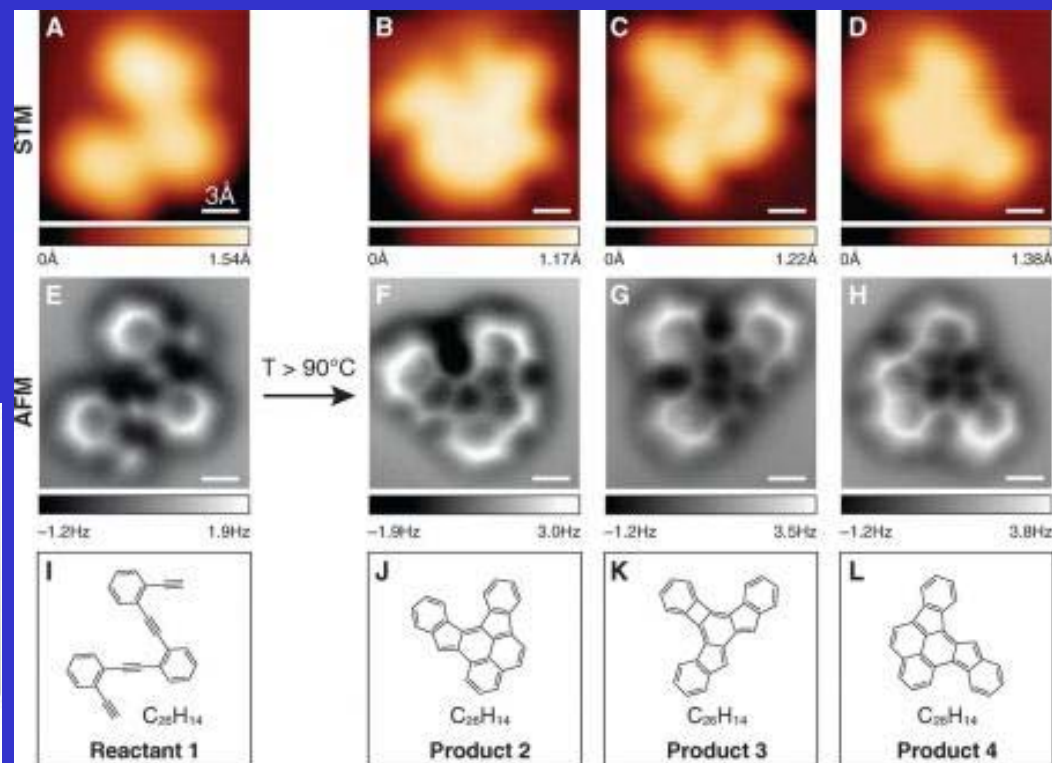


$$\rho a^3 = Z \frac{A(\text{Ti})}{N_A}$$

STM/AFM - Mikroskopie skenovací sondou

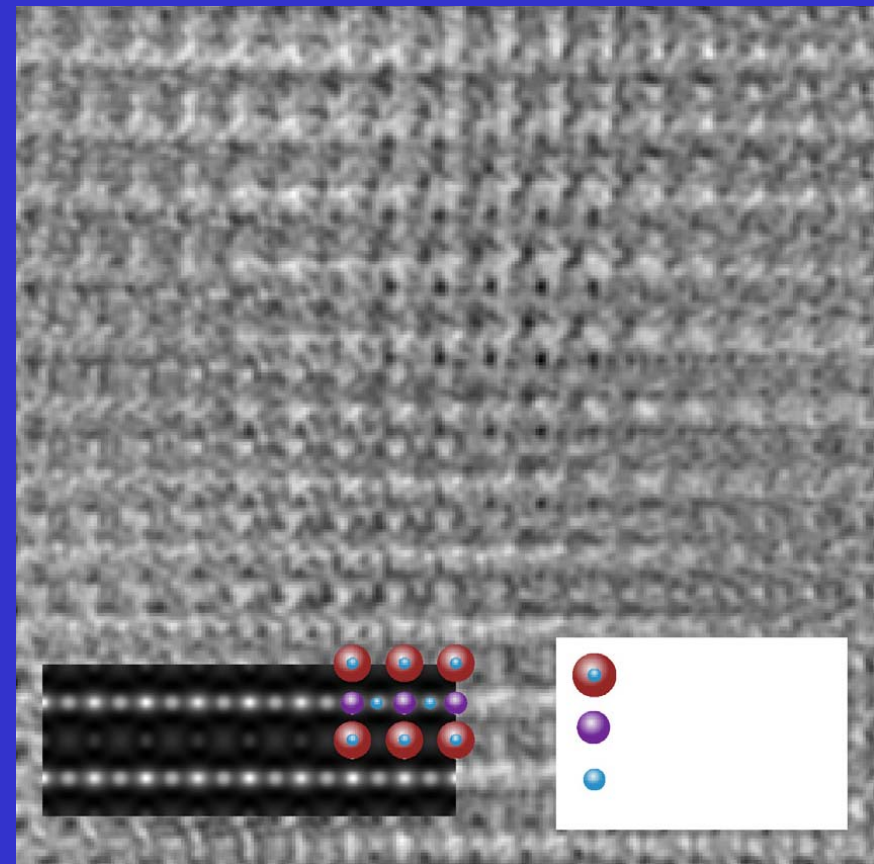
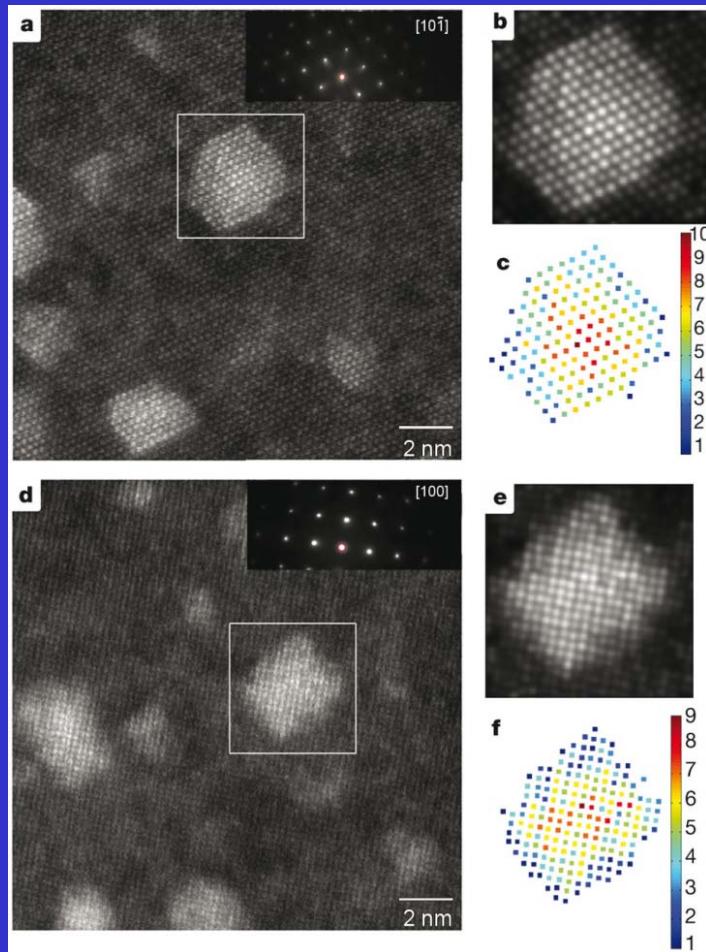


Zobrazení molekul



TEM - Transmisní elektronová mikroskopie

Zobrazení atomů



Pojem atomu v historii chemie

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 - až do 1805 – **John Dalton**

Pojem prvku v historii chemie

Tháles Milétský (624 - 543 př.n.l.) - Základní prvek je voda

Empedokles (490 - 430 př.n.l.)

4 základní prvky = oheň, voda, vzduch, země

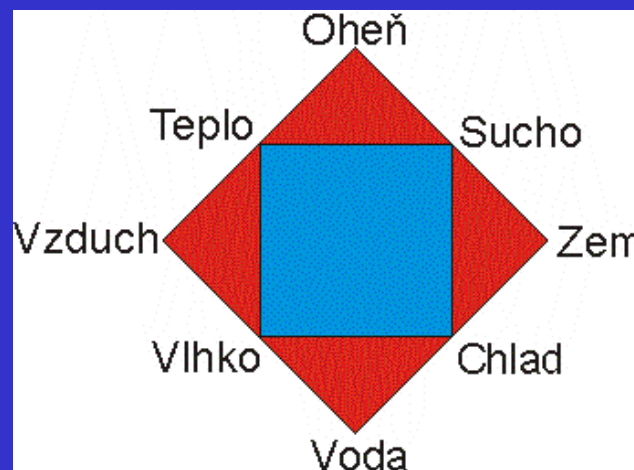
a 2 základní síly: přitažlivá a odpuzivá

(až 1783 H. Cavendish: voda je sloučenina H_2 a O_2)

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

Prvek je nositel vlastností

Kombinace vlastností



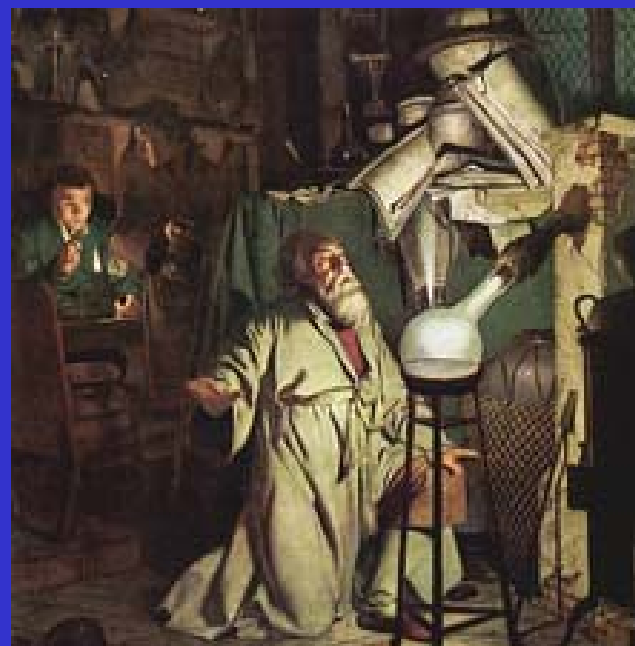
Pojem prvku v historii chemie

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	Slunce
Ag	Měsíc
Sn	Jupiter
Fe	Mars
Cu	Venuše
Hg	Merkur
Pb	Saturn



Pojem prvku v historii chemie

**Philippus Theodorus Bombastus von Hohenheim
Paracelsus (1493–1541)**

Tři elementární substance: rtuť, síra a sůl

1537 Moravský Krumlov - Jan z Lipé

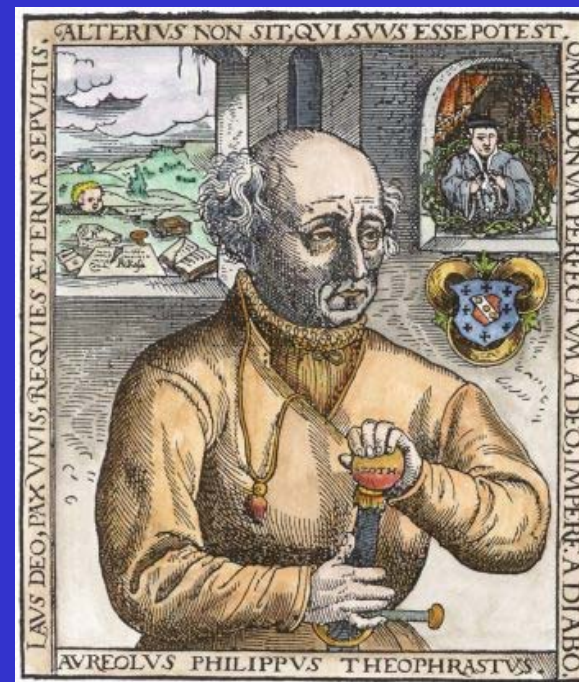
Oslepnutí syna Pertolda na jedno oko

a smrt Jany z Perštejna

Rtuť = tekutost a kovový charakter

Síra = hořlavost

Sůl = inertní element



Pojem prvku v historii chemie



1661 Robert Boyle – první přírodovědecká definice prvku:
Prvek je látka, která se nedá rozložit na jiné látky

1789 Lavoisier 21 prvků (kyslík)

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

1813–14 Berzelius 47 prvků

1869 Mendělejev tabulka 63 prvků

2018 Periodická tabulka dnes: známe 118 prvků



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 ^{16}O , ^{17}O , ^{18}O)
Chemická stupnice

Fyzikální stupnice $^{16}\text{O} = 16$ (hmotnostní spektrometrie) ZMATEK

1961

Atomová hmotnostní jednotka = 1/12 hmotnosti atomu nuklidu ^{12}C
1 amu = 1 u = 1,6606 10^{-27} 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

Cn Copernicium

Vzorce sloučenin

H²O dnes H₂O



Jöns Jacob Berzelius
(1779 - 1848)

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

Chemical Abstracts Service (www.cas.org)

CAS Registry - **187 milionů** chemických sloučenin (9/2021)

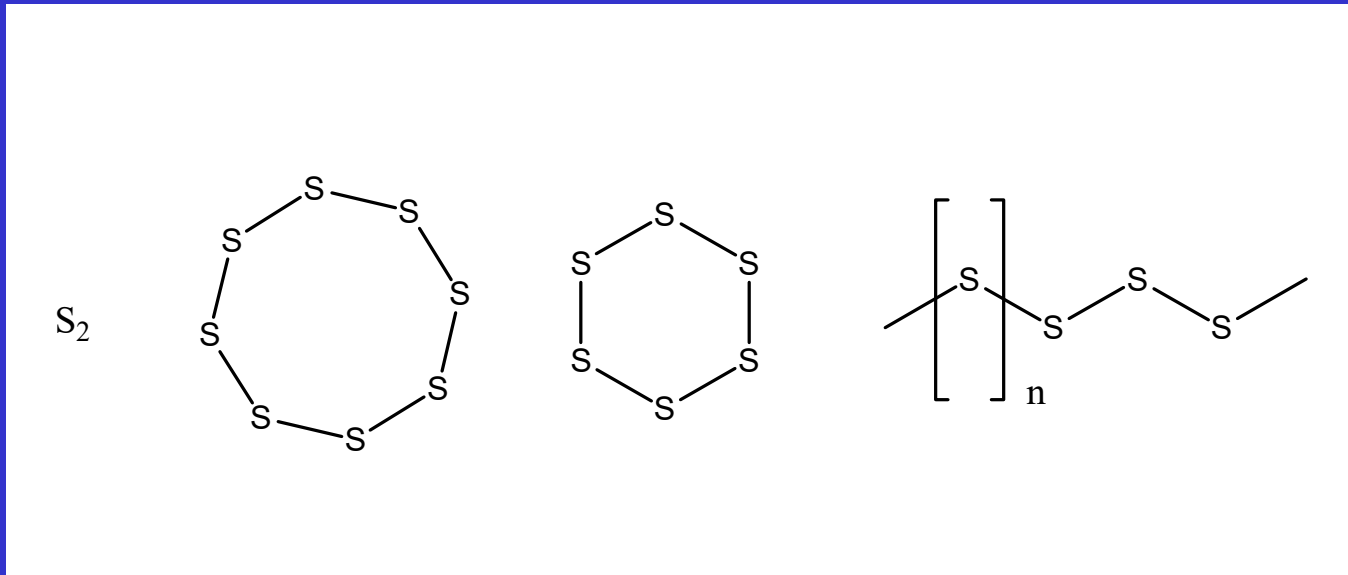
Druh atomů	Ar nebo B O a B nebo O a C	prvky sloučeniny
Relativní počet atomů		AB nebo AB ₂
→ empirický vzorec		(CO nebo CO ₂)
Absolutní počet atomů		A ₂ B ₂ nebo A ₆ B ₆
→ molekulový vzorec		(C ₂ H ₂ nebo C ₆ H ₆) [CoN ₆ H ₁₅ O ₂] ²⁺

Prvky – struktura – allotropie

Struktura (vazby mezi atomy)

→ strukturní 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 - kyanatá, HNCO - isokyanatá, HONC - fulminová

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]^{2+}$ nitro $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{ONO}]^{2+}$ nitrito

Topologická (konstituční, vazebná) izomerie

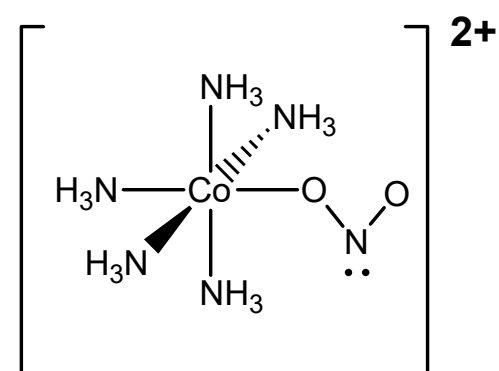
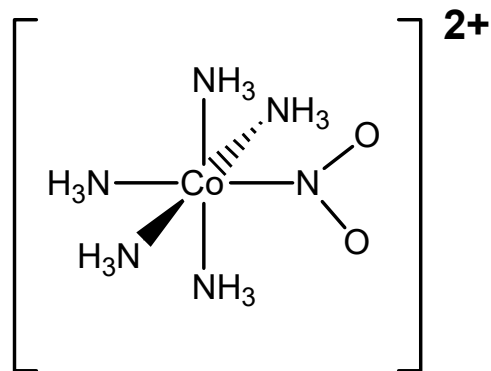


217 izomerů C_6H_6

$\Sigma 217$

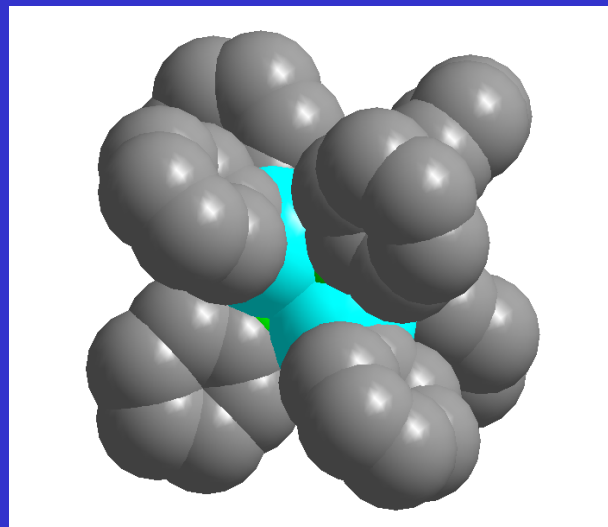
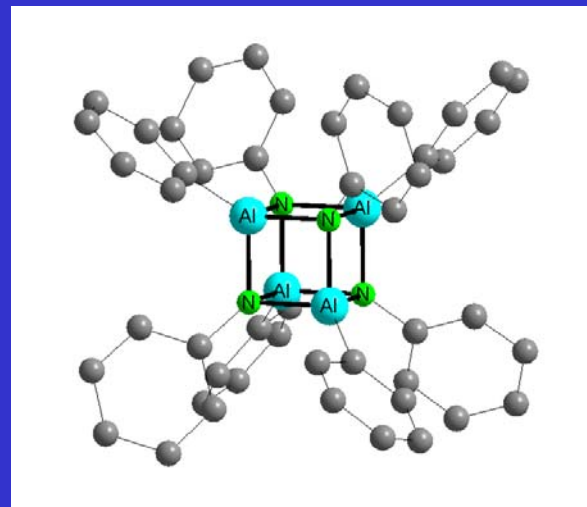
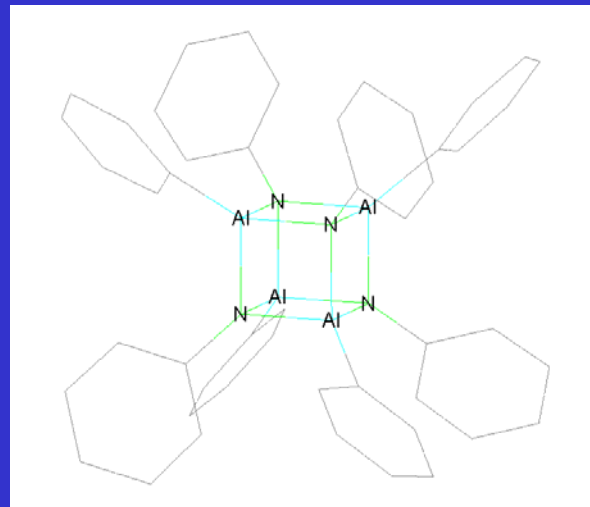
Molekulární tvar

Molekulární tvar → geometrický vzorec



Vazebná izomerie NO₂ skupiny

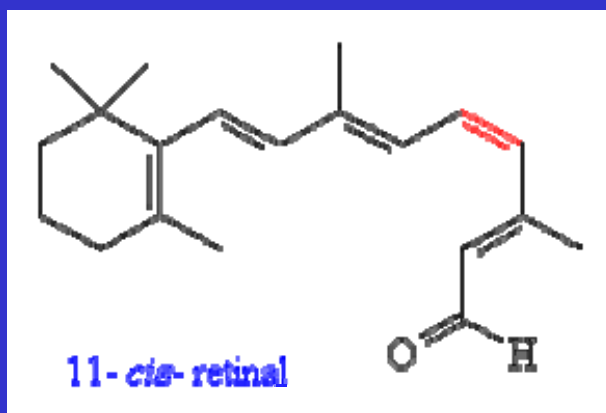
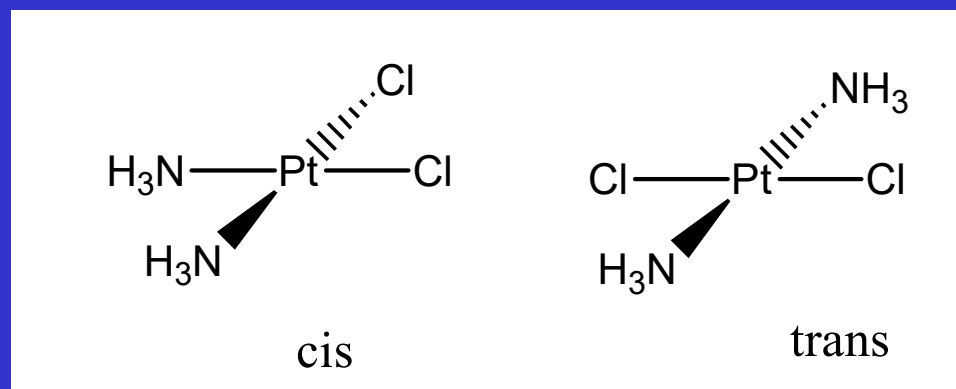
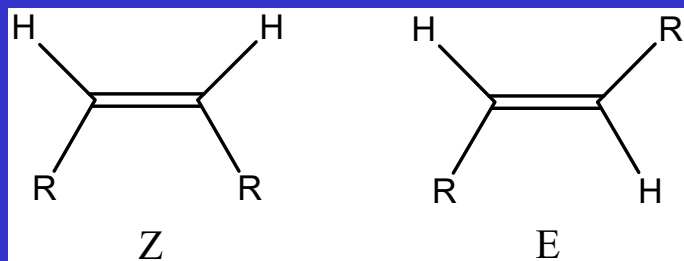
Sloučeniny – struktura – konstituce



Molekulární tvar

Molekulární tvar → geometrický vzorec

geometrické izomery

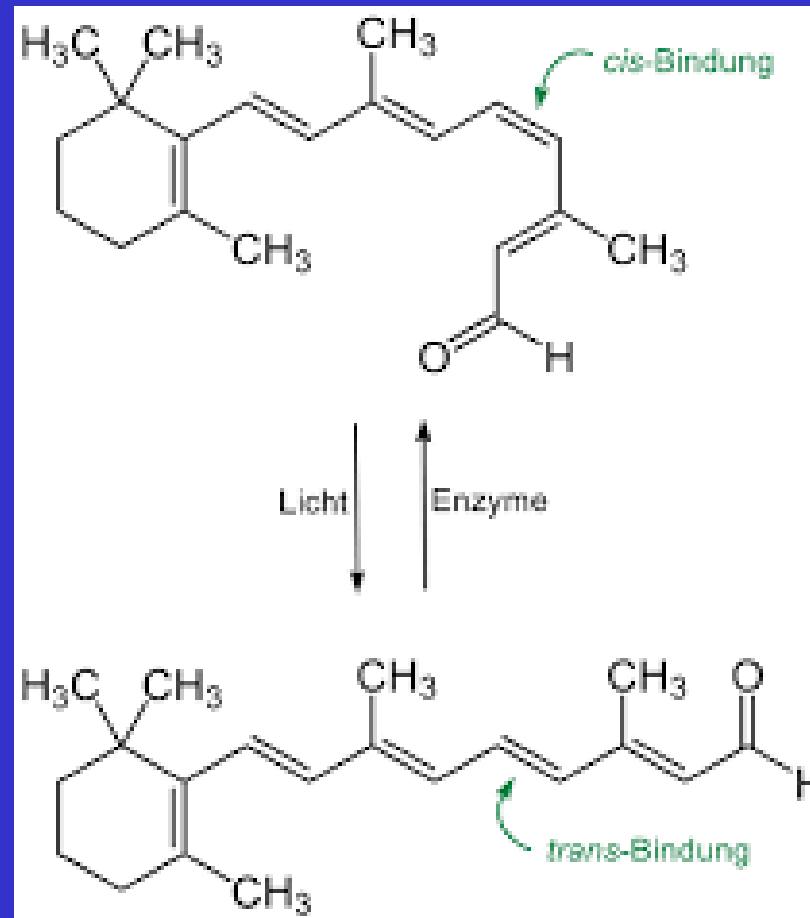


Molekulární tvar

- fyzikální vlastnosti
- chemická reaktivita

Molekulární podstata vidění

Tma = cis izomer



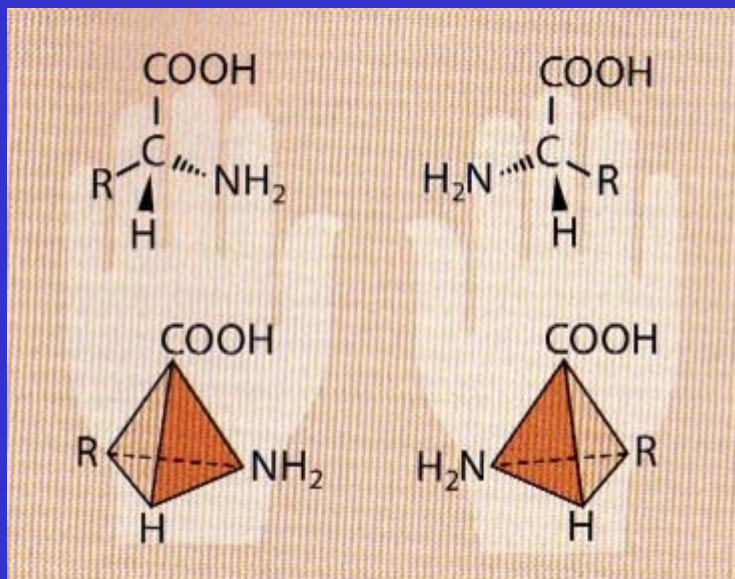
Světlo = trans izomer

Molekulární tvar

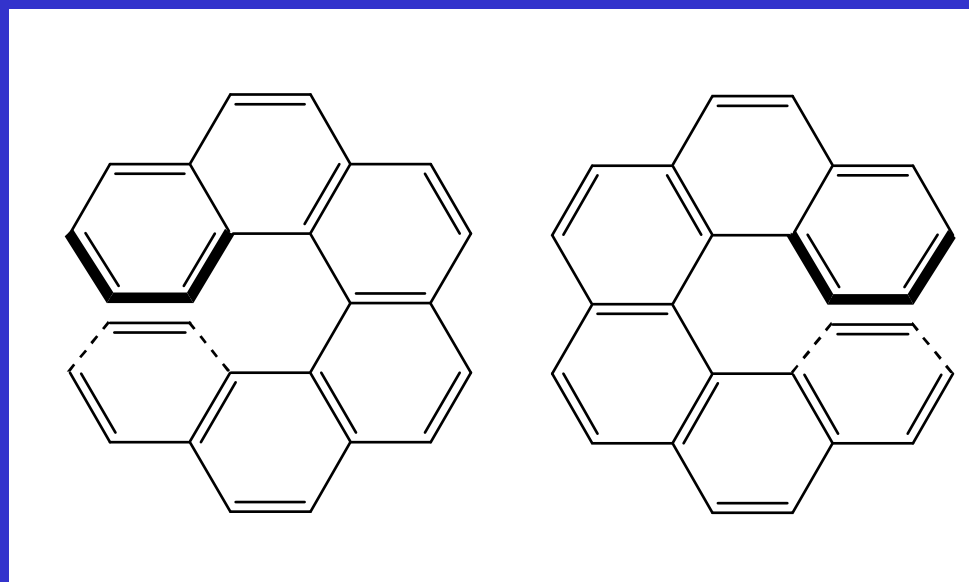
Molekulární tvar → geometrický vzorec

Optické izomery – enantiomery

Dissymetrie

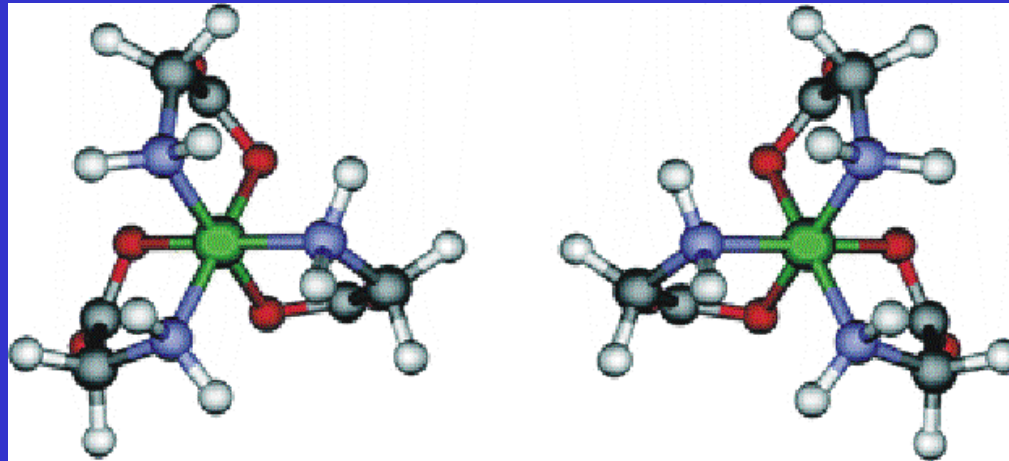


Asymetrický atom

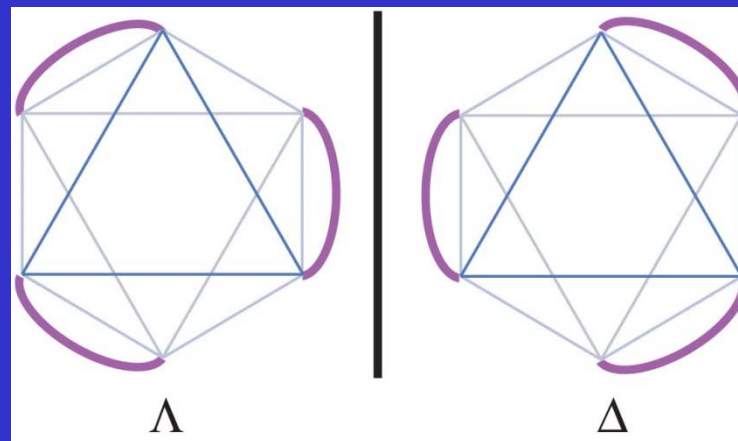


Optické izomery - enantiomery

Oktaedrický komplex

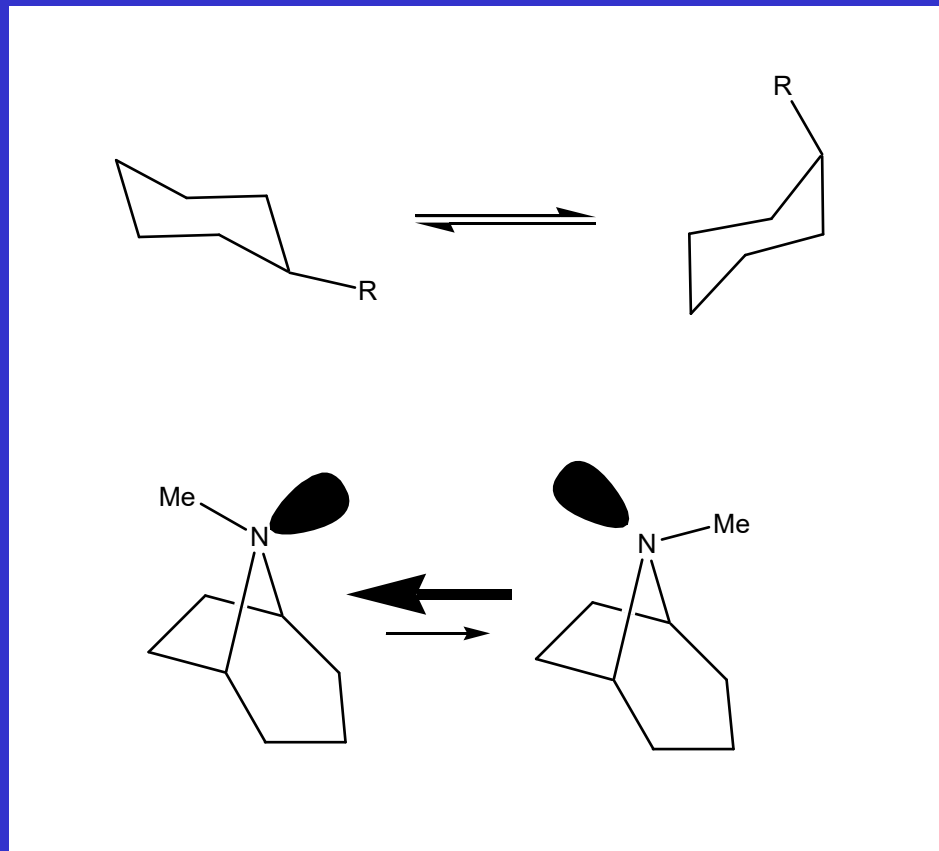


Fac-Tris(glycinato)chromitý komplex



Molekulární tvar

konformery

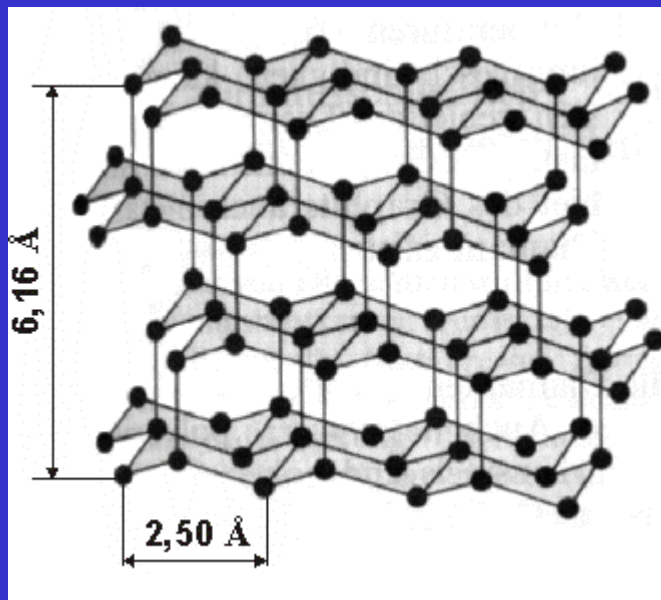


Krystalová struktura

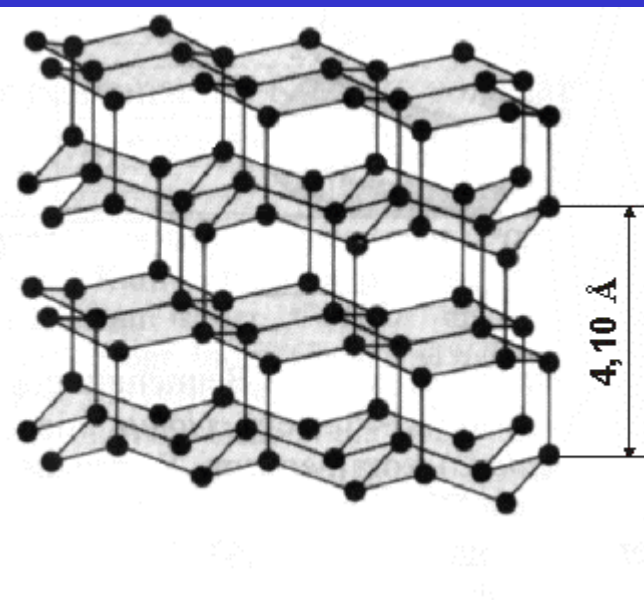
Polymorfie – jen pro pevné látky

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

Kubický diamant



Hexagonální diamant



Vývoj znalostí o složení atomu

Thales Milétský - jantar - elektrina

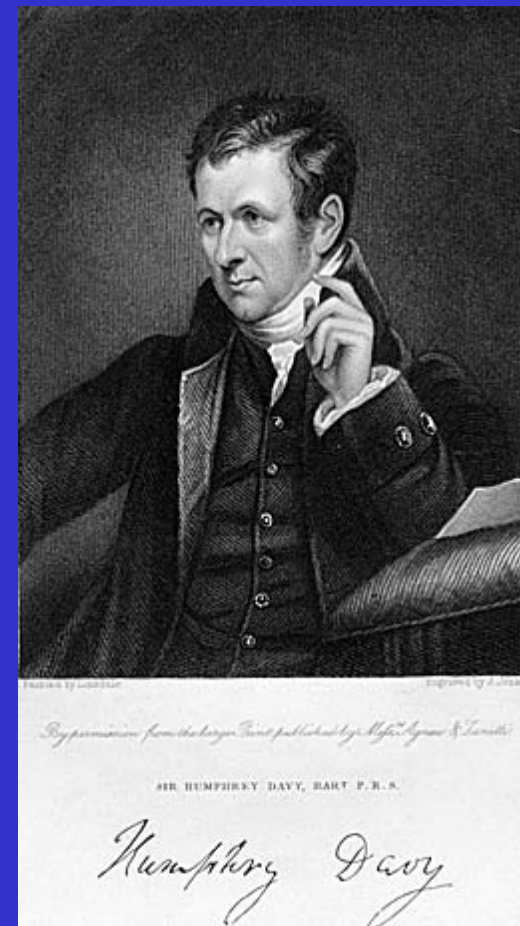
1758 Robert Symmer - dva druhy elektriny
– dvě fluida: (vlněné a hedvábné ponožky)

1807 Humphry Davy - sloučeniny jsou
drženy pohromadě **elektrickými** silami

Získal alkalické kovy z **tavenin** jejich solí
elektrolýzou

Elektrolýza taveniny $K_2CO_3 \rightarrow K$

Elektrolýza taveniny $NaCl \rightarrow Na$



Humphry Davy₅₇
(1778 - 1829)

Faradayův zákon

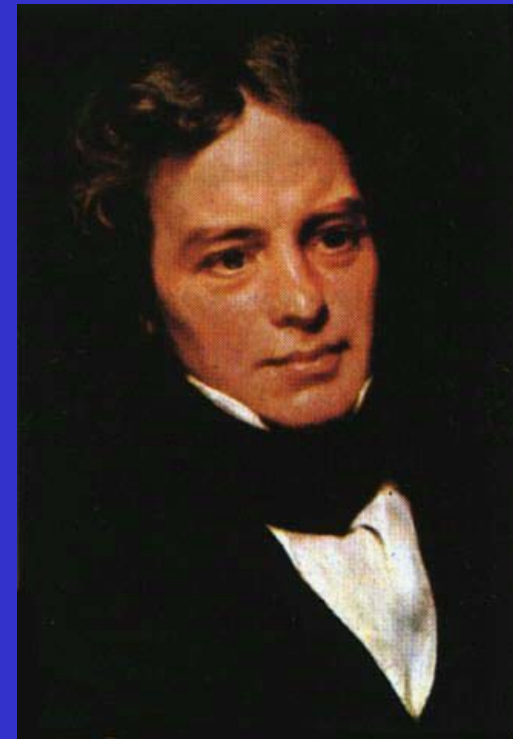
1833 Množství vyloučené látky při elektrolýze je přímo úměrné prošlému náboji Q

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

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

n molů M^{z+} $Q = I \times t$

$$m = \frac{MI t}{zF}$$



Michael Faraday
(1791 - 1867) 58

Složení atomu

1874

Elektrina je tvořena diskrétními negativně nabitými částicemi

1894 název **elektron**

George J. Stoney
(1826 - 1911)



Složení atomu

Katodové paprsky, 1898 - 1903

- Crookesova trubice (William Crookes, 1869 - 1875)
- Vycházejí z negativní elektrody, pohybují se po přímce, zahřívají kov, otáčejí vrtulku (staré TV, TEM, MS)
- Jsou stejné pro různé druhy katodového materiálu a použitého plynu
- Jsou odpuzovány záporným potenciálem

Experimentální

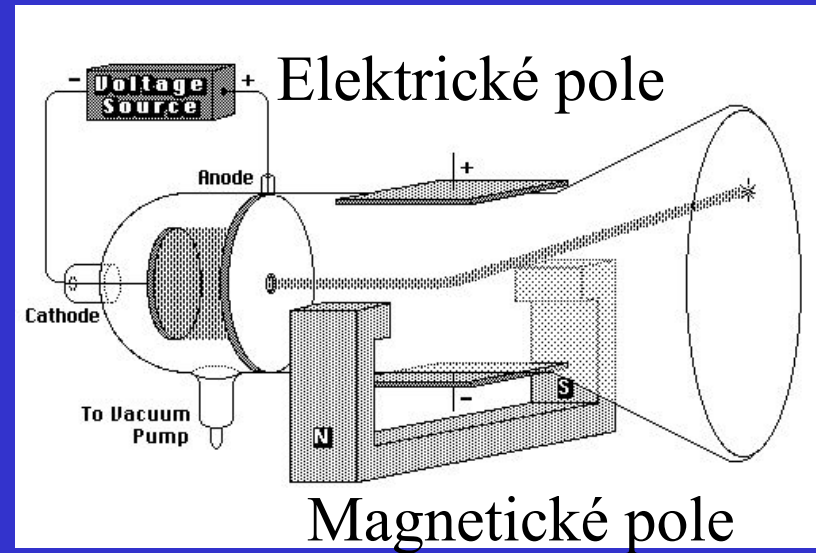
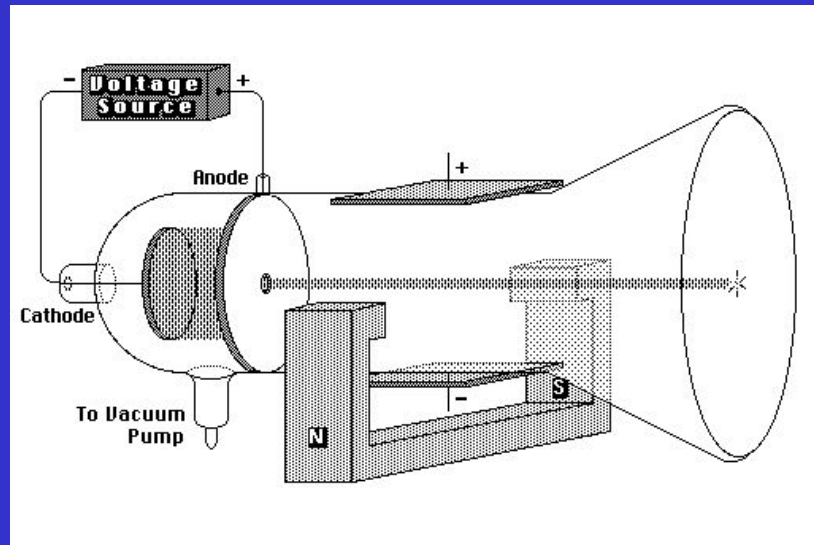
- Potvrzení existence elektronu
- Určení specifického náboje

$$q/m_e = -1,76 \cdot 10^8 \text{ C g}^{-1}$$



Joseph John Thomson
(1856 - 1940)⁶⁰

Katodové paprsky



Specifický náboj

$$q/m_e = -1,76 \cdot 10^8 \text{ C g}^{-1}$$

Thomsonův model atomu

Elektrony

Kladný náboj rozptýlený

