

Obecná chemie C1020

Jiří Pinkas

Katedra anorganické chemie

budova č. 8, 2. patro, dveře 313

Tel. 549496493

jpinkas@chemi.muni.cz

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

Hála. *Pomůcka ke studiu obecné chemie.*
Brno : Masarykova univerzita, 1993.

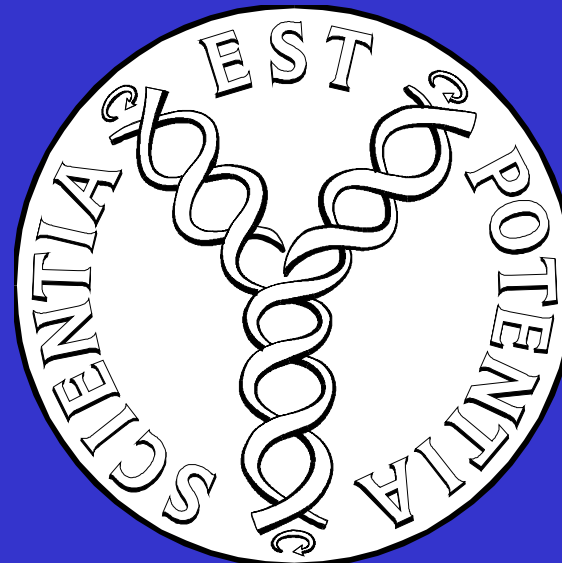
Růžička - Toužín. *Problémy a příklady z obecné chemie.*
Názvosloví anorganických sloučenin
Brno : Masarykova univerzita, 2000.

Věda a vědecká metoda

Věda – Kvantitativní studium přírody a přírodních zákonů.
Proces, při kterém se získávají nové poznatky.
Empirické postupy řešení problému.
Zabývá se pouze racionálními výroky, které lze potvrdit
nebo vyvrátit pozorováním nebo experimenty.



Francis Bacon
(1561-1626)



Věda a výzkum

Výzkum základní – dlouhodobý, cílem nejsou aplikace

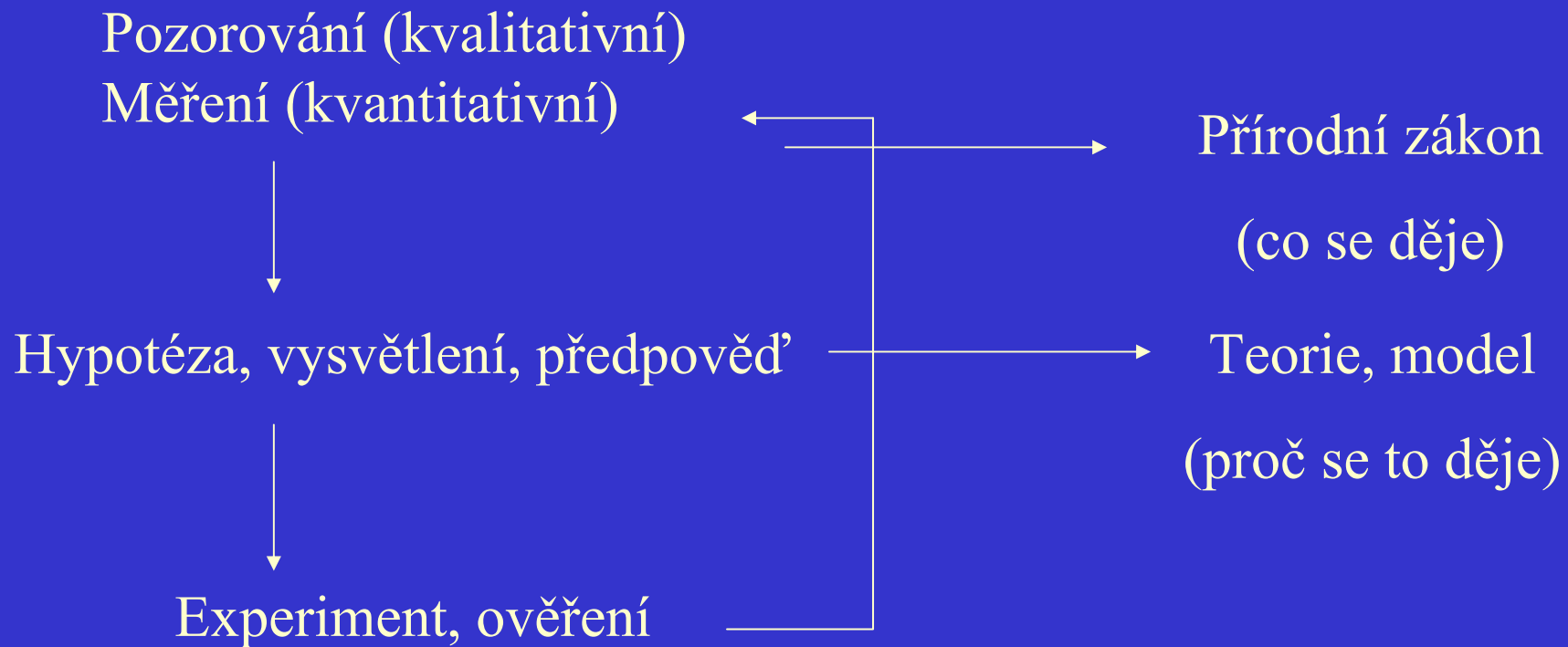
Aplikovaný výzkum – krátkodobý, praktické aplikace

Technologie – aplikace znalostí k přeměně okolí

Věda

- Soubor znalostí, vědomostí a zobecnění, které jsou považovány za pravdivé
- Vědecká metoda, jíž jsou tyto znalosti získávány, pozorování, pokus, dedukce
- Vědecký jazyk, přesně definované pojmy

Věda a vědecká metoda



Správně navržený pokus (např. měřit jednu proměnnou, ostatní konstatní) 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 testované vyplněnou předpovědí:

Tháles Milétský

Vysvětlil zatmění Slunce – měsíc v novu přejde přes sluneční kotouč

Předpověď dalšího zatmění Slunce



Johann Joachim Becher
(1635 - 1682)



Georg Ernst Stahl
(1660 - 1734)

Pozorování a vysvětlení

Vysvětlení přírodního jevu:

Hoření organických látek = uvolnění flogistonu, produkty hoření (popel) mají nižší hmotnost.

Při oxidaci kovů je hmotnost produktů vyšší = flogiston má někdy negativní hmotnost.

Vyvrácením flogistonové teorie se vytvářela moderní chemie.

Antoine Laurent Lavoisier (1743-1794)

hoření = slučování s O_2 , zákon zachování hmoty
(flogiston = $-O_2$)

Přírodní zákony a teorie

Přírodní zákon

– tvrzení, které sumarizuje opakovaná pozorování přírodních jevů, mění se jen zřídka

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

Schopnost předpovědi

Věda a vědecká metoda

Teorie, model

Předpověď

Experiment, ověření

Modifikace teorie



Vědecký jazyk



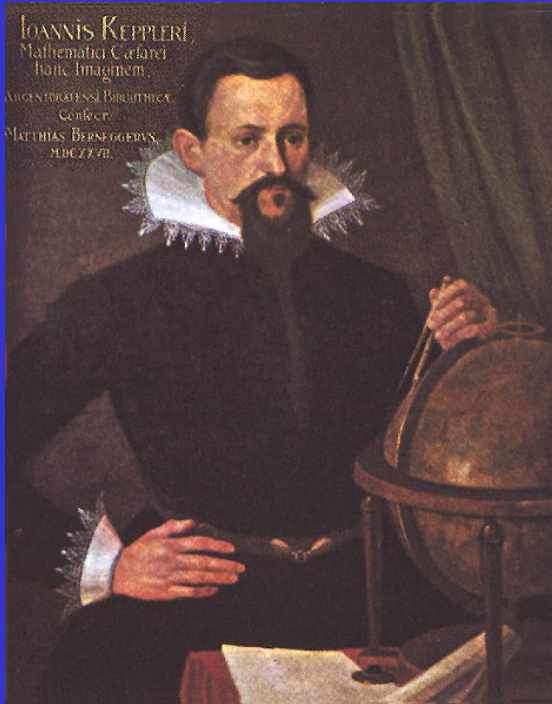
Joachim Jungius (1587 - 1657)

Potřeba přesné definice pojmů

Zakladatel vědeckého jazyka

Základem vědy je experiment a závěry z něho vyvozené.

Teorie, experiment

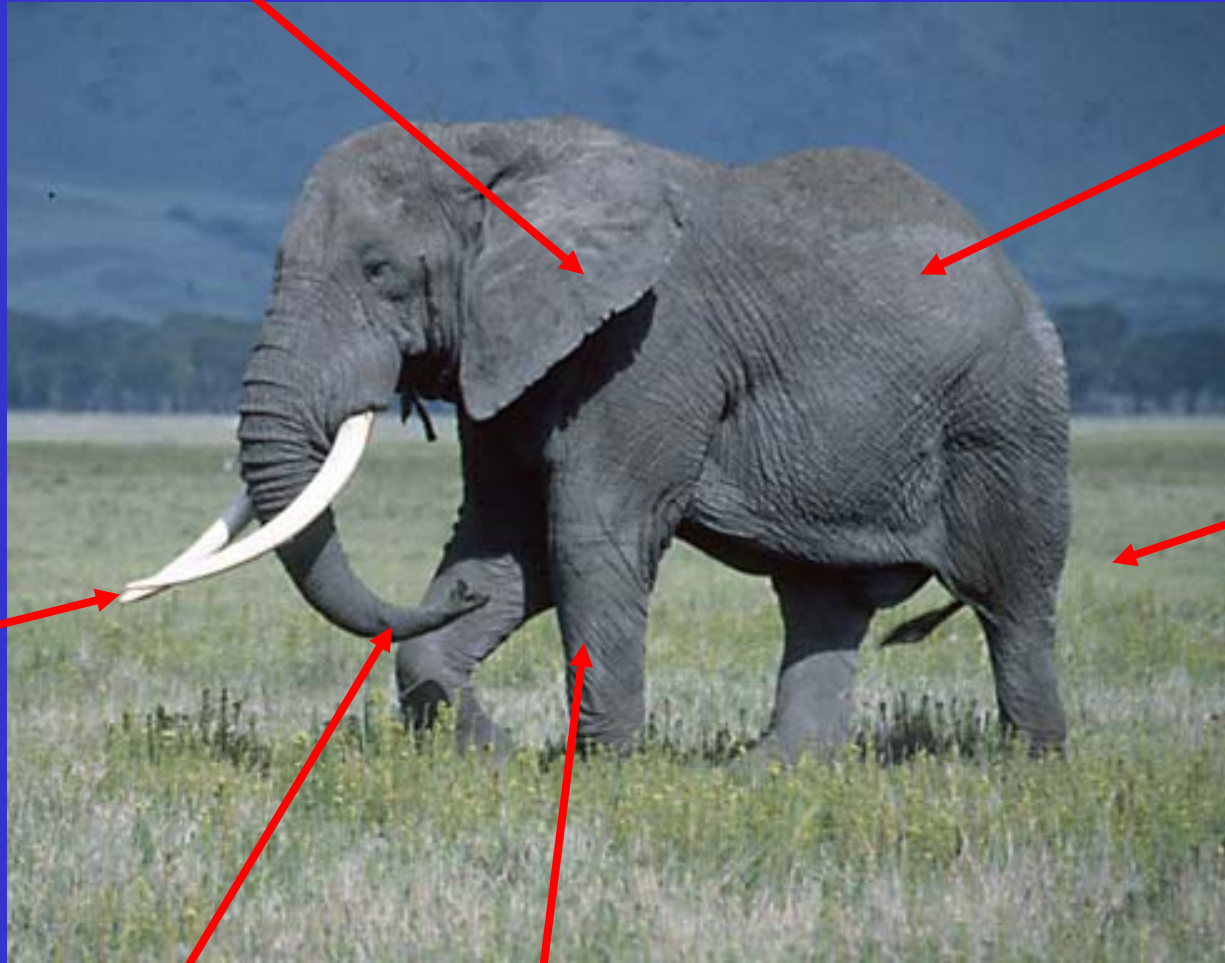


Ubi materia, ibi geometria

Johanes Kepler
(1571 - 1630)

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

Experiment

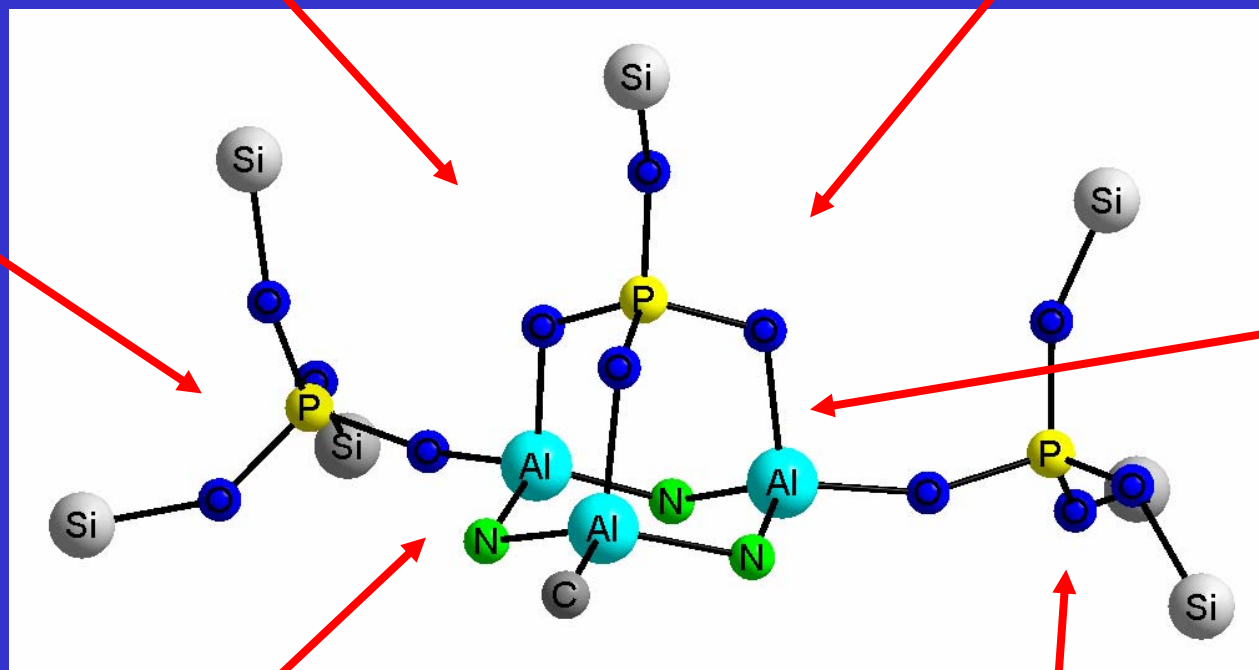


Elementární analýza

Experiment

RTG strukturní analýza

NMR

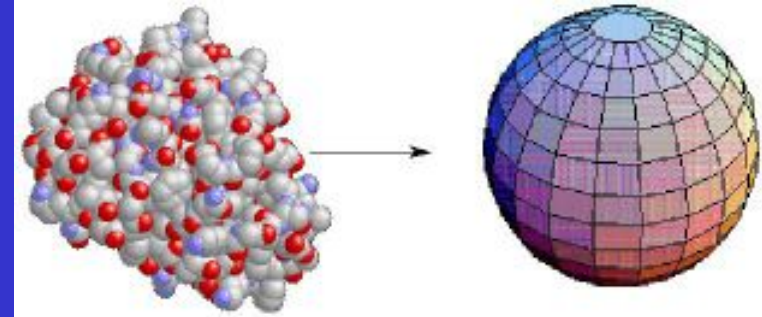


UV-vis

Hmotnostní spektrometrie, MS

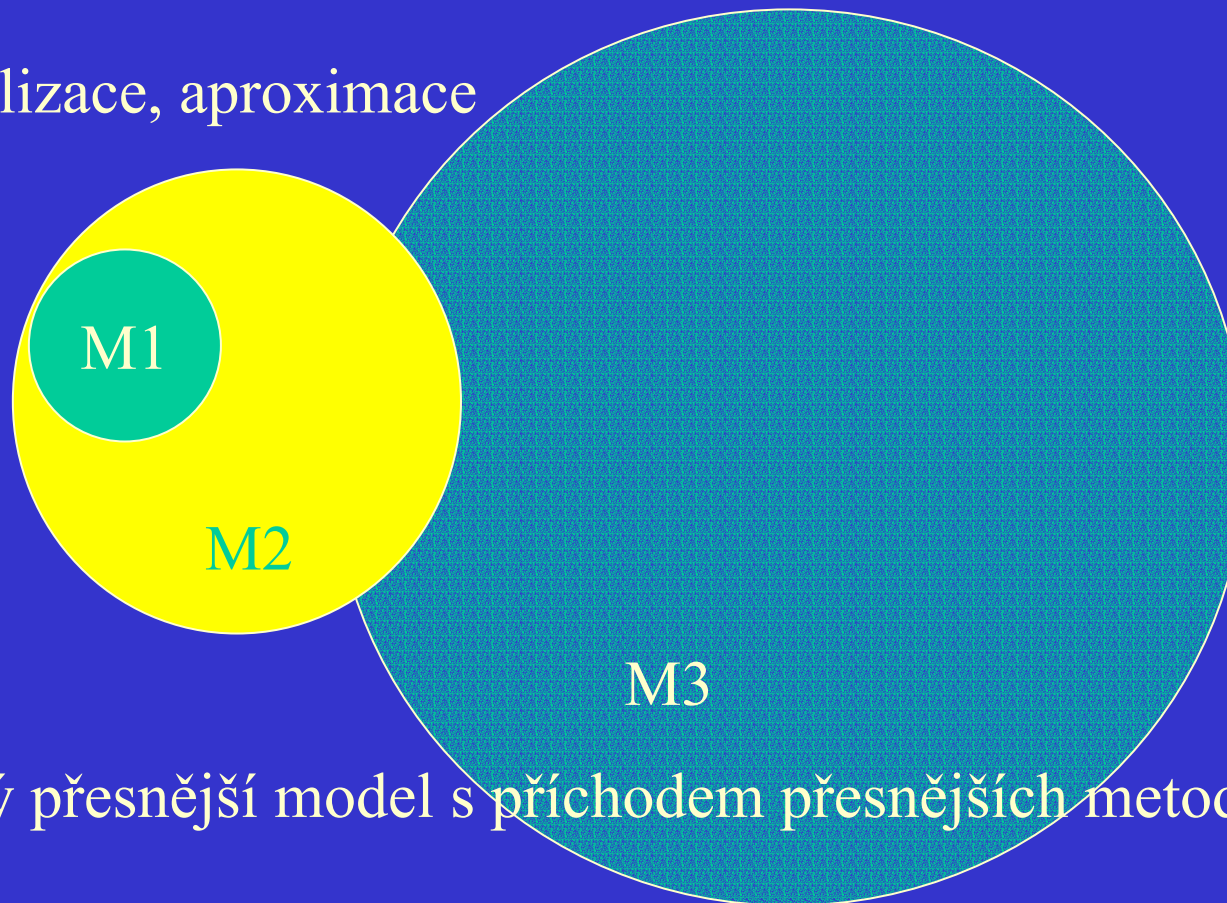
Vibrační spektroskopie, IR, R_A₁₄

Model



Zjednodušený obraz skutečnosti, usnadní vysvětlení problému

Idealizace, aproximace



Nový přesnější model s příchodem přesnějších metod měření

Model

Model je pokus vysvětlit přírodní jevy na mikroskopické úrovni pomocí pozorování a zkušeností na makroskopické úrovni.

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

Modely se stávají komplikovanějšími a podrobnějšími s vývojem našeho poznání.

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

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.

Kvantitativní experiment

Johann Baptista van Helmont
(1579 - 1644)

Robert Boyle
(1627 - 1691)

Joseph Black
(1728 - 1799)

Henry Cavendish
(1731 - 1810)

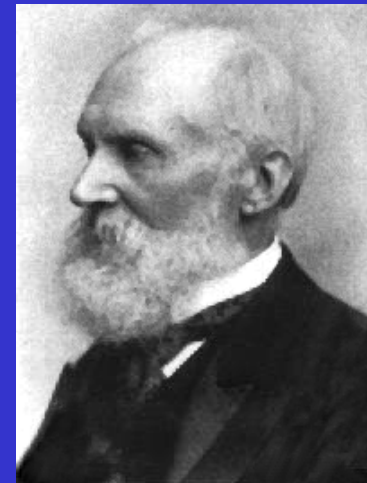
Objemy plynů

Hmotnost reaktantů a produktů

Kvantitativní experiment

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)

Veličiny, Rozměry, Jednotky

Příklad:

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

Veličina: E, energie

Rozměr: $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2}$

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

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

Složené rozměry: rychlost = délka \times (čas)⁻¹

Bezrozměrné veličiny:

Poměry dvou stejných veličin (např. molární zlomek)

Argumenty ln, exp, sin, cos, tan

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

Násobky – předpony

Exa	10^{18}
Peta	10^{15}
Tera	10^{12}
Giga	10^9
Mega	10^6
kilo	10^3
1	10^0
mili	10^{-3}
mikro	10^{-6}
nano	10^{-9}
piko	10^{-12}
femto	10^{-15}
atto	10^{-18}
zepto	10^{-21}

$$\% = 1 \text{ v } 10^2$$

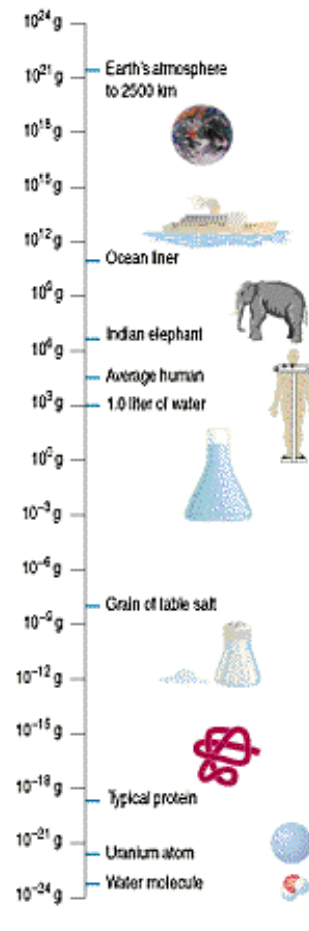
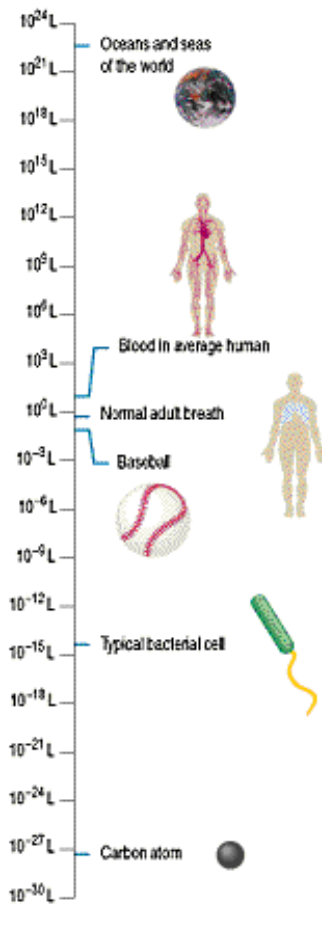
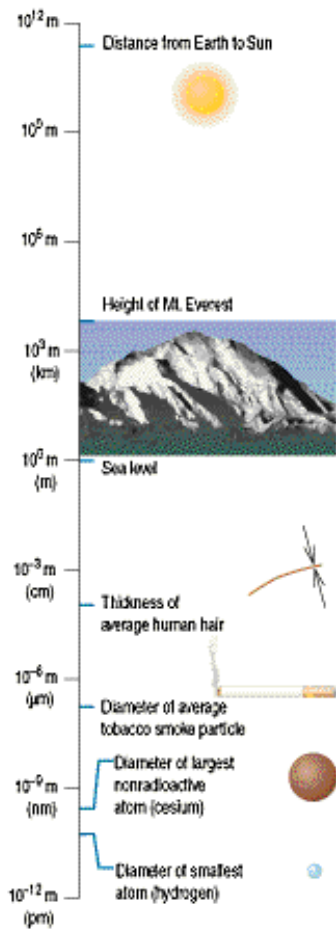
$$\text{‰} = 1 \text{ v } 10^3$$

$$\text{ppm} = 1 \text{ g v } 1 \text{ t nebo } 1 \text{ atom v } 10^6 \text{ atomech}$$

$$\text{ppb} = 1 \text{ mg v } 1 \text{ t nebo } 1 \text{ atom v } 10^9 \text{ atomech}$$

$$\text{ppt} = 1 \text{ } \mu\text{g v } 1 \text{ t nebo } 1 \text{ atom v } 10^{12} \text{ atomech}$$

Délka, objem, hmotnost



Hmotnost

Atomová hmotnostní jednotka

1/12 hmotnosti atomu nuklidu ^{12}C

1 amu = 1 u = $1.6606 \cdot 10^{-27}$ kg



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

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

Rychlost tělesa v

Klidová hmotnost tělesa m_0

Rychlost světla $c = 2.9979 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$

Látkové množství, mol

Avogadrova konstanta = počet atomů uhlíku
v 0.012 kg (12 g) nuklidu ^{12}C

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Látkové množství, jednotka mol
 n = podíl počtu částic (atomů, molekul,
elektronů,...) a N_A

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

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

Atomová a molární hmotnost

Atomová A_m a molární hmotnost M_m

Hmotnost 1 molu látky [kg mol^{-1}]

$$A_m(^{12}\text{C}) = 12 \text{ u } N_A = 12 \times 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \times 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} =$$

$$0.012 \text{ kg mol}^{-1} = 12 \text{ g mol}^{-1}$$

Délka

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ \AA} = 100 \text{ pm}$$

Bohrův poloměr

$$a_0 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0.53 \text{ \AA}$$

Vazby v molekulách 1 až 4 Å,
průměr atomu Cu 2.55 Å

Průměr vesmíru: 17 miliard světelných let = $1.6 \cdot 10^{26} \text{ m}$

Průměr atomového jádra = 10^{-15} m



Anders Jonas Ångström
(1814 - 1874)

Atomové poloměry (pm)

H	He						
37	32						
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
152	113	88	77	70	66	64	69
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
186	160	143	117	110	104	99	97
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
227	197	122	122	121	117	114	110
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
247	215	163	140	141	143	133	130
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
265	217	170	175	155	167	140	145

1 Å = 100 pm

Vazebné vzdálenosti

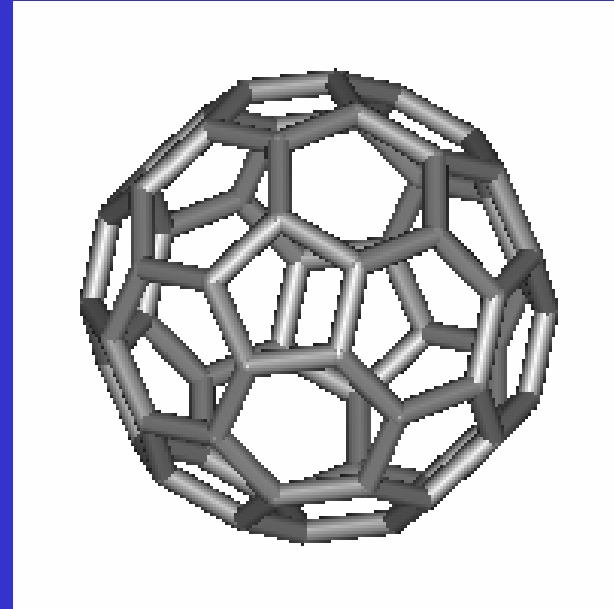
Vazebné vzdálenosti (v Å)

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				

Objem

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

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



Molární objem ideálního plynu = objem 1 molu plynu při teplotě $0 \text{ }^\circ\text{C}$ a tlaku 101325 Pa

$$V_M = 22.414 \text{ l mol}^{-1}$$

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

[g cm⁻³]

Hustota závisí
na teplotě a tlaku

Hustota

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

Rychlost

Rychlost světla ve vakuu

$$c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

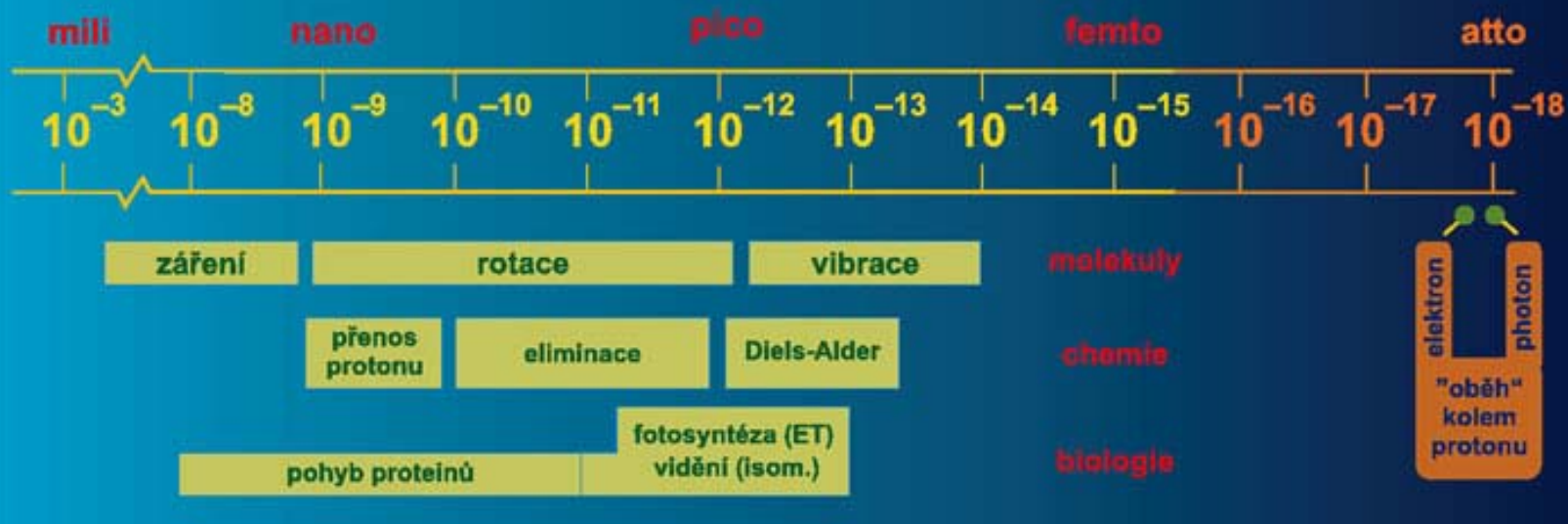
$$= 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$= 300\,000 \text{ km s}^{-1}$$

Čas

Doba, s	Událost
10^{-15}	Excitace elektronu fotonem, fs
10^{-12}	Radikálové reakce, přenos energie, valenční vibrace
10^{-9}	Fluorescence, rotace, přenos protonu
10^{-6}	Fosforescence
10^{-3}	Rychlé bimolekulární reakce
10^0	Úder srdce, pomalé bimolekulární reakce

Časové škály (v sekundách)



Frekvence, vlnová délka, vlnočet

Počet periodických dějů za časový interval

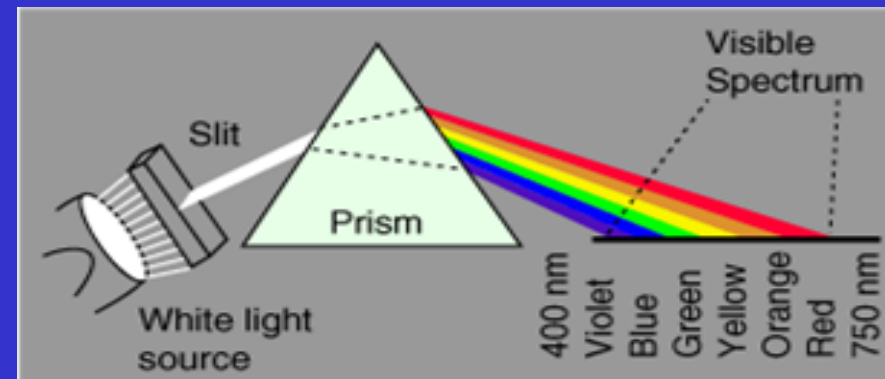
Frekvence $\nu = 1/t$ [Hz = s⁻¹]

Kmity

Vibrace

Rotace

Srážky molekul



Vzdálenost mezi dvěma maximy

Vlnová délka λ [m]

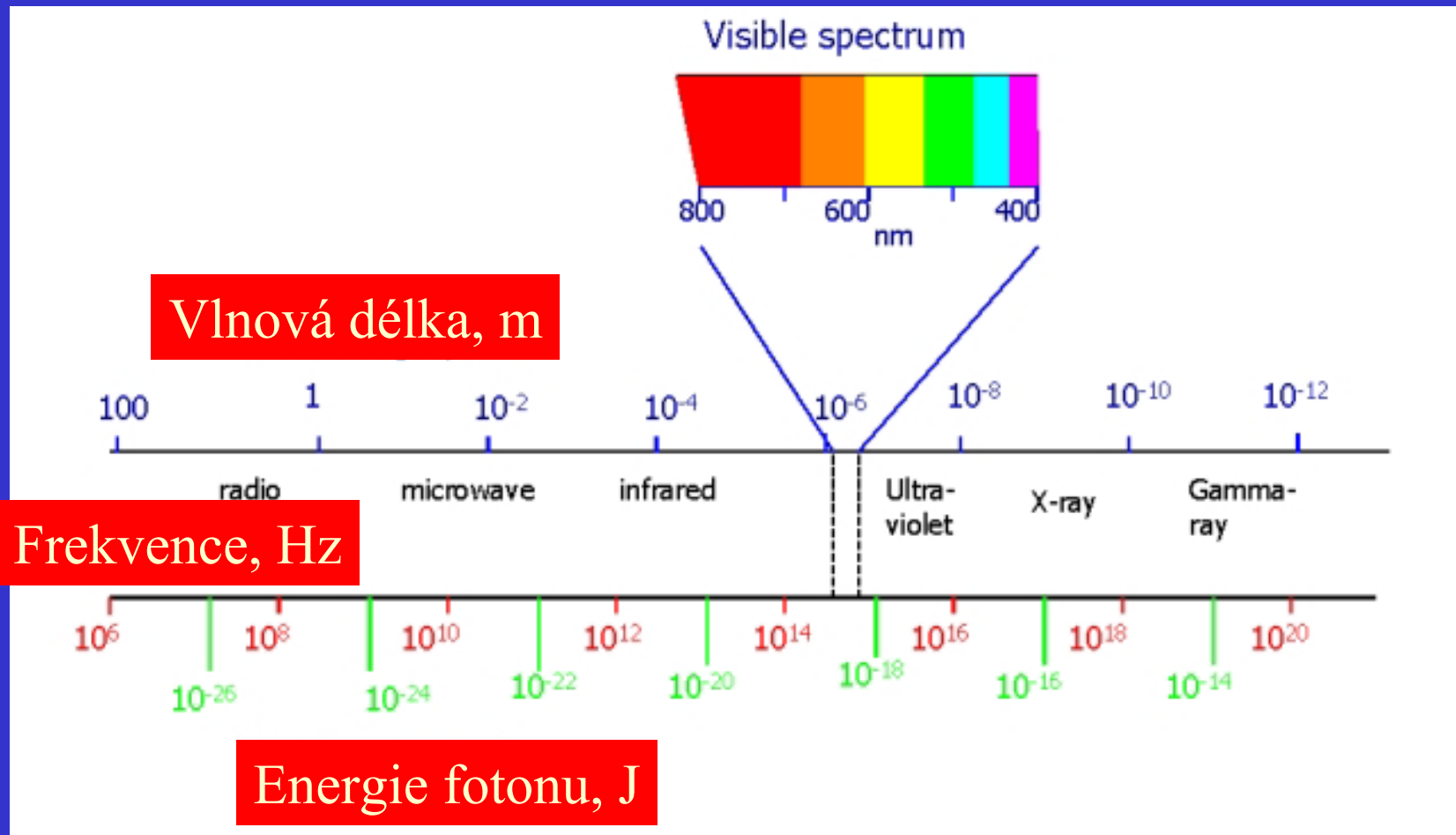
$$\nu \lambda = c$$

$$c = 2.998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

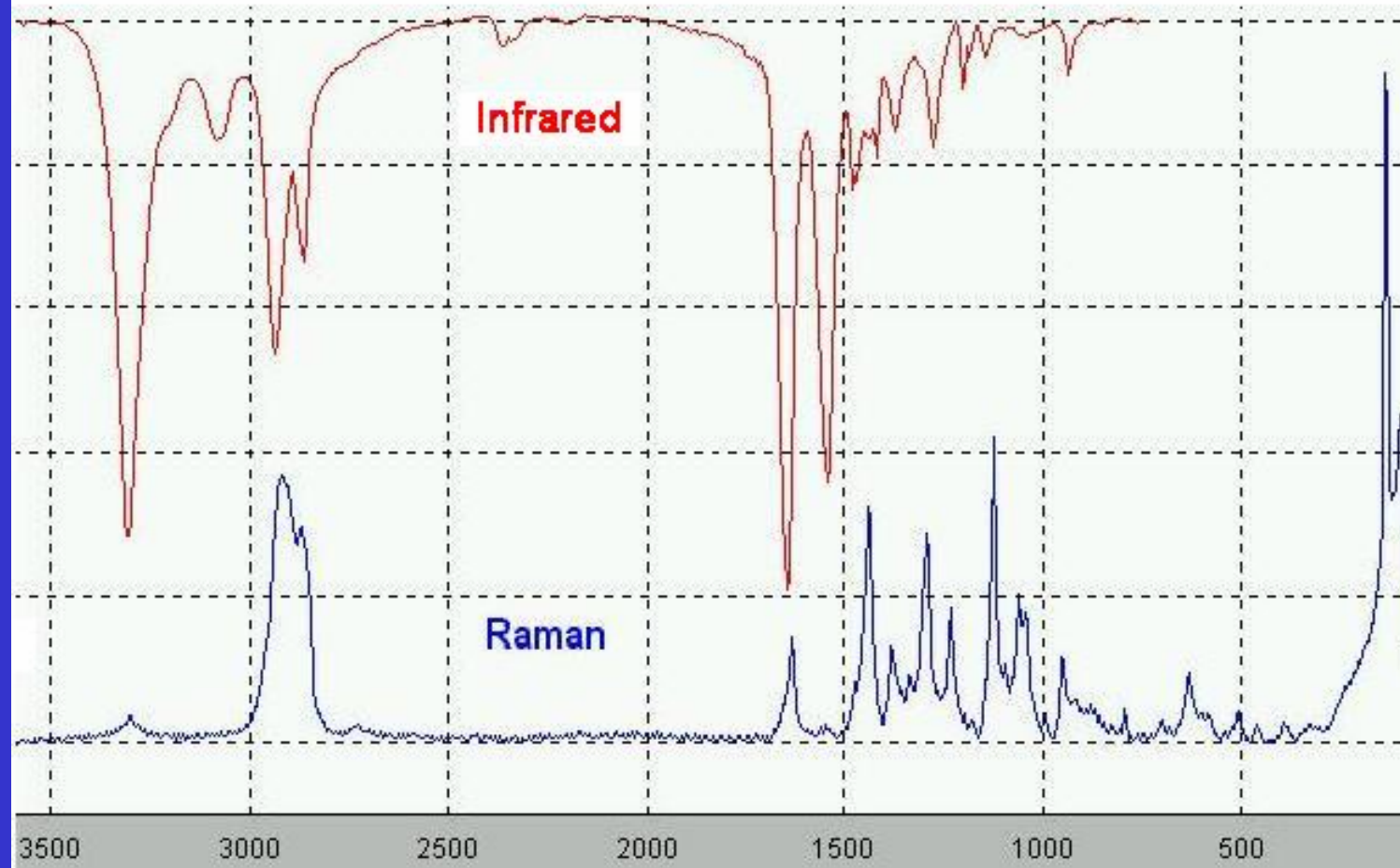
Počet vln na jednotku délky

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

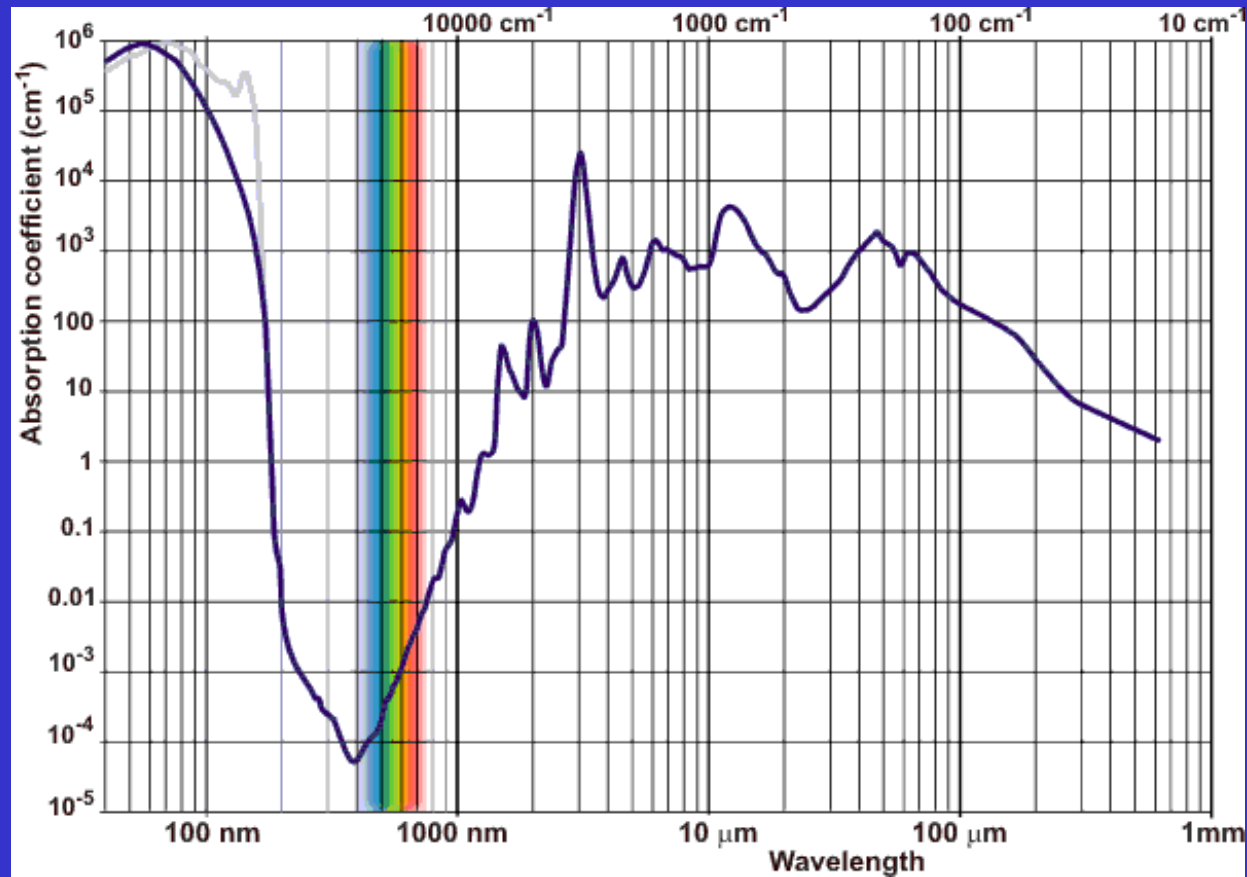
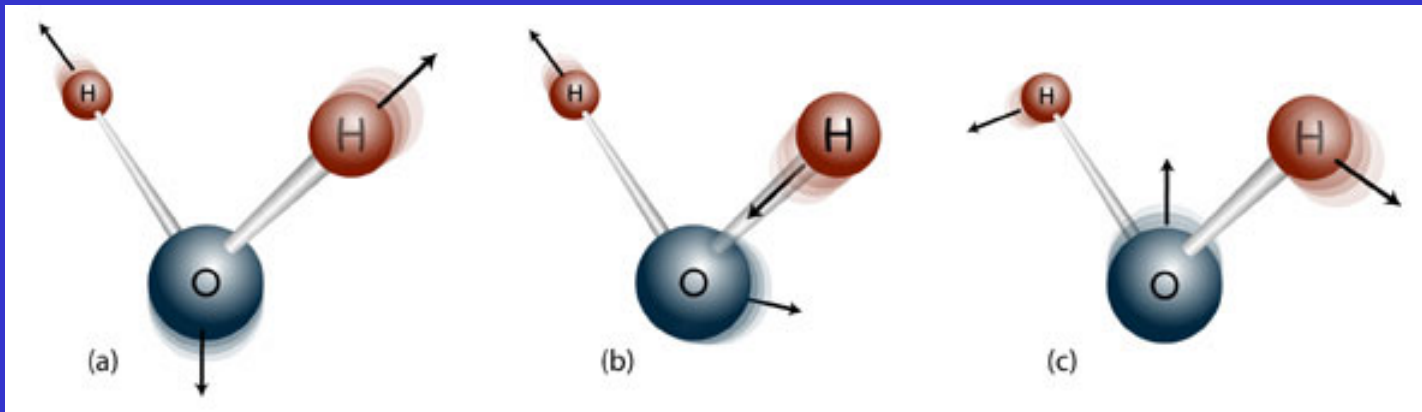
Frekvence, vlnová délka, vlnočet



Infrared and Raman Spectra of Polyamide (Nylon 66)



$$\tilde{\nu} = 1/2\pi (k/m)^{1/2}$$



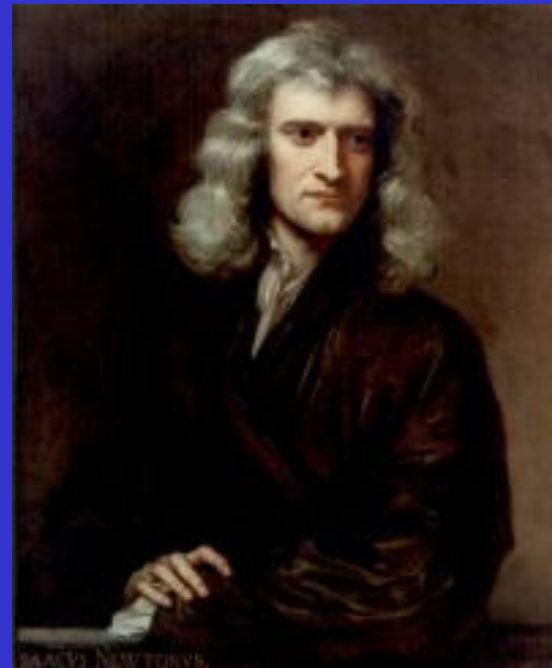
Síla

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 (e-e repulze, p-e přitažlivost)

Silné interakce (jaderné, drží protony pohromadě)

Slabé interakce (drží p a e pohromadě v neutronu)

Tlak

1 Pascal = tlak kterým působí jablko na 1 m²

1 Pa = 1 N m⁻²

1 atm = 101 325 Pa = 760 mm Hg (Torr) = 1.01325 bar

1 bar = 10⁵ Pa

Standardní tlak = 1 bar

Teplota

Kelvin, K

Absolutní nula 0 K je nedosažitelná

Současný rekord: $\sim 10^{-9}$ K

Celsius, °C

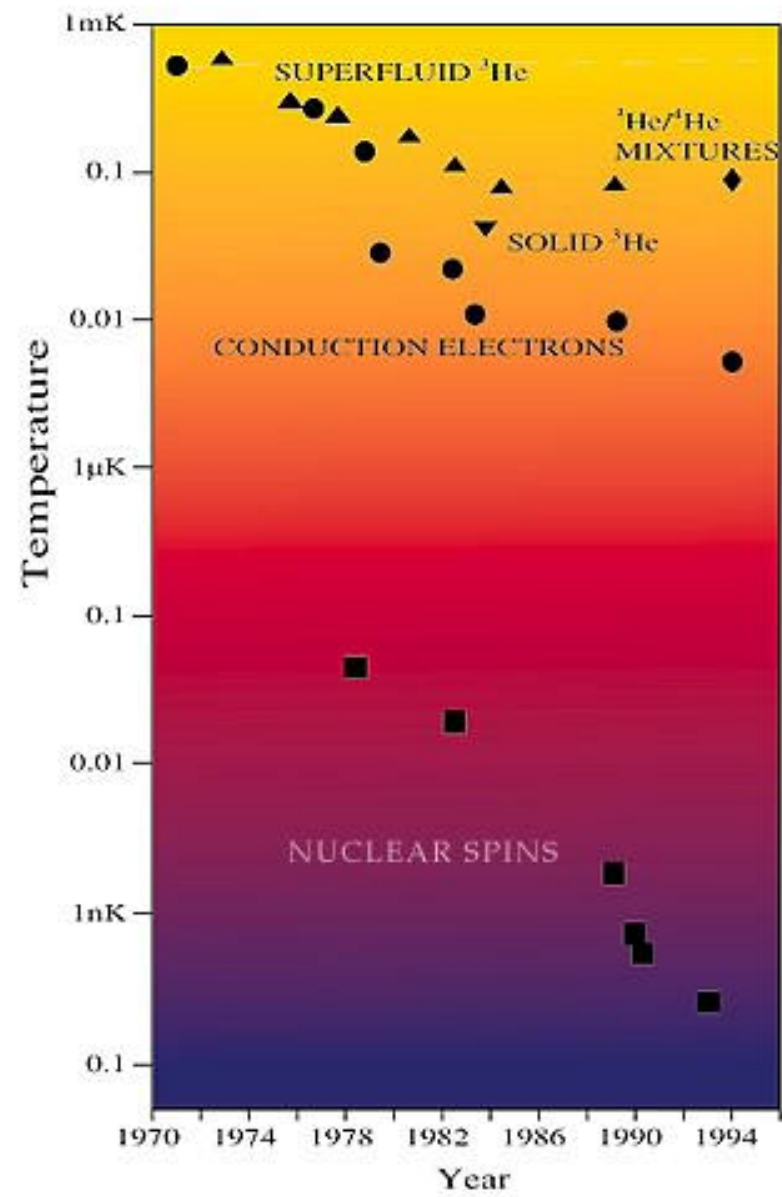
$0\text{ °C} = 273.15\text{ K}$

$T[\text{°C}] = T[\text{K}] - 273.15$

Standardní teplota $25\text{ °C} = 298\text{ K}$



Lord Kelvin
(William Thomson)
(1824 - 1907)



Teploměr

Fyzikální vlastnost závislá na teplotě:

Objemová roztažnost rtuti

Délková roztažnost kovů

Stav kapalných krystalů

Definice Celsiovy stupnice

Teplota tání ledu při 1 atm = 0 °C

Teplota varu vody při 1 atm = 100 °C

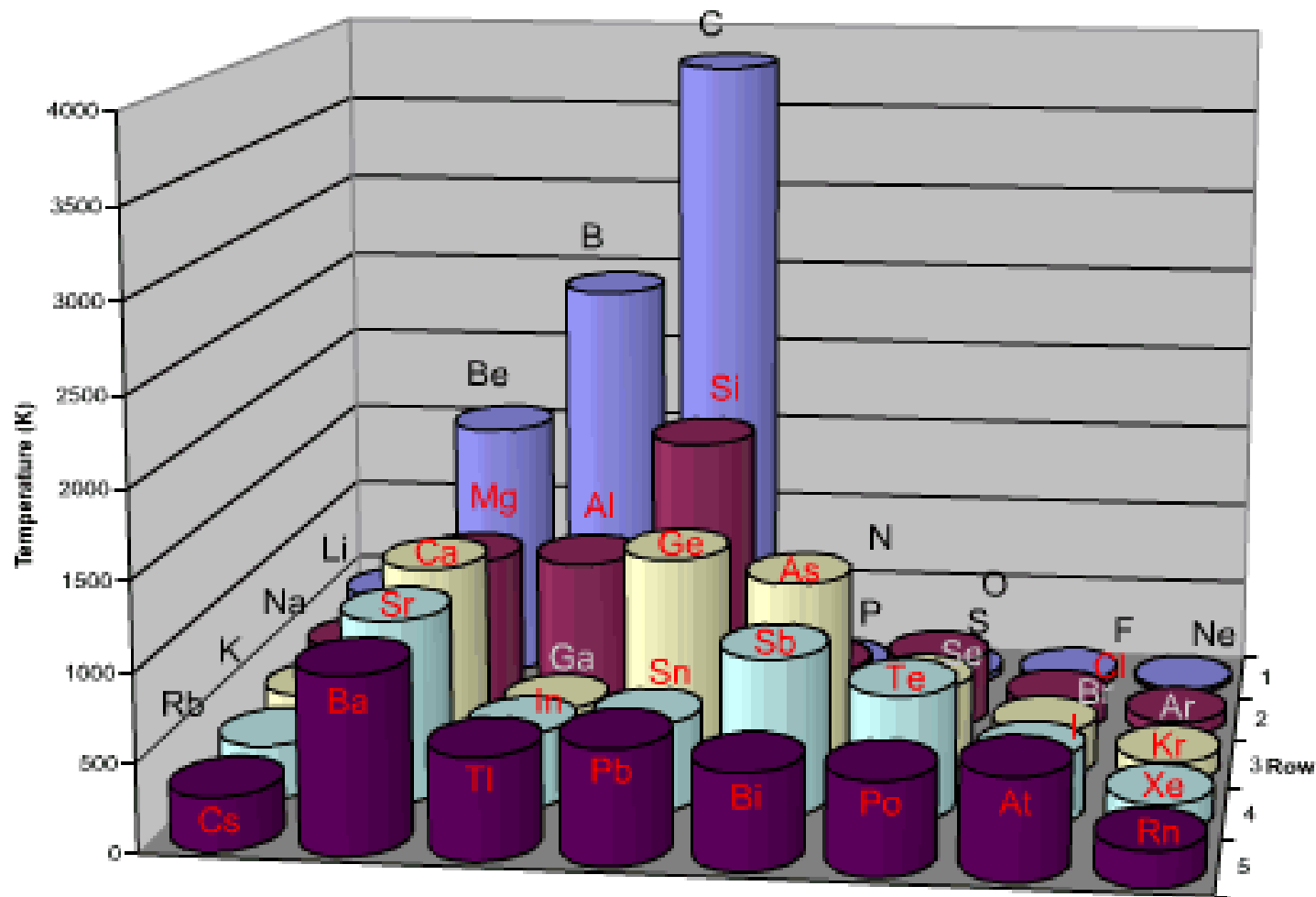
Rozděl na 100 dílků

ITS-90

Trojný bod vody = 273.16 K

Teplota tání

MELTING POINTS OF THE REPRESENTATIVE ELEMENTS



Energie

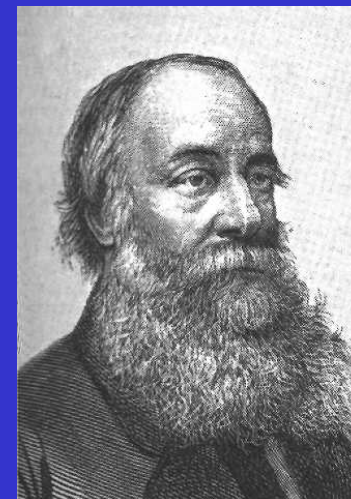
1 Joule = energie úderu lidského srdce

1 cal = 4.184 J

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

$$E = e U = 1.60210 \cdot 10^{-19} \text{ C } 1\text{V} = \\ 1.60210 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 1 \text{ eV}$$

$$1 \text{ eV (molekula)}^{-1} = 96.485 \text{ kJ mol}^{-1}$$



James Prescott Joule
(1818 - 1889)

Energie

$$E = m c^2 = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg } (3.00 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1})^2 = 1.49 \cdot 10^{-10} \text{ J}$$

$$1 \text{ amu} = 931.4 \text{ MeV}$$

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

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

$$k = 1.380662 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad \text{Boltzmannova konstanta}$$

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

$$E = h \nu$$

$$h = 6.626176 \cdot 10^{-34} \text{ J s} \quad \text{Planckova konstanta}$$

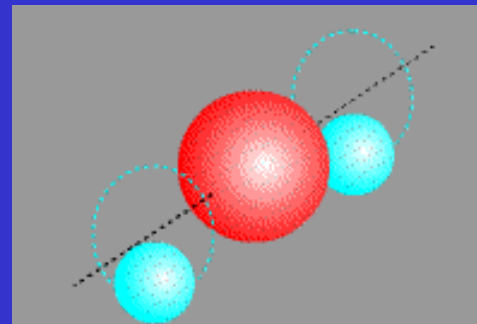
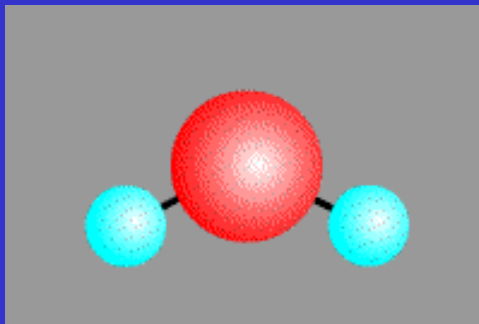
Energie

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

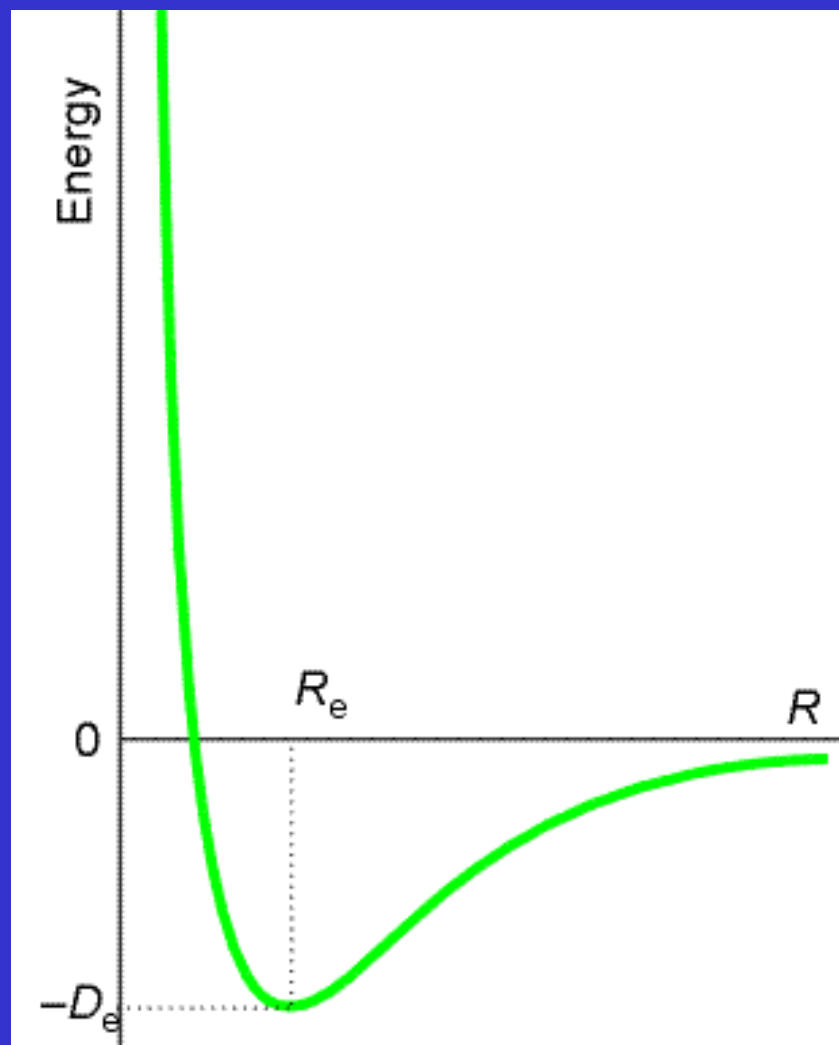
$E(\text{elektronová})$ 100 kJ mol^{-1}

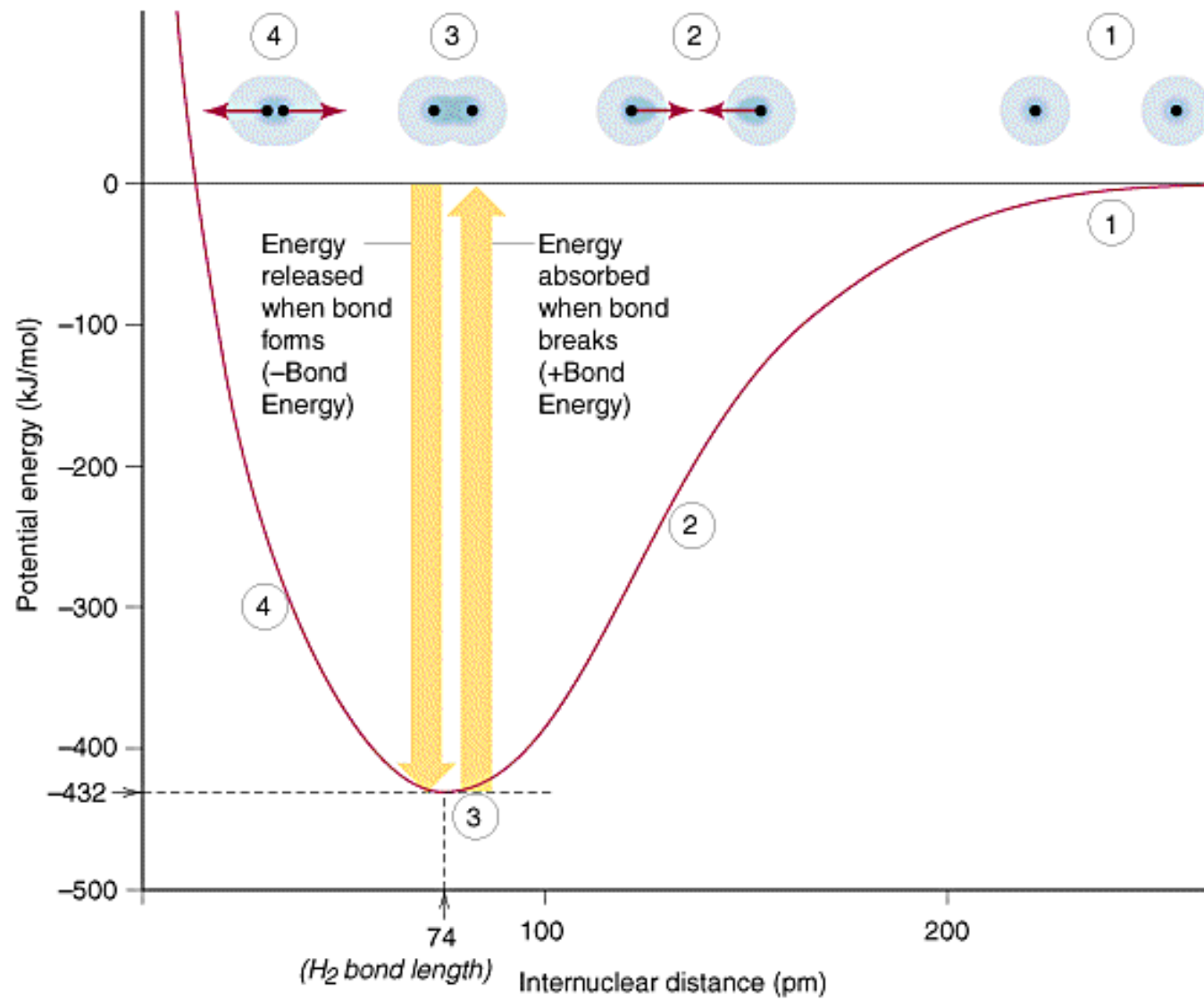
$E(\text{vibrační})$ $1.5 - 50 \text{ kJ mol}^{-1}$

$E(\text{rotační})$ $0.1 - 1.5 \text{ kJ mol}^{-1}$



Vazebná energie





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

Elektrický náboj

Elementární náboj

$$e = 1.602 \cdot 10^{-19} \text{ C} \quad [1 \text{ C} = 1 \text{ A s}]$$

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 Augustin Coulomb
(1736 - 1806)

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

Měření, platné číslice

Měření = určení velikosti veličiny v daných jednotkách

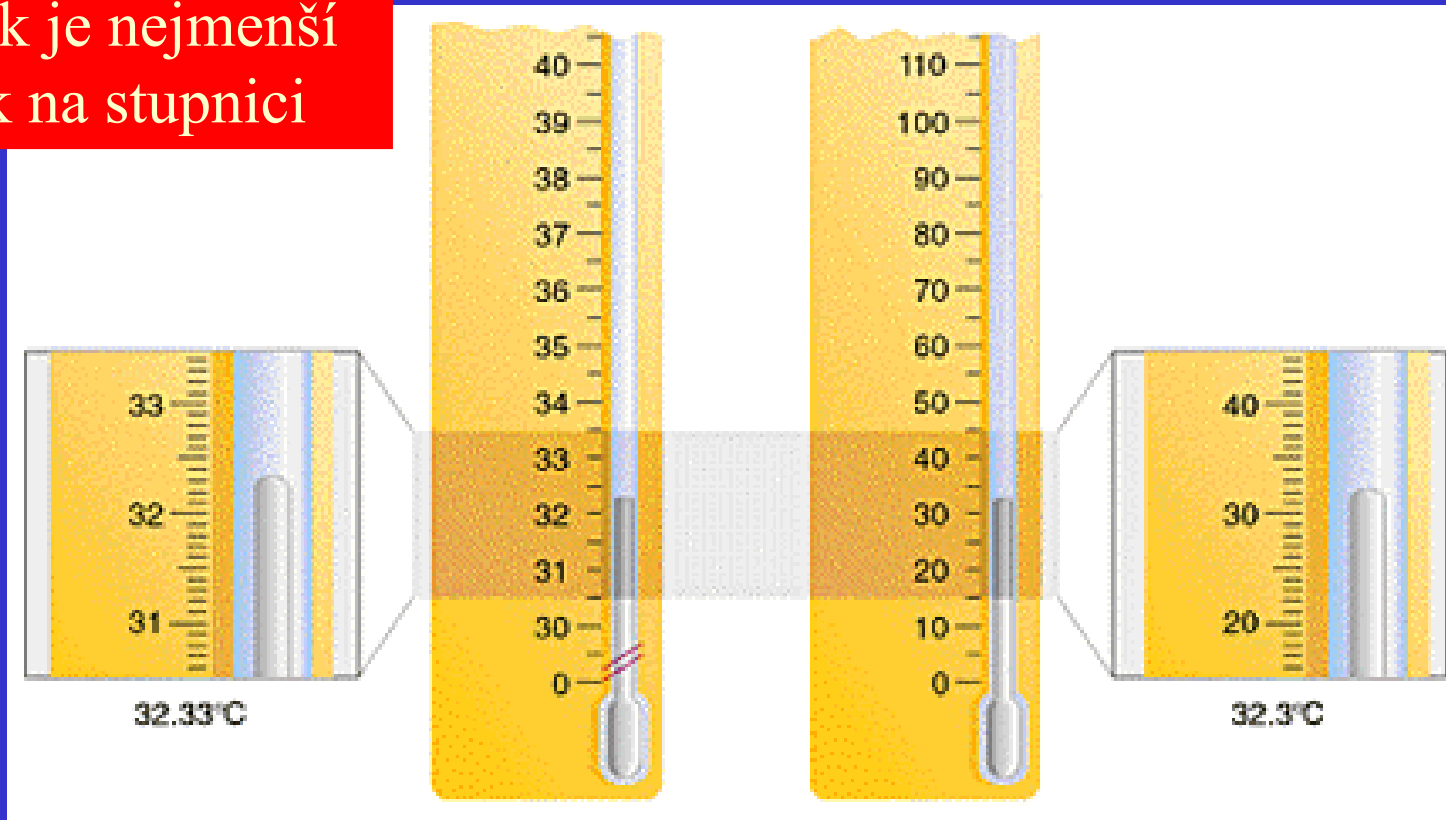
Měření = odečtení hodnot na stupnici + odhad posledního místa výsledku na desetinu nejmenšího dílku stupnice

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

Chybu měření předpokládáme minimálně ± 1 posledního místa

Měření

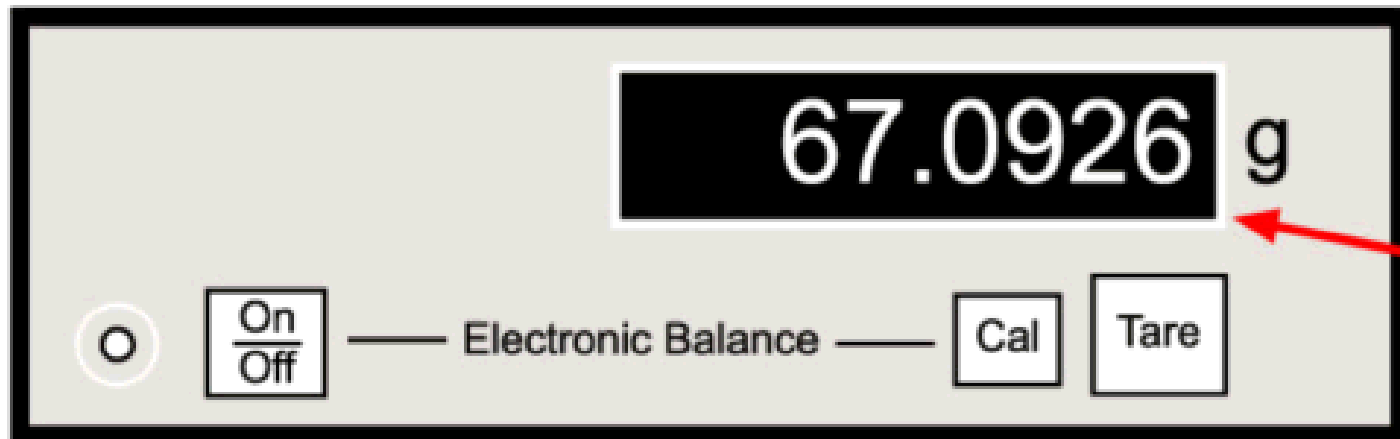
Kolik je nejmenší
dílek na stupnici



32.33

32.3

Odečtení z digitální stupnice



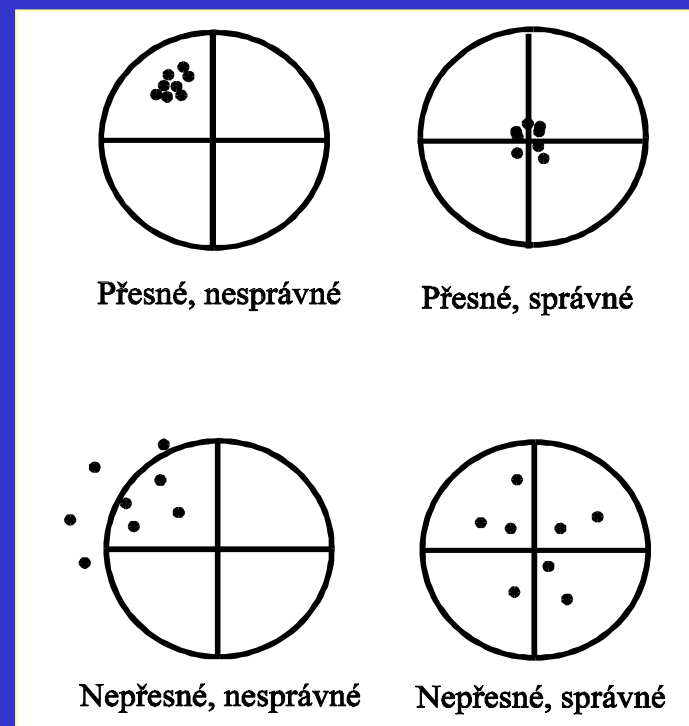
Přesnost a správnost měření

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 = rozdíl mezi výsledky měření a skutečnou hodnotou, závisí na kvalitě měřicího přístroje



Platné číslice

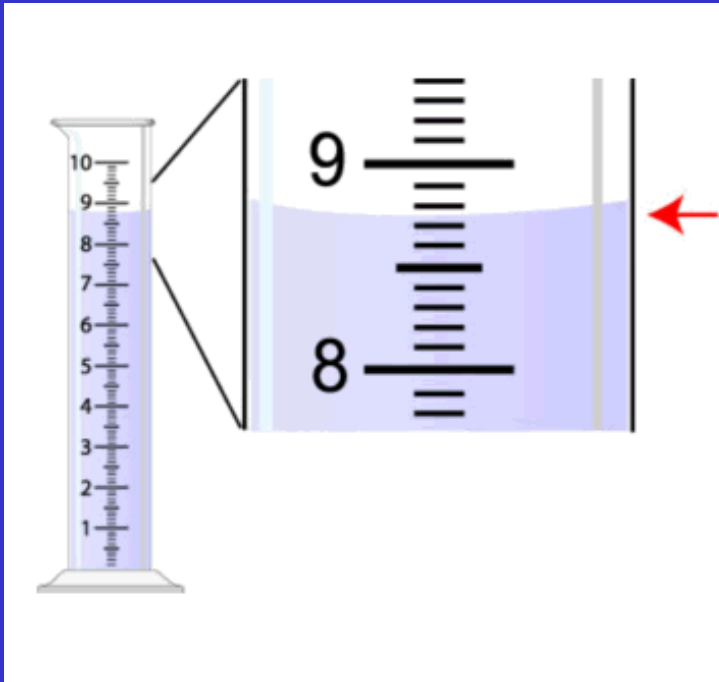
Nuly mezi desetinnou čárkou a první nenulovou číslicí *nejsou* platné číslice 0.00**34**

Nuly za nenulovými číslicemi ve výsledku vyjádřeném desetinným číslem *jsou* platnými číslicemi 0.00**3400**

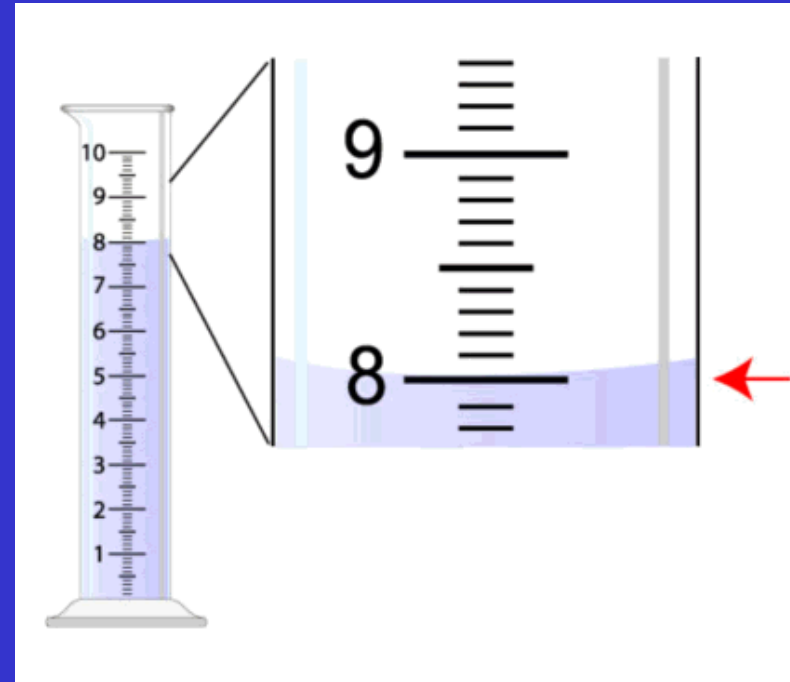
Nuly na konci výsledku, který neobsahuje desetinnou čárku, **MOHOU**, ale **NEMUSÍ** být platnými číslicemi, záleží na přesnosti měření 1200

Proto pro jednoznačnost se používá **EXPONENCIÁLNÍ** zápis: jedno místo před desetinnou čárkou, desetinná místa odpovídající přesnosti měření, exponent, jednotka: $1.2 \cdot 10^3$

Platné číslice



8.75 cm³



8.00 cm³

NE 8 cm³ !!!!

Platné číslice

Exaktní čísla = nekonečný počet platných míst (nuly), nemají chybu měření

- 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 cólštoku a 1.2 μm pomocí mikrometru

sečteme	2.5 cm	s chybou ± 0.1 cm
	+0.00012 cm	s chybou ± 0.00001 cm
výsledek není	2.50012 cm	
ale	2.5 cm	

protože chyba prvního měření převyšuje řádově hodnotu druhého měření

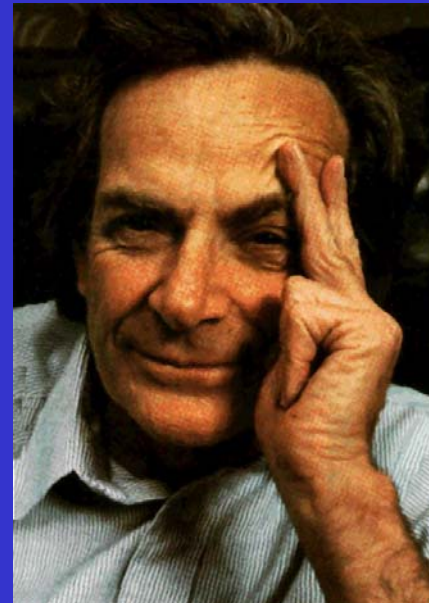
Pokud je jeden ze sčítanců celé číslo, výsledek nemá žádné desetinné místo, vyjma případu, kdy sčítanec je celé exaktní číslo

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



Rozdělení hmoty



Fyzikální stav

Plyny

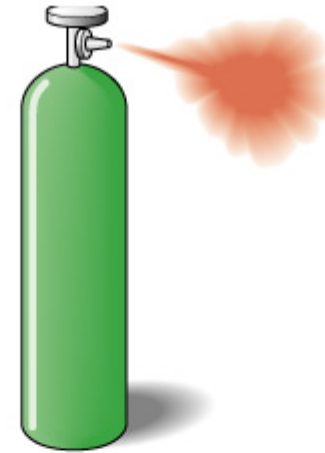
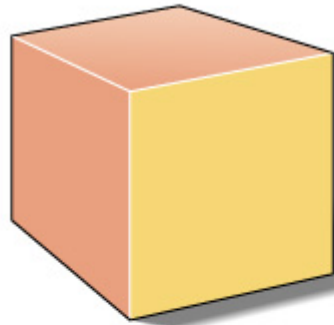
Kapaliny

Pevné látky

H																	He
Li	Be	298 K (25°C)										B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	gas liquid solid										Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Iuu	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No



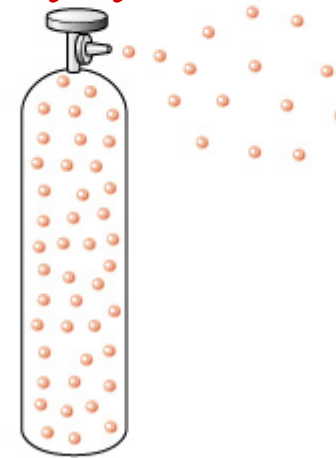
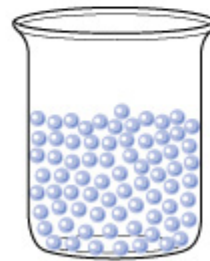
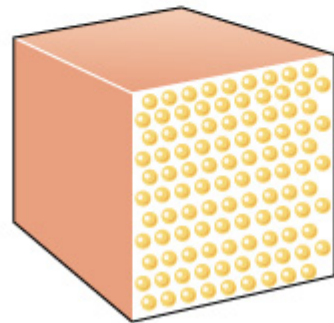


(a)

Pevné látky

Kapaliny

Plyny



Solid

Liquid

Gas

(b)

Zákon zachování hmoty

Lavoisierův zákon 1785

Hmota se netvoří ani nemůže být zničena

Při chemických reakcích zůstává hmotnost všech zúčastněných sloučenin konstantní.

Výsledek přesného měření:
vážení reaktantů a produktů

SMOKE



Zákon zachování hmotnosti a energie

Hmotnost je mírou gravitačních vlastností a setrvačnosti

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

$1 \text{ amu} = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 931.4 \text{ MeV}$

Hmotnost a energie v uzavřené soustavě je konstantní

Úbytek hmotnosti při uvolnění energie:

Chemické reakce ng na mol

Jaderné reakce mg na mol

Zákon stálých slučovacích poměrů



Proustův zákon konstantního složení 1799

Prokázal konstantní složení vody, CuCO_3

Joseph Proust
(1754 - 1826)

Daná sloučenina vždy obsahuje přesně stejná relativní hmotnostní množství prvků, ze kterých se skládá. Nezáleží na způsobu vzniku nebo postupu přípravy.

1.000 g UHLÍKU se vždy sloučí s 1.333 g KYSLÍKU na CO

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 H jako standardu.



John Dalton
(1766 - 1844)

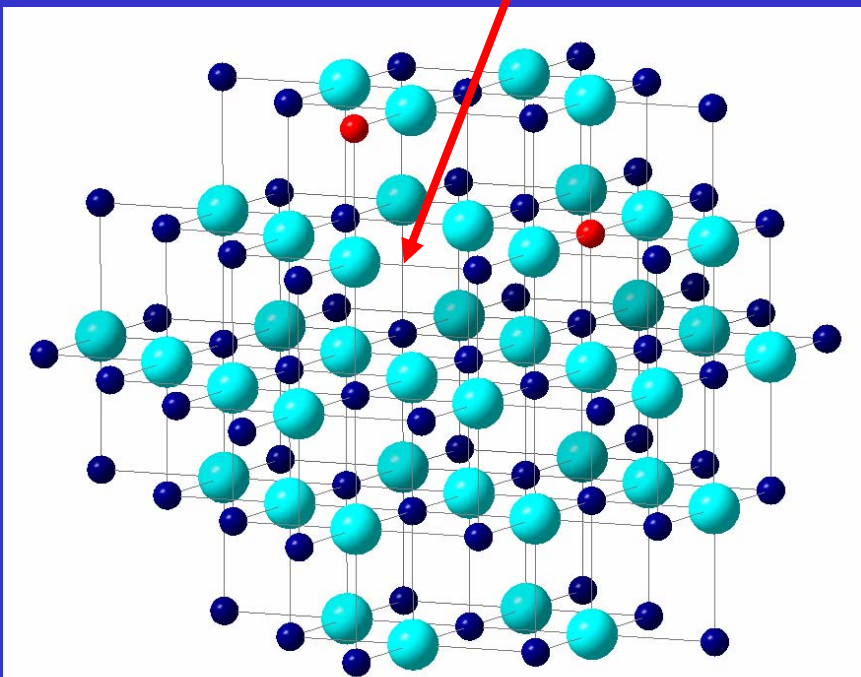
Oxidy chromu

Sloučenina	m(Cr), g	m(O), g	poměr
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,...



C. L. Berthollet
(1748 - 1822)

Daltonova atomová teorie

1805

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.

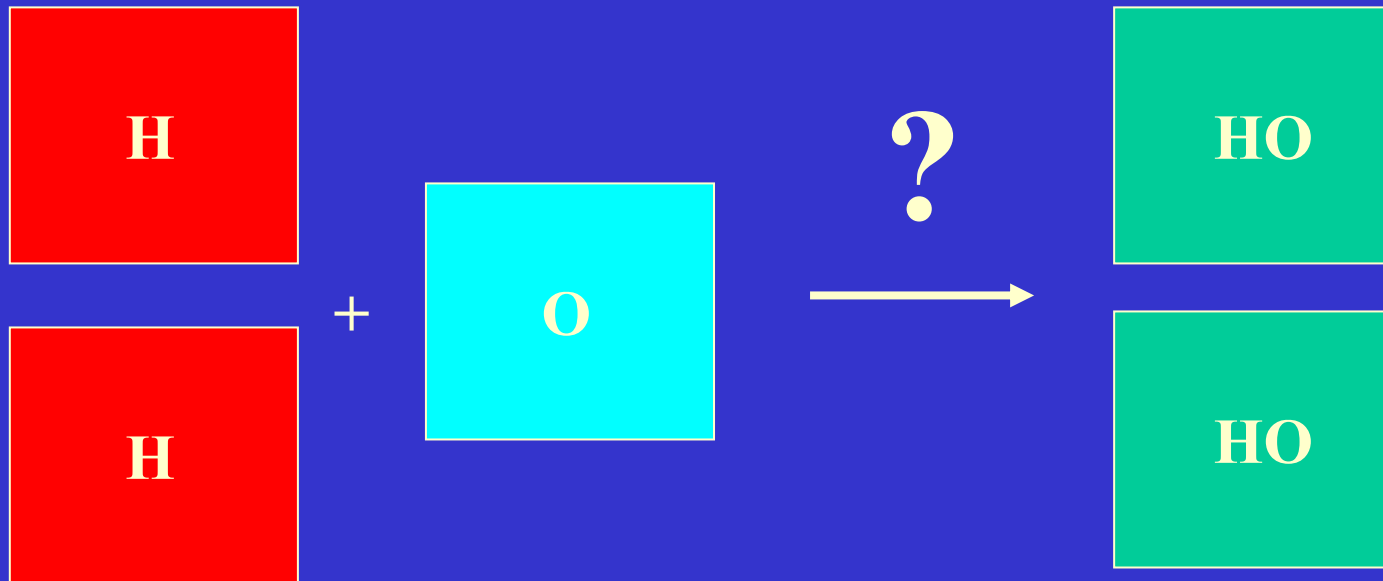
Zákon stálých objemů

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



Avogadova hypotéza

1811 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

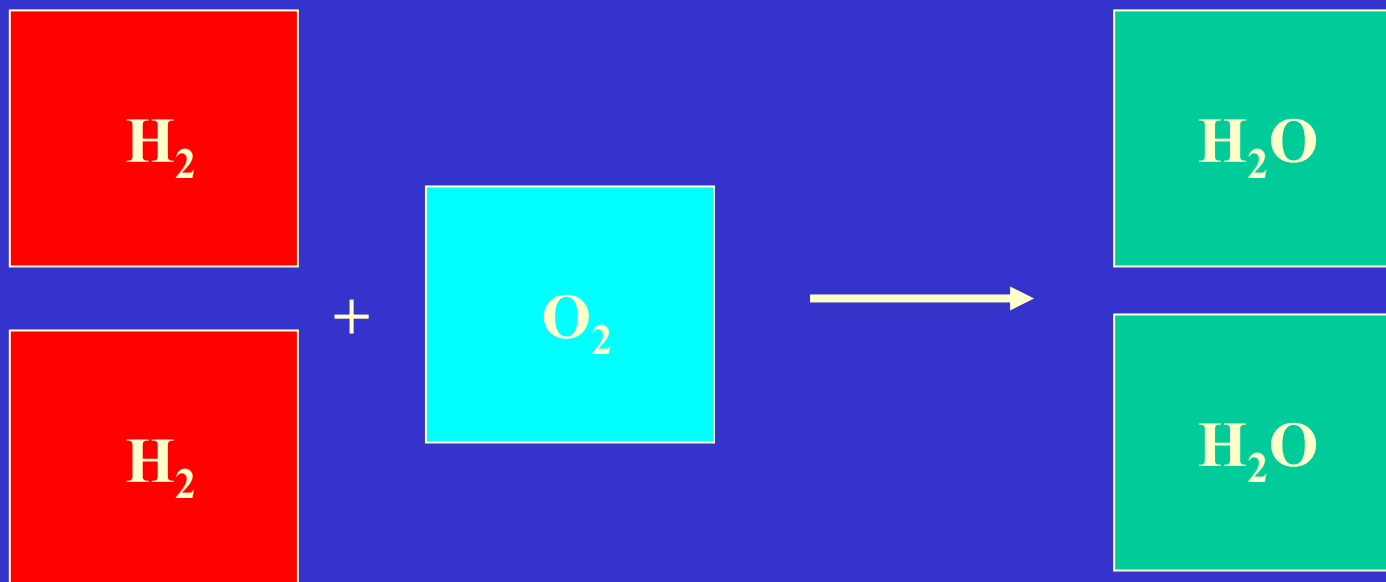
Objem 1 molu plynu je 22.4 litru
při 0 °C a 101325 kPa

$$V_M = 22.4 \text{ l mol}^{-1}$$



Amadeo Avogadro
(1776 - 1856) 75

Zákon stálých objemů



Výpočet Avogadrovy konstanty

Loschmidtovo číslo

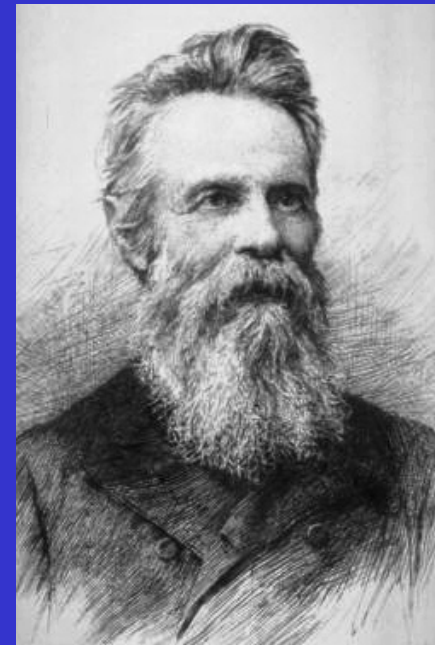
1865 z kinetické teorie plynů vypočetl

$$n_0 = 2.6 \cdot 10^{19} \text{ molekul cm}^{-3}$$

Dnešní hodnota: $2.686\,7775 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$

Dnešní hodnota Avogadrovy konstanty

$$N_A = 6.022\,141\,99 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$



Johann Josef Loschmidt
(1821 - 1895) Počerny u KV

Výpočet Avogadrovy konstanty



Brownův pohyb částic v kapalině
Důkaz existence molekul

Zavedl pojem Avogadrova konstanta

$6.82 \cdot 10^{23}$ molekul ve 2 g vodíku



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

Výpočet Avogadrovy konstanty

Z rentgenové strukturní analýzy Si monokrystalů

Příklad:

Ti tělesně centrovaná kubická buňka

$Z = 2$, $a = 330.6 \text{ pm}$

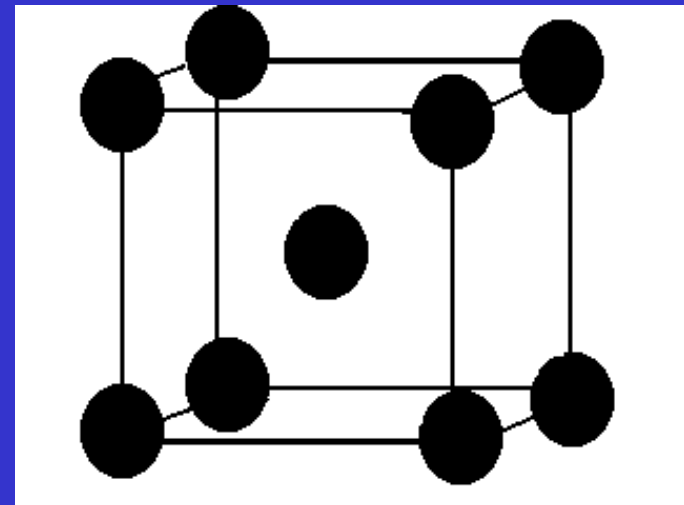
Hustota Ti $\rho = 4.401 \text{ g cm}^{-3}$

$A(\text{Ti}) = 47.88 \text{ g mol}^{-1}$

2 Ti na 1 buňku o objemu $V = a^3$

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

$$N_A = Z A(\text{Ti}) / V \rho$$



Avogadrova 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 ,

Nejsou molekuly: $NaCl$, SiO_2 , BeF_2 , C (grafit, diamant),

Látkové množství

1 mol = takové množství částic (atomů, molekul, elektronů,...)
jako ve 12 g uhlíku ^{12}C

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Chemické vzorce

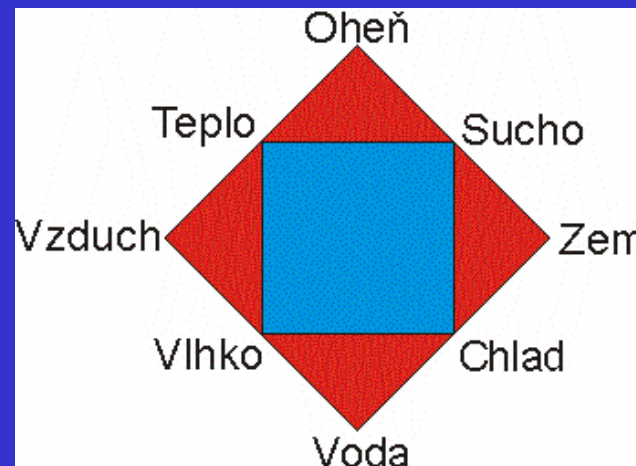
Stechiometrie chemických rovnic

Pojem prvku v historii chemie

6. st. př. n. l. Thales, Anaximander, Anaximenes, Herakleitos
Hmota sestává z neměnitelných jednoduchých základních
kamenů – prvků

Empedokles (490 - 430 př. n. l.) 4 základní prvky: země,
voda, oheň, vzduch a 2 základní síly: přitažlivá a odpudivá
(až 1783 H. Cavendish dokázal, že voda je sloučenina H a O)

Aristoteles (384 - 322 př. n. l.)



Pojem prvku

Alexandrie: řecká teorie + egyptská praktická “chemie”

Arabská alchymie, přenesena do Evropy

Alchymistické prvky: země, voda, oheň, vzduch a navíc

Au, Hg, S, sůl

1661 Robert Boyle: přírodovědecká definice prvku:

Prvek je látka, která se nedá rozložit na jiné látky.

1789 Lavoisier tabulka 21

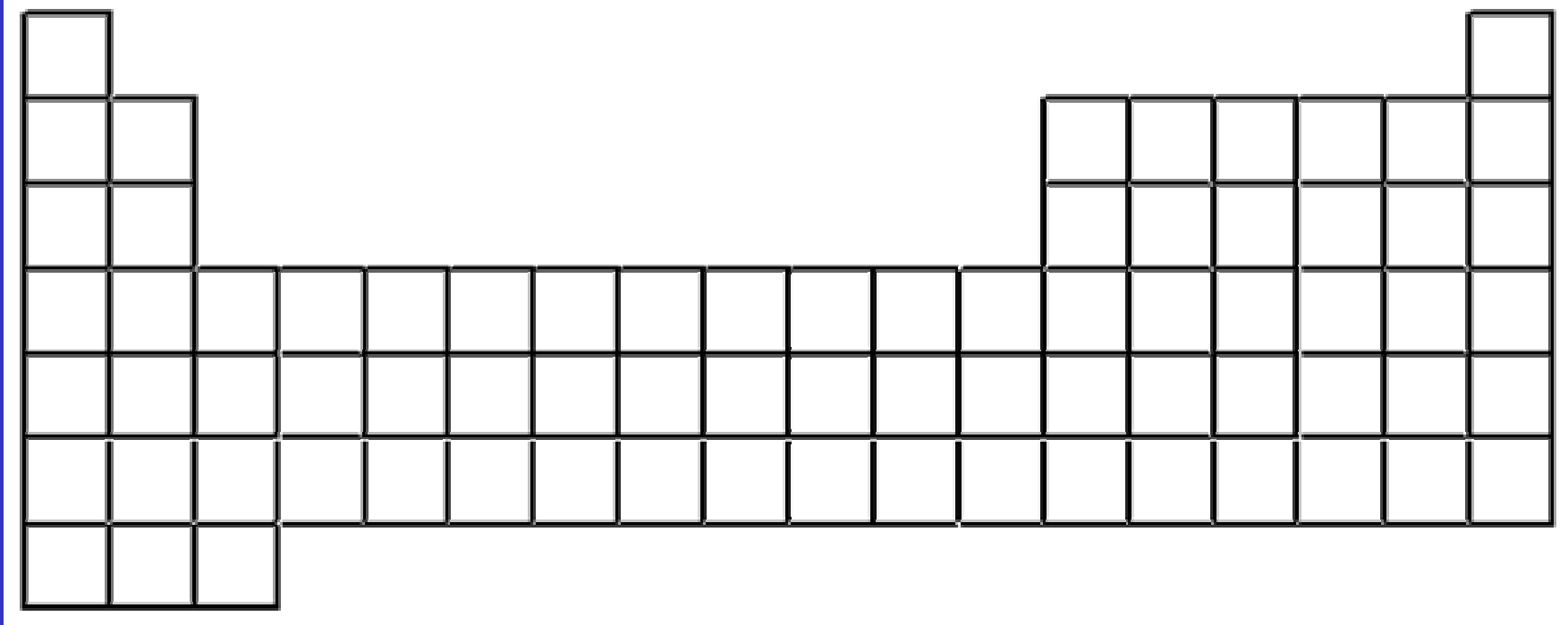
1808 Dalton 36 prvků

1813-14 Berzelius 47 prvků

1869 Medělejev tabulka 63 prvků

2003 tabulka 112 prvků, 114, 116, 118?





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

electrum = Sn amalgam

Daltonovy symboly 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.
2. Hydrogen.
3. Nitrogen.
4. Carbon.
5. Sulphur.
6. Phosphorus
7. Gold.
8. Platinum.
9. Silver.
10. Mercury.
11. Copper.
12. Iron.
13. Nickel.
14. Tin.
15. Lead.

16. Zinc.
17. Bismuth.
18. Antimony.
19. Arsenic.
20. Cobalt.
21. Manganese.
22. Uranium.
23. Tungsten.
24. Titanium.
25. Cerium.
26. Potassium.
27. Sodium.
28. Calcium.
29. Magnesium.
30. Barium.

31. Strontium.
32. Aluminium.
33. Silicon.
34. Yttrium.
35. Beryllium.
36. Zirconium.

Vývoj definice atomových hmotností

J. Dalton $H = 1$

J. J. Berzelius $O = 100$

J. S. Stas $O = 16$ (pro přírodní směs izotopů) chemická stupnice

fyzikální stupnice $^{16}\text{O} = 16$ ZMATEK

1961

Atomová hmotnostní jednotka = $1/12$ hmotnosti atomu nuklidu ^{12}C

$1 \text{ amu} = 1 \text{ u} = 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Atomová hmotnost

1814 Tabulka relativních atomových hmotností 41 prvků

O = 100

Vzorce sloučenin

1811 Zavedení zkratk jako symbolů prvků

Li	Lithium
Be	Beryllium
Ga	Gallium (co je to Galium)
Y	Yttrium
Te	Tellur
Tl	Thallium
Ds	Darmstadtium



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

Druh atomů	A nebo B	prvky
	A a B nebo A a C	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
-----------------------	--

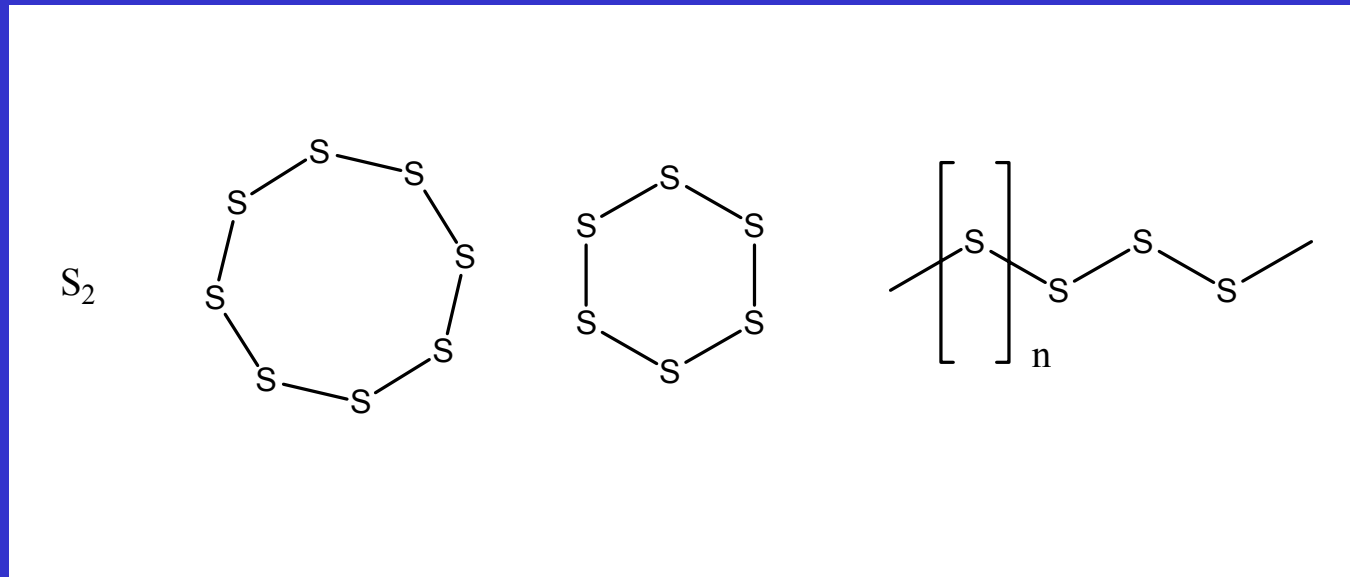
→ molekulový vzorec	(C ₂ H ₂ nebo C ₆ H ₆)
---------------------	---

[CoN₆H₁₅O₂]²⁺

Prvky – struktura – allotropie

Struktura strukturální vzorec

Vazebná topologie allotropie (prvky): O_2 , O_3



Sloučeniny – struktura – konstituce

Vazebná topologie strukturální (konstituční) vzorec

topologická (konstituční, vazebná) izomerie (sloučeniny)

A-B-C nebo A-C-B

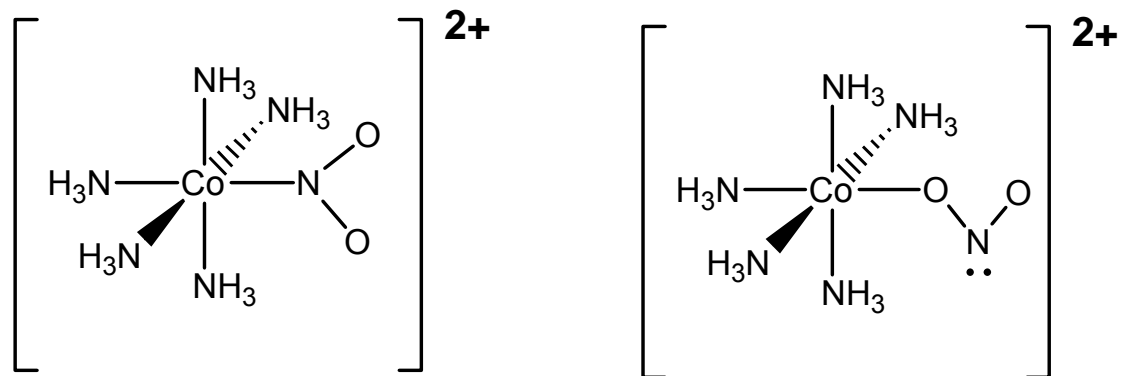
$C_5H_{10}O$

HOCN, HNCO, HONC

$[Co(NH_3)_5NO_2]^{2+}$ $[Co(NH_3)_5ONO]^{2+}$

Molekulární tvar

Molekulární tvar (geometrický vzorec)

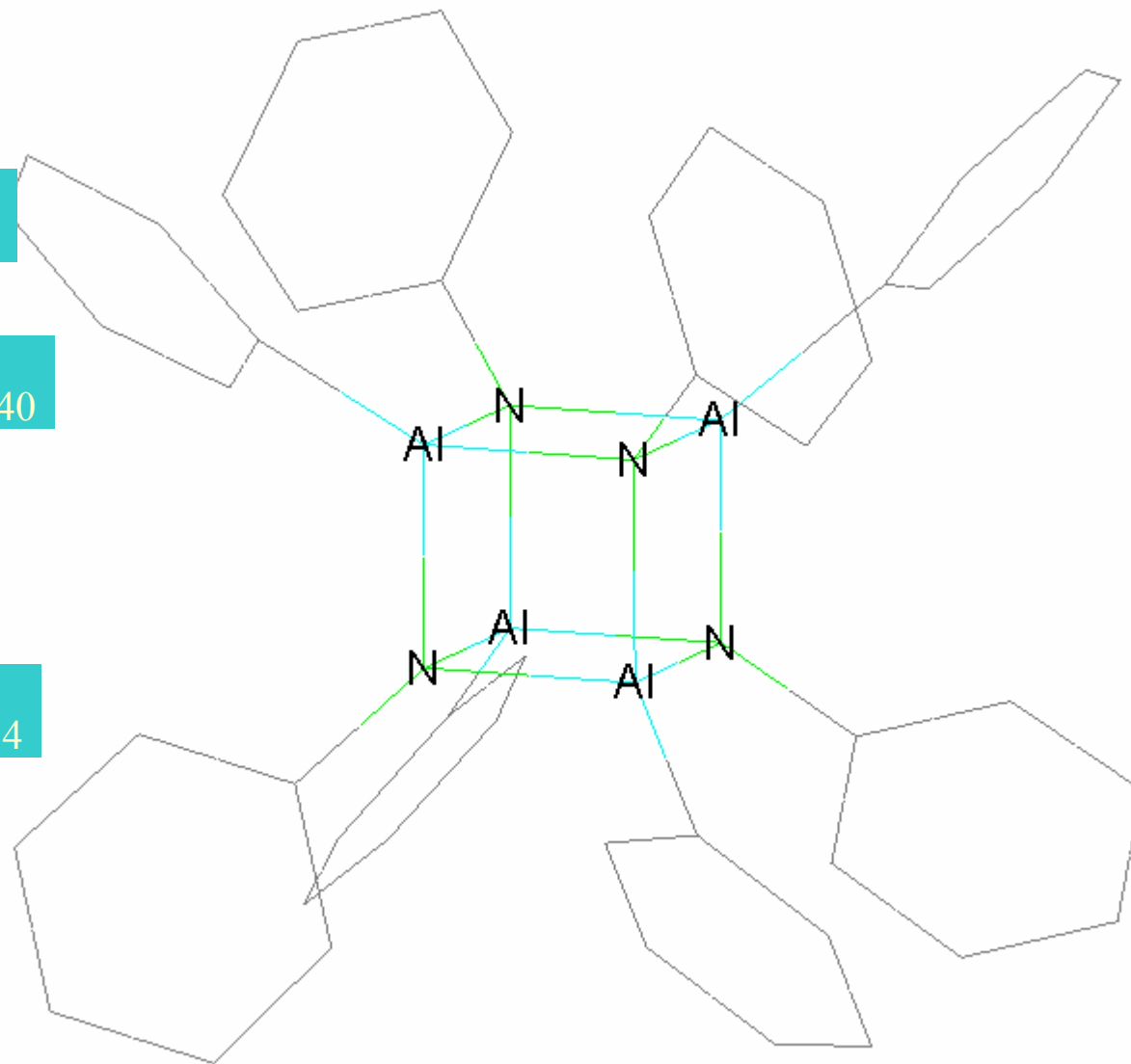


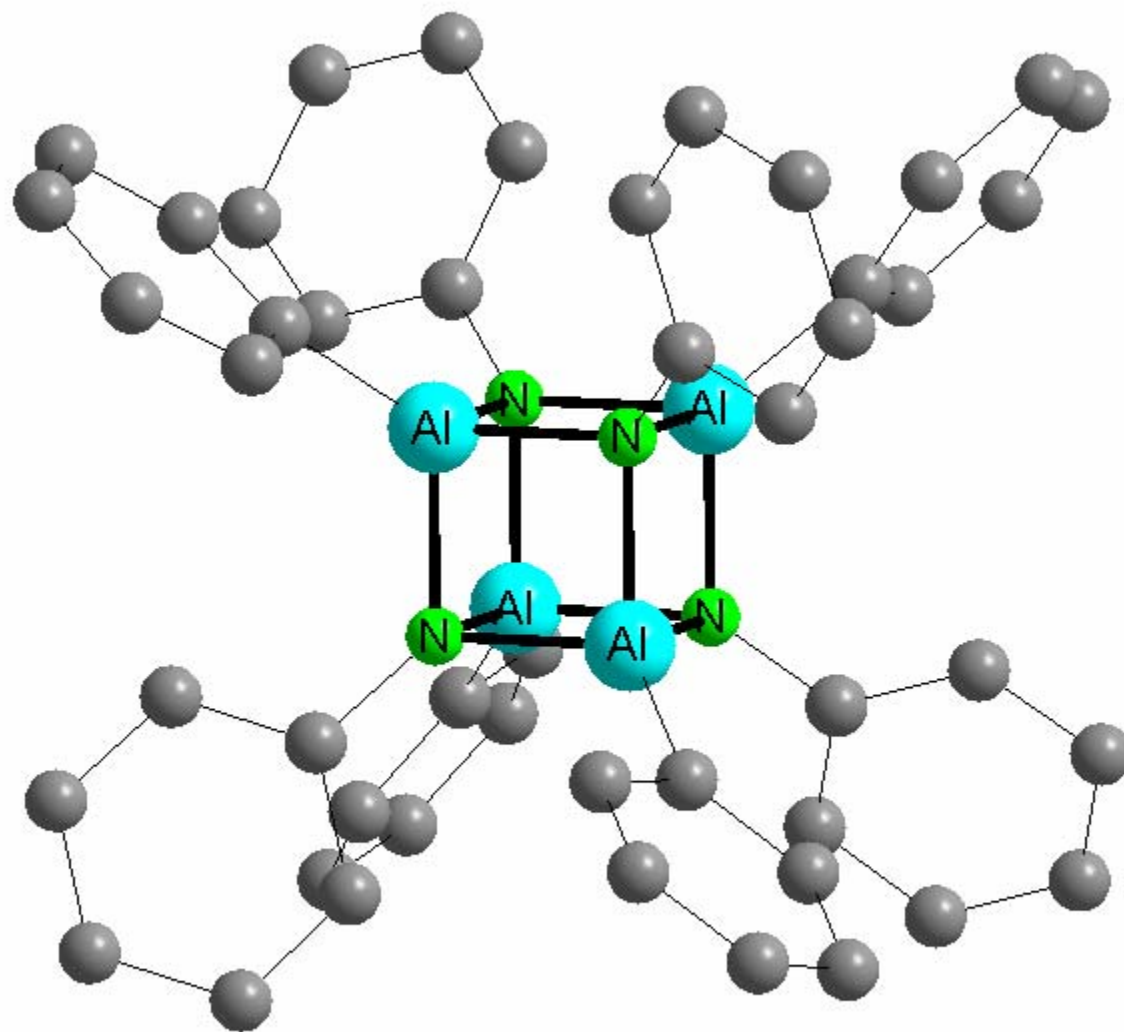
Topology:  The Ensemble C_6H_6 ($n_C \leq 4$)

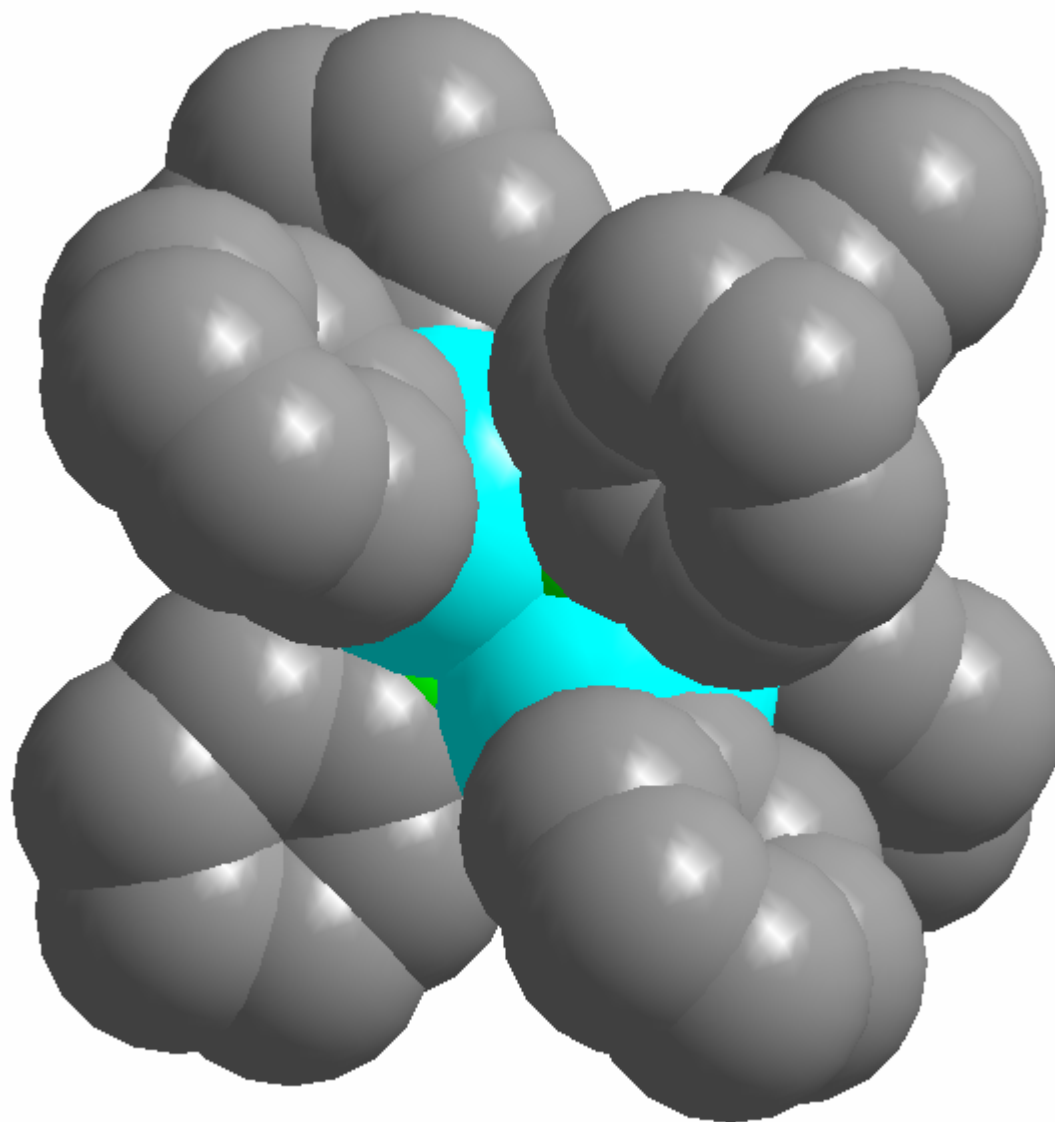


217 izomerů C_6H_6

$\Sigma 217$



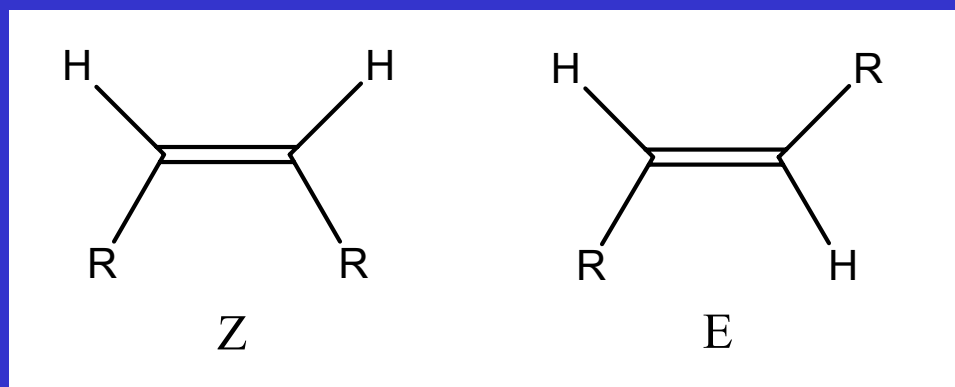
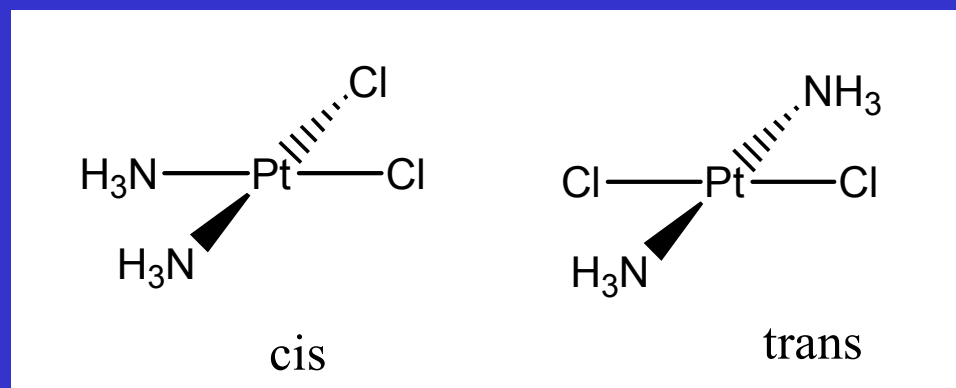




Molekulární tvar

Molekulární tvar (geometrický vzorec)

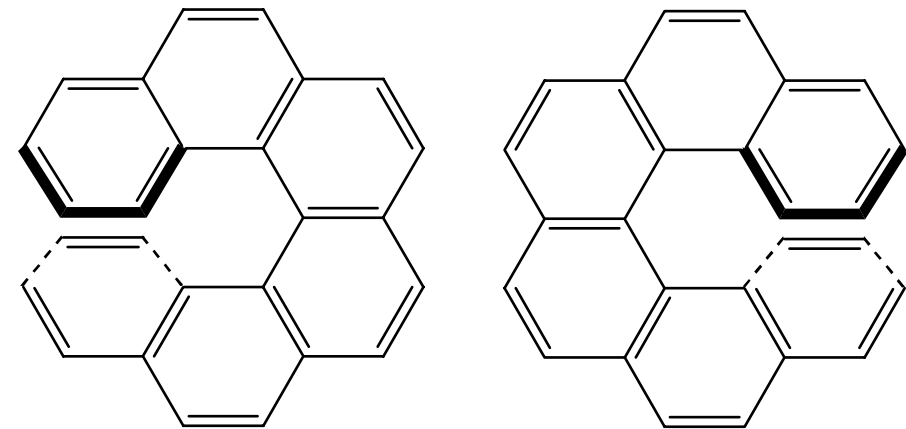
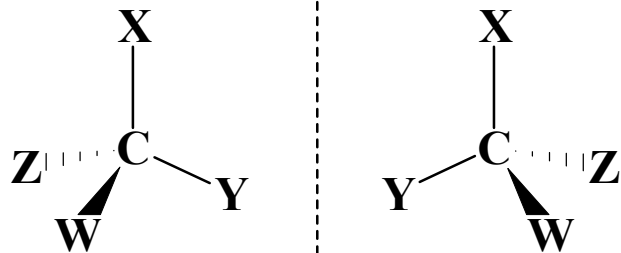
geometrické izomery



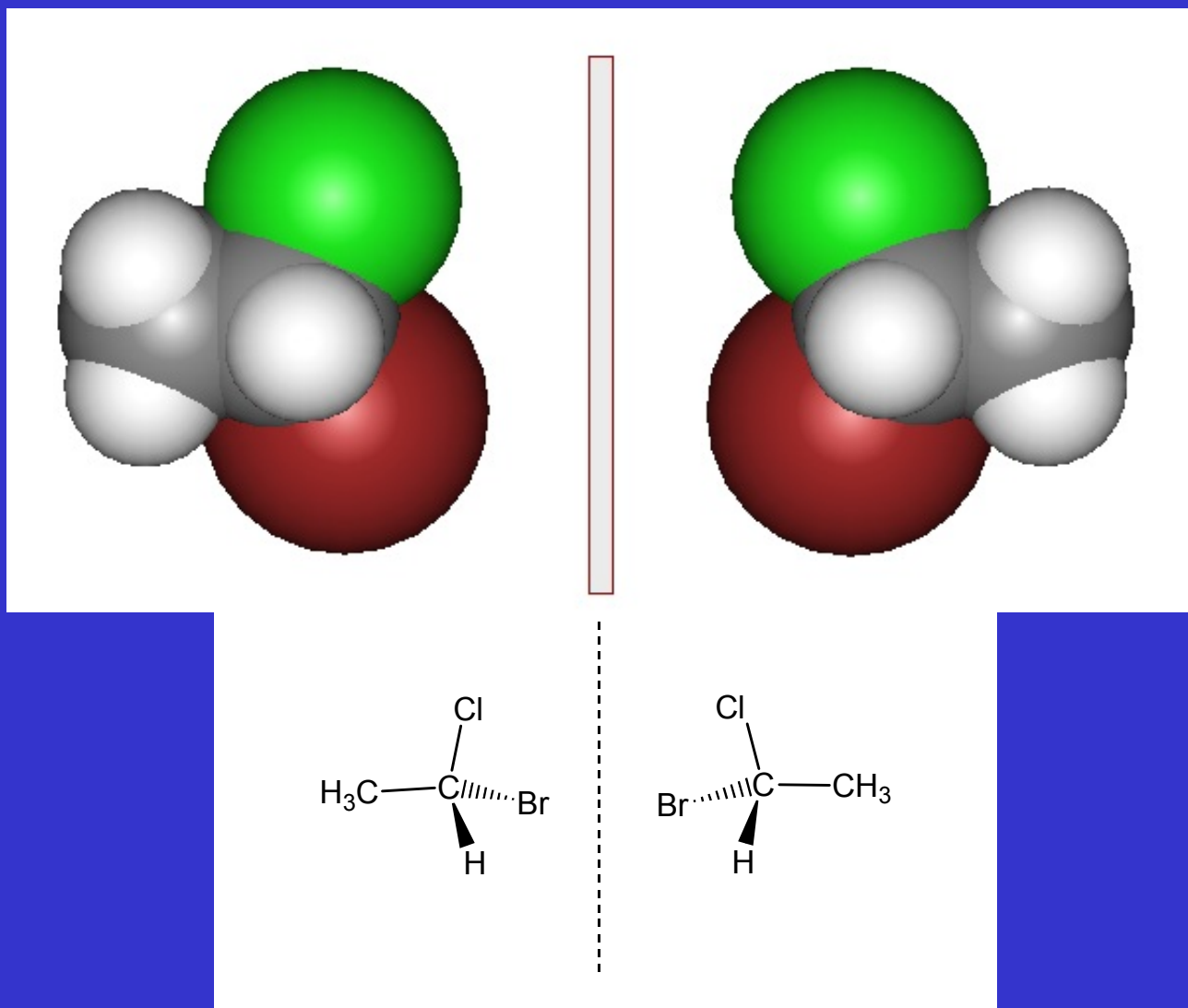
Molekulární tvar

Molekulární tvar (geometrický vzorec)

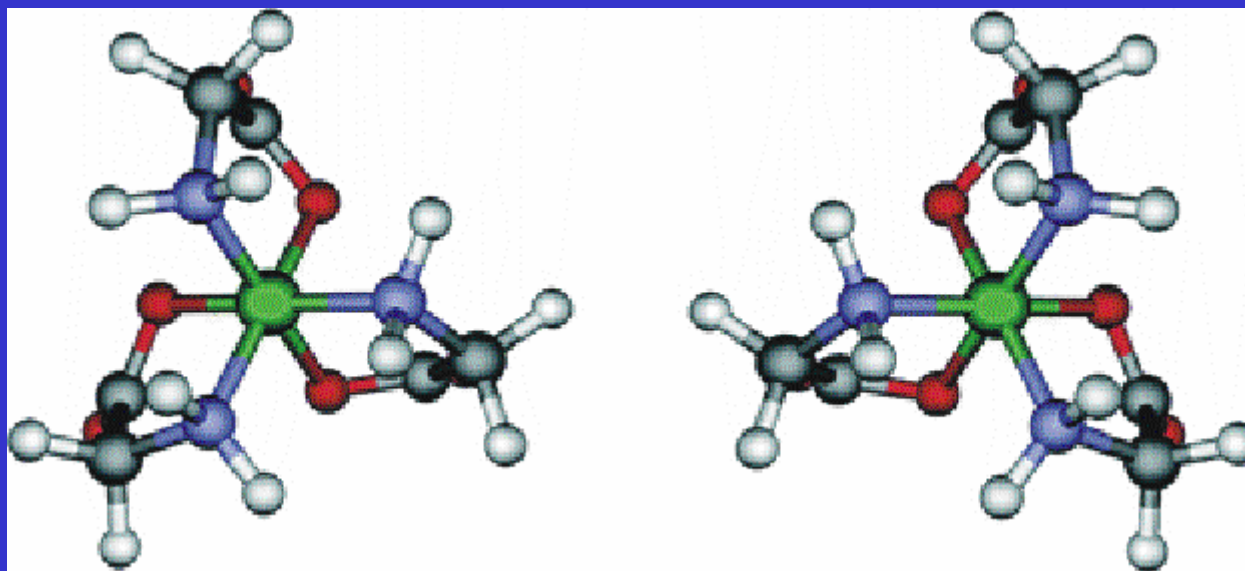
Optické izomery - enantiomery



Optické izomery - enantiomery

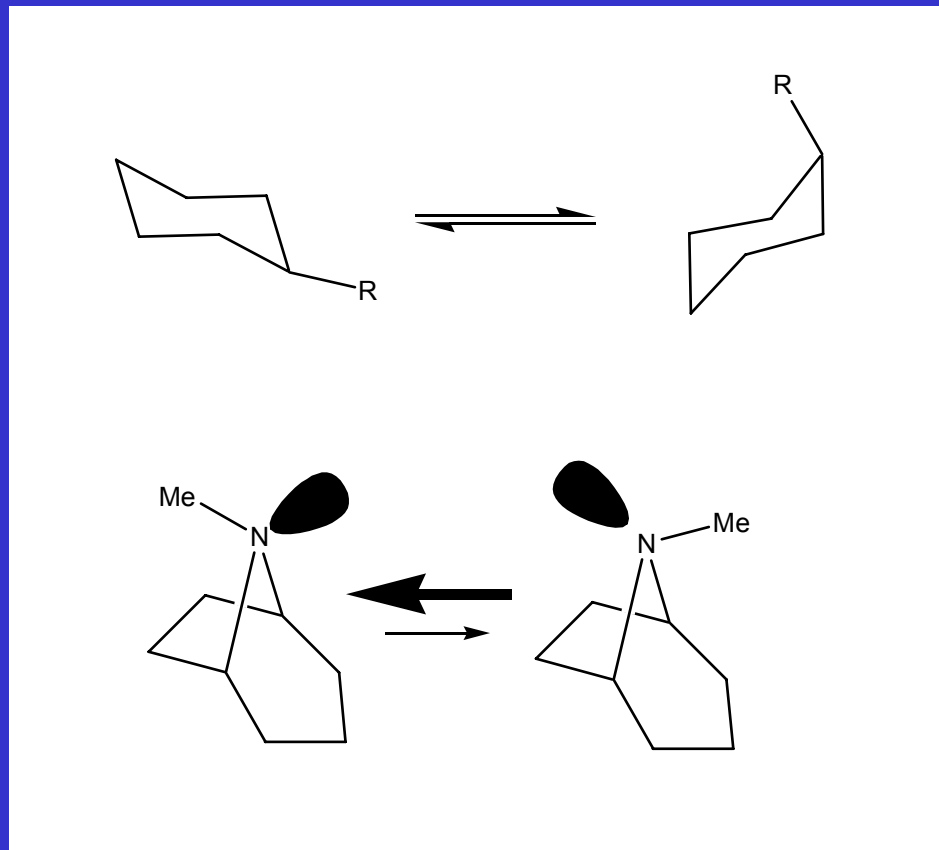


Optické izomery - enantiomery



Molekulární tvar

konformery

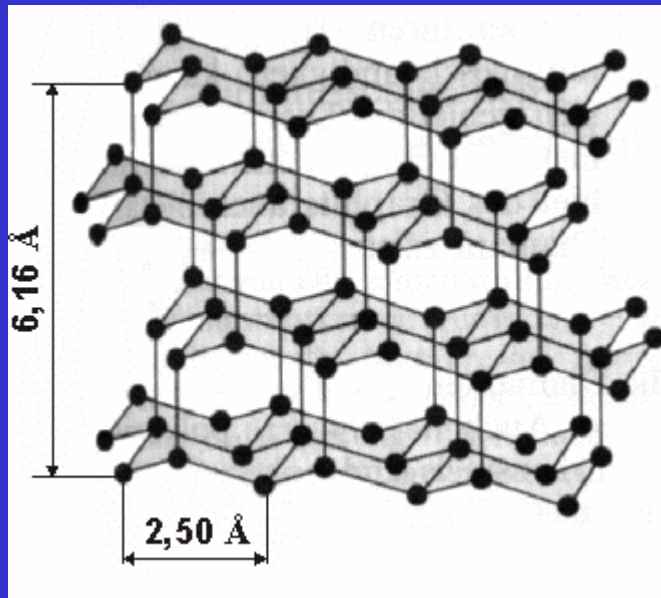


Krystalová struktura

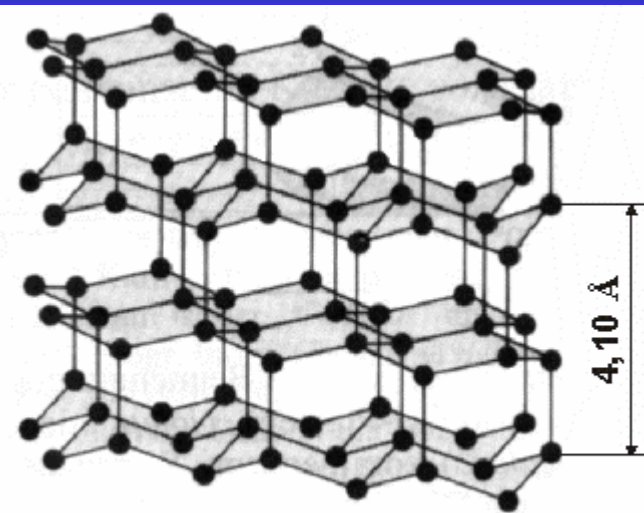
Polymorfie – jen pro pevné látky

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

Kubický diamant



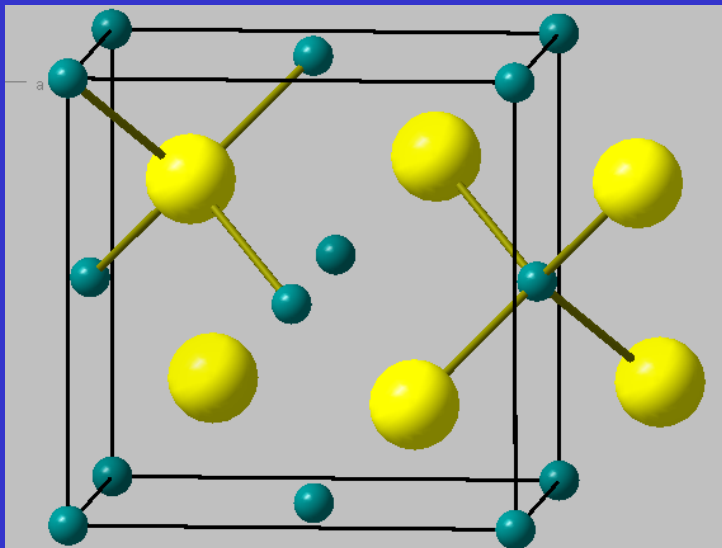
Hexagonální diamant



Krystalová struktura

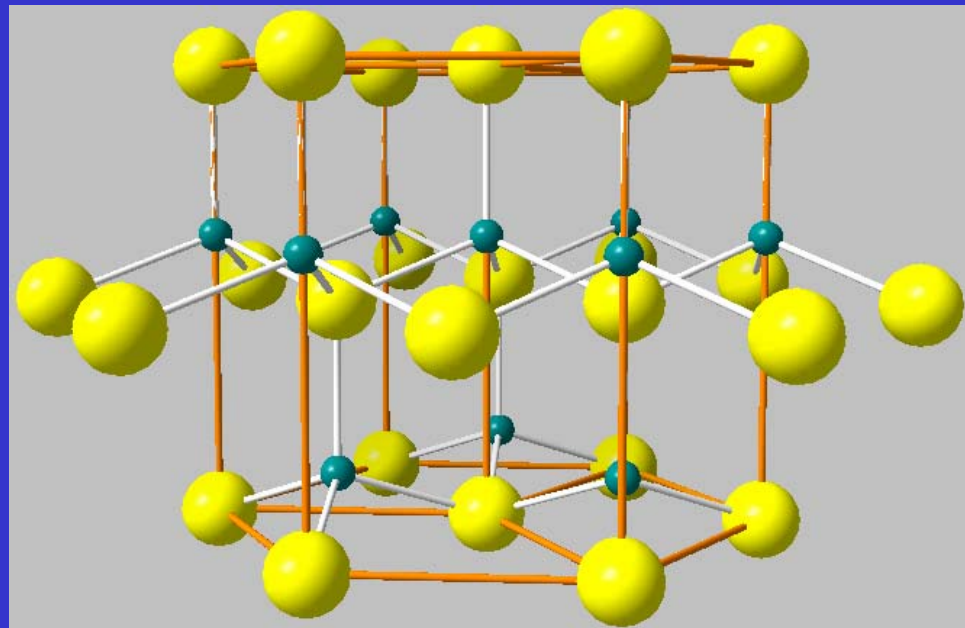
ZnS sfalerit

kubická struktura



ZnS wurzit

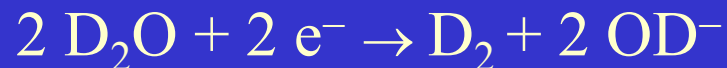
hexagonální struktura



Studená jaderná syntéza

1989 Dr. Stanley Pons a Dr. Martin Fleischmann z University of Utah
a Dr. Steven Jones z Brigham Young University, USA

Elektrolýza D₂O na Pd elektrodě (katodě)



D₂ se rozpouští v Pd na tuhý roztok (D/Pd = 0.7 až 1.1)

Jaderná reakce, vývoj tepla a neutronů

	Uvolněná E (MeV)
$\text{D} + \text{D} \rightarrow {}^3\text{He} + \text{n}$	3.27
$\text{D} + \text{D} \rightarrow \text{T} + \text{p}$	4.03
$\text{D} + \text{D} \rightarrow {}^4\text{He} + \gamma$	23.85
$\text{D} + \text{T} \rightarrow {}^4\text{He} + \text{n}$	17.59
$\text{p} + \text{D} \rightarrow {}^3\text{He} + \gamma$	5.49
$\text{p} + \text{T} \rightarrow {}^4\text{He} + \gamma$	19.81