

Anorganická chemie III C4010 Syllabus

Inorganic Chemistry III C4010 Syllabus

Část I. Prof. Příhoda

Part I. Prof. Příhoda

1. Koordinační chemie

Pojem koordinační částice, centrální atom, ligandy, vlastnosti ligandů, koordinační číslo a koordinační polyedry, stabilita komplexu, mechanismy uplatňující se při tvorbě komplexích sloučenin, trans-efekt, izomerie komplexních sloučenin, struktura a elektronické vlastnosti komplexů, stabilita komplexů, cheláty, chelátový efekt.

1. Coordination Chemistry

Coordination particle, central atom, ligands, their properties, coordination number and coordination polyhedra, stability of complexes, complex formation mechanisms, trans-effect, isomerism of complex compounds, structure and electronic properties of complexes, stability of complexes, chelates, chelate effect.

2. Chelátující ligandy

Typy chelátotvorných činidel, chelátotvorná činidla, činidla vhodná pro tvorbu iontových asociátů, organofosforová činidla, metody studia komplexních rovnováh, spektrofotometrické, extrakční, ionexové aj.

2. Chelating Ligands

Types of complex-forming reagents, chelate reagents, reagents suitable for formation of ion associates, organophosphorus ligands, methods for the study of complex compounds, spectrophotometry, extraction, ion exchange etc.

3. Ionty v roztoku

Rozpouštědla, solvatační vlastnosti rozpouštědel, solvatační číslo, reakce spojené s přítomností iontu v roztoku, hydratace iontů, stanovení hydratačního čísla, hydrolyza, polymerizace apod.

3. Ions in Solution

Solvents, solvation properties of solvents, solvation number, reactions connected with the presence of ions in solution, hydration, analysis of hydration number, hydrolysis, polymerization etc.

4. Makroseparační metody kovů

Metody založené na kapalínové extrakci, iontoměničích a iontové chromatografii. Procvičování příkladů - komplexy, extrakce, stanovení konstant stability komplexů.

4. Macroseparation Methods for Metals

Methods based on liquid extraction, ion exchangers, and ion chromatography. Practicing of test problems - complexes, extraction, analysis of stability constants of complexes.

5. Transurany </p>

Nové poznatky v chemii transuranů, palivový cyklus, zpracování použitého jaderného paliva. </p>

5. Transuranium Elements </p>

New discoveries in chemistry of Transuranium Elements, fuel cycles, reprocessing of spent nuclear fuel. </p>

Část II. Prof. Pinkas</p>

Part II. Prof. Pinkas</p>

6. Periodická tabulka </p>

Periodická tabulka prvků dle IUPAC, výstavbový princip, výměnná energie, Hundova pravidla, stínění, penetrace, valenční elektronové konfigurace, atomové vlastnosti, ionizační energie, elektronové afinity, atomové, kovové a iontové poloměry, oxidační stavy, elektronegativita - Pauling, Allred-Rochow, Mulliken, Allen, Sanderson, princip vyrovnání elektronegativity, Mulliken-Jaffe, vliv hybridizace na elektronegativitu, elektronegativita a chemické vlastnosti. Allotropy a polymorfní formy prvků: bor, fosfor a síra. Chemická syntéza allotropů síry. </p>

6. Periodic Table </p>

IUPAC Periodic Table of the Elements, Aufbau principle, exchange energies, Hund's rule, shielding, penetration, valence electron configurations, atomic properties, ionization energies, electron affinities, atomic, metallic, and ionic radii, oxidation state, electronegativity - Pauling, Allred-Rochow, Mulliken, Allen, Sanderson, electronegativity equalization principle, Mulliken-Jaffe, hybridization influence on electronegativity, electronegativity and chemical properties. Allotropes and polymorphic forms of elements: boron, phosphorus and sulfur. </p>

7. Chemická vazba I </p>

Křivka potenciální energie pro dvouatomovou molekulu, Morseho potenciál, energie nulového bodu, vazebné vzdálenosti, disociační energie vazeb, teplotní a isotopový efekt, Paulingova pravidla, suma vazebných valencí, iontovost/kovalentnost, van Arkelův-Ketelaarův trojúhelník, normální a dativní vazba. </p>

7. Chemical Bonding I </p>

Potential energy curve for a diatomic molecule, Morse potential, zero point energy, bond distances, bond dissociation energy, temperature and isotope effects, Pauling's rules, bond valence sum, bond ionicity/covalency, van Arkel-Ketelaar triangle, normal and dative bond. </p>

8. Chemická vazba II </p>

Badgerovo pravidlo, řád vazby, násobné vazby u těžších prvků, dvojná, trojná, čtverná, pětínásobná a šestínásobná vazba, násobné vazby v prvcích hlavních skupin a v přechodných kovech. </p>

8. Chemical Bonding II </p>

Badger's rule, bond order, multiple bonding in heavy elements, double, triple, quadruple, quintuple, sextuple bonds, multiple bonding in main group elements and transition metals. </p>

9. Chemická vazba III

Invertovaná vazba, interakce přes sigma- a pi-mezeru, isomery s různou délkou vazby, relativistické efekty, Au, Hg, Po, auriofilicita, isolobální vztah LAu^+ k H^+ , aurační reakce, pravá a nepravá H-vazba, dvouvodíková vazba.

9. Chemical Bonding III

Inverted bond, sigma- and pi-hole interactions, bond-stretch isomerism, relativistic effects, Au, Hg, Po, auriophilicity, isolobal relation of LAu^+ to H^+ , auration reactions, proper and improper H-bond, dihydrogen bond.

10. Chemie kyselin a bází

Super kyseliny, solvokyseliny, karboranové kyseliny, super báze – fosfatrány, protonové houby, frustrované Lewisovské páry, nízkokoordinované molekuly a kationty, silicium, nekoordinující anionty.

10. Acid-base Chemistry

Superacids, solvoacids, carborane acids, superbases – phosphatranes, proton sponges, frustrated Lewis pair, low-coordinate molecules and cations, silicium, non-coordinating anions.

11. Cykly a Polyedry I

Struktura a vlastnosti allotropů uhlíku, diamant, grafit a fullereny, vazba v molekulách fullerenů a jejich chemická reaktivita, endohedrání sloučeniny fullerenů, nanotrubičky, chemické vlastnosti grafitu, interkaláty grafitu, aromaticita, Wadeho pravidla, elektronově přesné klastry, klasifikace a názvosloví neutrálních boranů a hydridoborátových dianiontů, karborany a jiné heteroborany, halogenidy boru s uzavřeným deltaedrickým skeletem B_n , vazba v boranech, třístředové dvouelektronové vazby B-H-B a BBB, Lipscombova pravidla styx, teorie elektronových párů v polyedrických skeletech (PSEPT) a předpověď struktury boranového klastru, kloso-nido-arachno-hypho, AlN klastry, Smithova pravidla, BN, BP, AIP, GaP trimery, fosfazeny.

11. Rings and Polyhedra I

The structure and the properties of allotropic forms of carbon, diamond, graphite and fullerenes, bonding in fullerene molecules and their chemical reactivity, endohedral fullerenes, nanotubes, chemical properties of graphite, graphite intercalation compounds, aromaticity, Wades rules, electron precise clusters, classification and nomenclature of neutral boranes and hydroborate dianions, carboranes and other heteroboranes, boron halides with closed deltahedral B_n cores, bonding in boranes, the 3-centre-2-electron B-H-B and BBB interactions, Lipscomb's styx rules, Polyhedral Skeletal Electron Pair Theory (PSEPT) and prediction of a borane cluster structure, closo-nido-arachno-hypho, AlN-clusters, Smiths rule, BN, BP, AIP, GaP trimers, phosphazenes.

12. Cykly a Polyedry II

Organokovové klastry, kovové klastry, $Au_n(SR)_x$, magická čísla, nanočástice, Zintlovy fáze, PSEPT a struktura Zintlových iontů, hydráty methanu, molekulární led, POM, polyoxoanionty, Lindqvist, Anderson, Keggin, Wells–Dawson a Preyssler, klastry Ag_{490} , Mo_{368} , retikulární chemie, MOF, COF, zeolity, sodalitová jednotka.

12. Rings and Polyhedra II

Organometallic clusters, metal clusters, $Au_n(SR)_x$, magic numbers, nanoparticles, Zintl phases, PSEPT and structures of Zintl ions, methane hydrates, molecular ice, POM, polyoxoanions, Lindqvist, Anderson, Keggin, Wells–Dawson, and Preyssler, clusters Ag_{490} , Mo_{368} , reticular chemistry, MOF, COF, zeolites, sodalite unit. </p>

13. Magnetochemie </p>

Elektronový spin a úhlový moment, magnetický moment, magnetická susceptibilita, permeabilita, diamagnetismus a paramagnetismus, Curieho zákon, Curie-Weissův zákon, paramagnetismus v komplexech kovů, příspěvek orbitálního momentu hybnosti, spin-orbitální interakce, Landého vzorec, Van Vleckova rovnice, Brillouiniho funkce, kooperativní magnetismus, ferromagnetismus, antiferromagnetismus, ferrimagnetismus, Curieho a Neelova teplota, magnetická anisotropie, snadná osis, magnetické domény, hysterezní smyčka, jednomolekulové a jednoiontové magnety, anisotropické bariéra, superparamagnetismus v nanočásticích, blokovácí teplota. </p>

13. Magnetochemistry </p>

Electron spin and angular momenta, magnetic moment, magnetic susceptibility, permeability, diamagnetism and paramagnetism, Curie law, Curie-Weiss law, paramagnetism in metal complexes, orbital angular momentum contribution, spin-orbit coupling, Landé formula, Van Vleck equation, Brillouin function, cooperative magnetism, ferromagnetism, antiferromagnetism, ferrimagnetism, Curie and Neel temperatures, magnetic anisotropy, easy axis, magnetic domains, hysteresis loop, single molecule magnets, anisotropy barrier, superparamagnetism in nanoparticles, blocking temperature. </p>

14. Moessbauerovská spektroskopie </p>

Bezodrazová jaderná rezonanční absorpce, experimentální uspořádání, hyperjemná interakce, isomerní posuv, Dopplerův posuv druhého řádu, elektrická kvadrupolová interakce, gradient elektrického pole, kvadrupolové štěpení, magnetická dipolová interakce, ^{119}Sn a ^{57}Fe Moessbauerovská spektroskopie. </p>

14. Moessbauer spectroscopy </p>

Recoilless nuclear resonance absorption, experimental setup, hyperfine interactions, isomer shift, second-order Doppler shift, electric quadrupole interaction, electric field gradient, quadrupole splitting, magnetic dipole interaction, ^{119}Sn and ^{57}Fe Moessbauer spectroscopy. </p>