

Obecná chemie C1020

Jiří Pinkas

Ústav chemie – Univerzitní kampus Bohunice

Budova A12, 3. patro, místnost 321

Tel. 549496493

jpinkas@chemi.muni.cz

Obecná chemie C1020

Přednáška - A11/132 a 205

Út 17 - 19.00

Čt 10 - 12.00

Materiály z přednášky budou vystaveny v ISu

Zkouška písemná - leden a únor 2011

Seminář C1040

Obecná chemie C1020

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.

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

- 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 výzkum

Technologie – aplikace znalostí k přeměně okolí, výrobky k prodeji

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

Počátky chemie

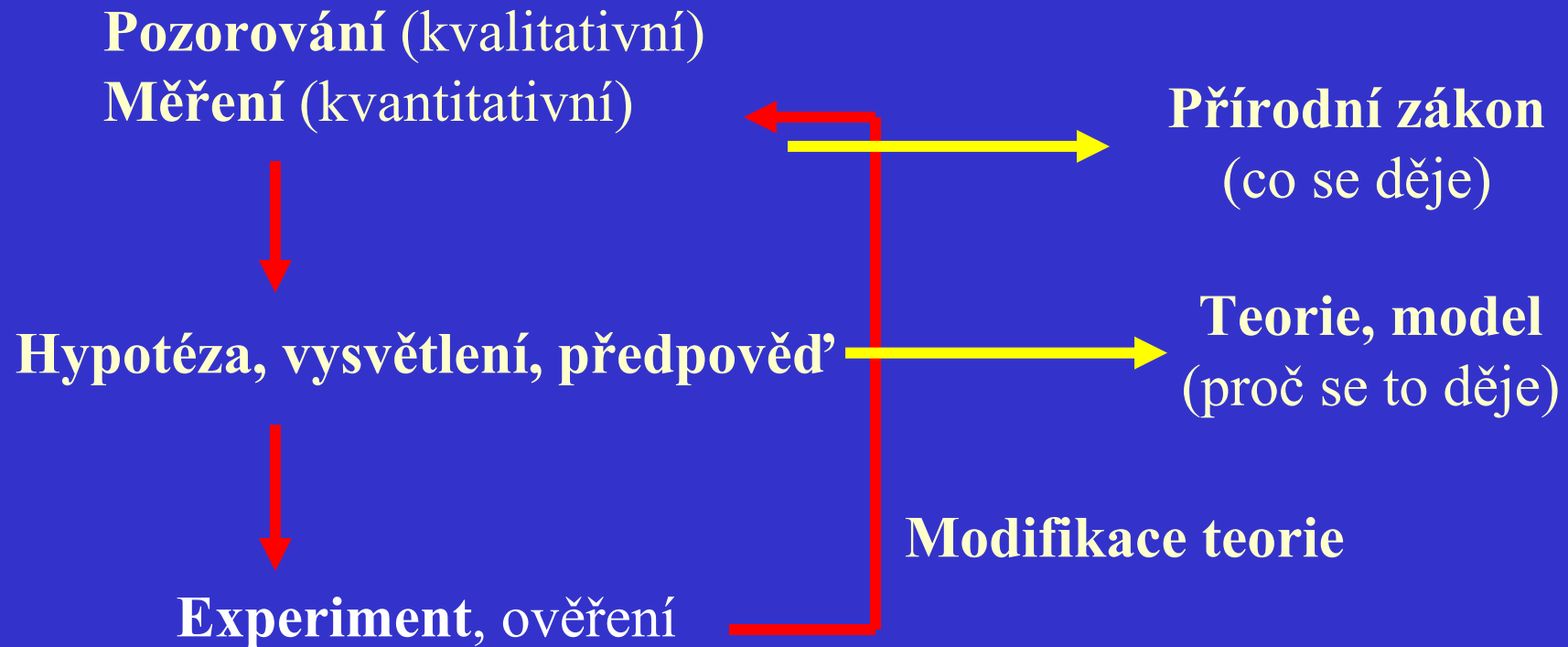
První písemná zmínka o chemii

Mezopotámie 1200 př. n. l.

Tapputi-Belatekallim - výrobkyně parfémů



Věda a 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.

Věda a vědecká metoda

Teorie, model

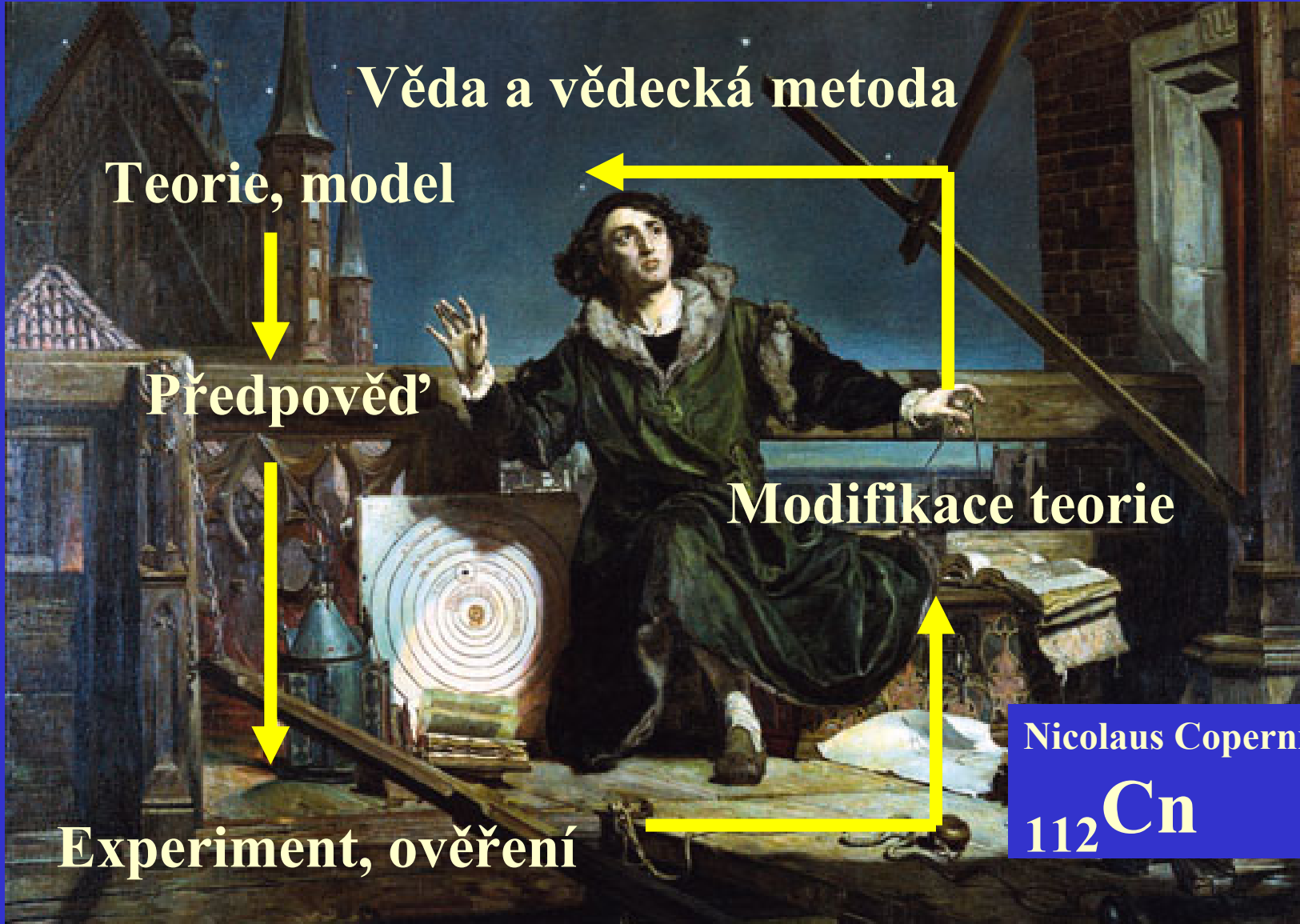
Předpověď

Experiment, ověření

Modifikace teorie

Nicolaus Copernicus

112 Cn



Pozorování a vysvětlení

První vysvětlení přírodního jevu – **hypotéza úspěšně testovaná vyplněnou předpovědí:**

Tháles Milétský

Vysvětlil zatmění Slunce – měsíc v novu přejde přes sluneční kotouč

Předpověď dalšího zatmění Slunce 585 př. n. l.

Počátek vědeckého myšlení, racionální přístup bez mystiky a náboženských představ

Základní prvek je **voda**



Pozorování a vysvětlení

Johann Joachim Becher
(1635 - 1682)

První konzistentní vysvětlení několika
přírodních jevů:

- 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)

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

Při oxidaci kovů je hmotnost produktů **vyšší** = flogiston má
negativní hmotnost ☹

Počátky **kvantitativních** experimentů



Georg Ernst Stahl
(1660 - 1734)
Flogiston

Pozorování a vysvětlení

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

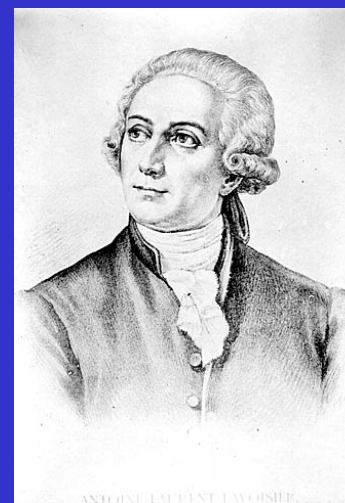
hoření = slučování s O_2 ,
vyšší hmotnost produktů - vážení

Zákon zachování hmoty

flogiston = $-O_2$

Zahřívání HgO

(redukce na kov bez flogistonu z C)



Antoine Laurent Lavoisier
(1743 – 1794)

Tři objevitelé kyslíku



Carl Wilhelm Scheele
(1742 – 1786)
1771 připravil O_2
publikoval 1777
Ochutnával chemikálie



Joseph Priestley
(1733 – 1804)
Deflogistonovaný
vzduch – publikoval
1774



Antoine Lavoisier
(1743 – 1794)
1783
Oxygen - prvek

Zahřívání HgO , Ag_2CO_3 , $Mg(NO_3)_2$, $NaNO_3$

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



The periodic table of the elements

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18

Alkali metals (including H) Alkaline earth metals Rare earths (Sc, Y, and La-Lr) Transition metals (including H) Post-transition metals (including H) Nonmetals Halogens Noble gases

Hydrogen 1 H																	Helium 2 He
Lithium 3 Li	Beryllium 4 Be											Boron 5 B	Carbon 6 C	Nitrogen 7 N	Oxygen 8 O	Fluorine 9 F	Neon 10 Ne
Sodium 11 Na	Magnesium 12 Mg											Aluminum 13 Al	Silicon 14 Si	Phosphorus 15 P	Sulfur 16 S	Chlorine 17 Cl	Argon 18 Ar
Potassium 19 K	Calcium 20 Ca	Scandium 21 Sc	Titanium 22 Ti	Vanadium 23 V	Chromium 24 Cr	Manganese 25 Mn	Iron 26 Fe	Cobalt 27 Co	Nickel 28 Ni	Copper 29 Cu	Zinc 30 Zn	Gallium 31 Ga	Germanium 32 Ge	Arsenic 33 As	Selenium 34 Se	Bromine 35 Br	Krypton 36 Kr
Rubidium 37 Rb	Sr 38	Yttrium 39 Y	Zirconium 40 Zr	Niobium 41 Nb	Molybdenum 42 Mo	Technetium 43 Tc	Ruthenium 44 Ru	Rhodium 45 Rh	Palladium 46 Pd	Silver 47 Ag	Cadmium 48 Cd	Indium 49 In	Tin 50 Sn	Antimony 51 Sb	Tellurium 52 Te	Iodine 53 I	Xenon 54 Xe
Cesium 55 Cs	Ba 56	Lanthanum 57 La	Hafnium 58 Hf	Tantalum 59 Ta	Tungsten 60 W	Rhenium 61 Re	Osmium 62 Os	Iridium 63 Ir	Platinum 64 Pt	Gold 65 Au	Mercury 66 Hg	Thallium 67 Tl	Lead 68 Pb	Bismuth 69 Bi	Polonium 70 Po	Astatine 71 At	Radon 72 Rn
Francium 73 Fr	Radium 74 Ra	Lanthanum 57 La	Rutherfordium 76 Rf	Dubnium 77 Db	Seaborgium 78 Sg	Bhassium 79 Bh	Hassium 80 Hs	Mt 81	Darmstadtium 82 Ds	Roentgenium 83 Rg	Copernicium 84 Cn	Ununbium 111 Uub	Ununquadium 112 Uuq	Ununpentium 113 Uup	Ununhexium 114 Uuh	Ununseptium 115 Uus	Ununoctium 116 Uuo

Key

- Transition metal
- Post-transition metal
- Non-metal
- Alkali metal
- Alkaline earth metal
- Rare earths (Sc, Y, and La-Lr)
- Halogen
- Noble gas

Lanthanoids (lanthanides) including La

Lanthanum 57 La	Cerium 58 Ce	Praseodymium 59 Pr	Neodymium 60 Nd	Promethium 61 Pm	Samarium 62 Sm	Europium 63 Eu	Gadolinium 64 Gd	Terbium 65 Tb	Dysprosium 66 Dy	Ho 67	Erbium 68 Er	Thulium 69 Tm	Ytterbium 70 Yb
------------------------------	---------------------------	---------------------------------	------------------------------	-------------------------------	-----------------------------	-----------------------------	-------------------------------	----------------------------	-------------------------------	-----------------	---------------------------	----------------------------	------------------------------

Actinoids (actinides) including Ac

Actinium 73 Ac	Thorium 74 Th	Protactinium 75 Pa	Uranium 76 U	Neptunium 77 Np	Plutonium 78 Pu	Americium 79 Am	Curium 80 Cm	Berkelium 81 Bk	Californium 82 Cf	Einsteinium 83 Es	Fermium 84 Fm	Mendelevium 85 Md	Nobelium 86 No
-----------------------------	----------------------------	---------------------------------	---------------------------	------------------------------	------------------------------	------------------------------	---------------------------	------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	----------------------------	--------------------------------	-----------------------------

Vědecký jazyk- přesná definice pojmů

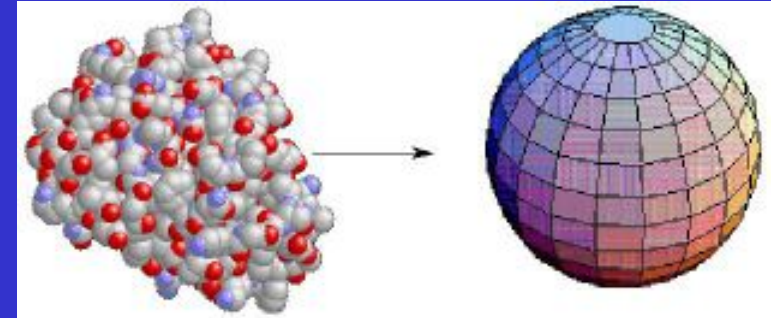


Joachim Jungius
(1587 - 1657)

Zakladatel vědeckého jazyka
Potřeba přesné definice pojmů
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)

Model



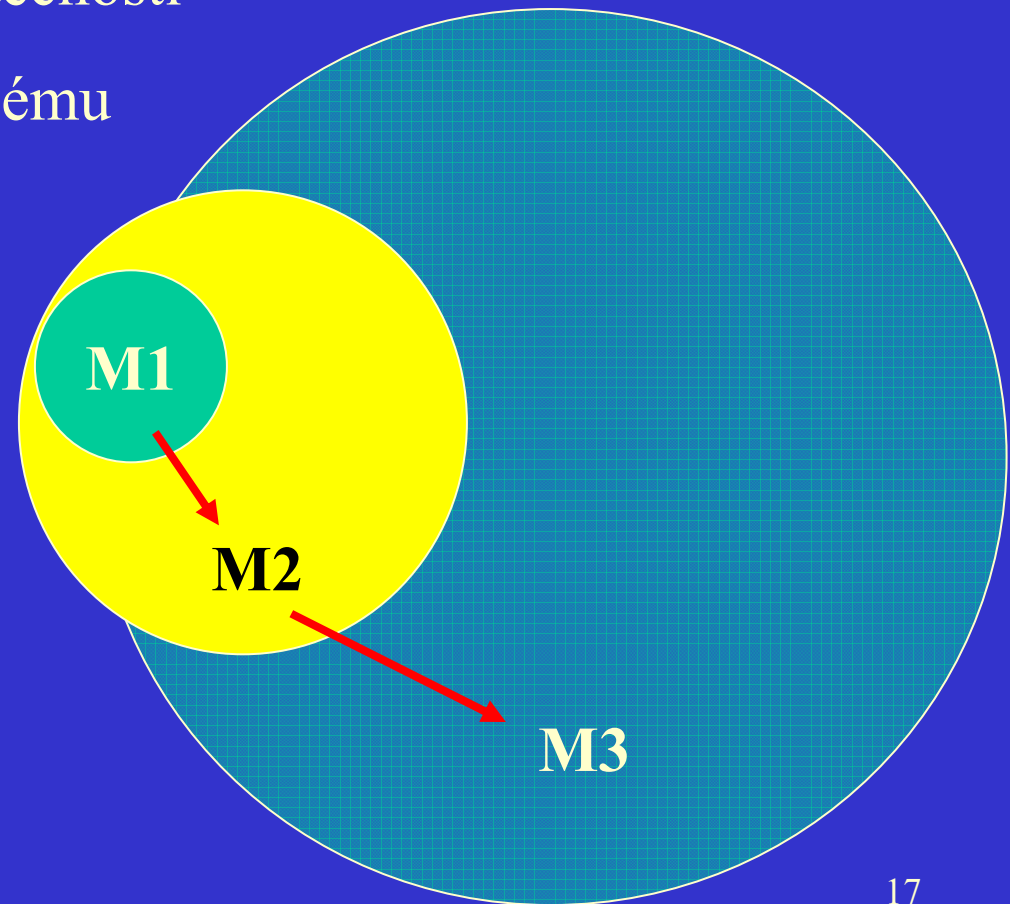
Zjednodušený obraz skutečnosti

Usnadní vysvětlení problému

Idealizace

Aproximace

Nový přesnější model
s příchodem přesnějších
metod měření



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 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.

Model

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

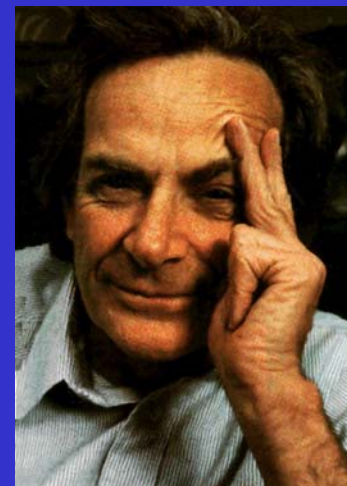
Pro efektivní použití modelu je nutno znát jeho předpoklady a omezení, jeho přednosti a slabiny. Lze klást jen takové otázky, na které může daný model odpovědět.

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

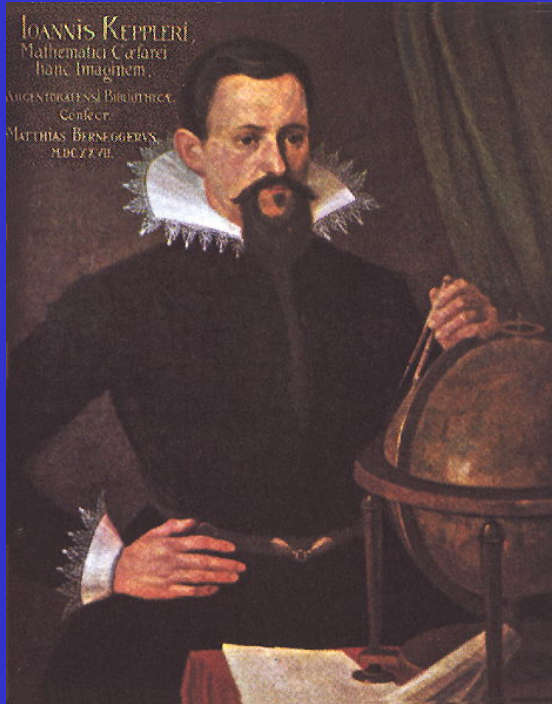
Model

"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



Teorie a experiment



Ubi materia, ibi geometria

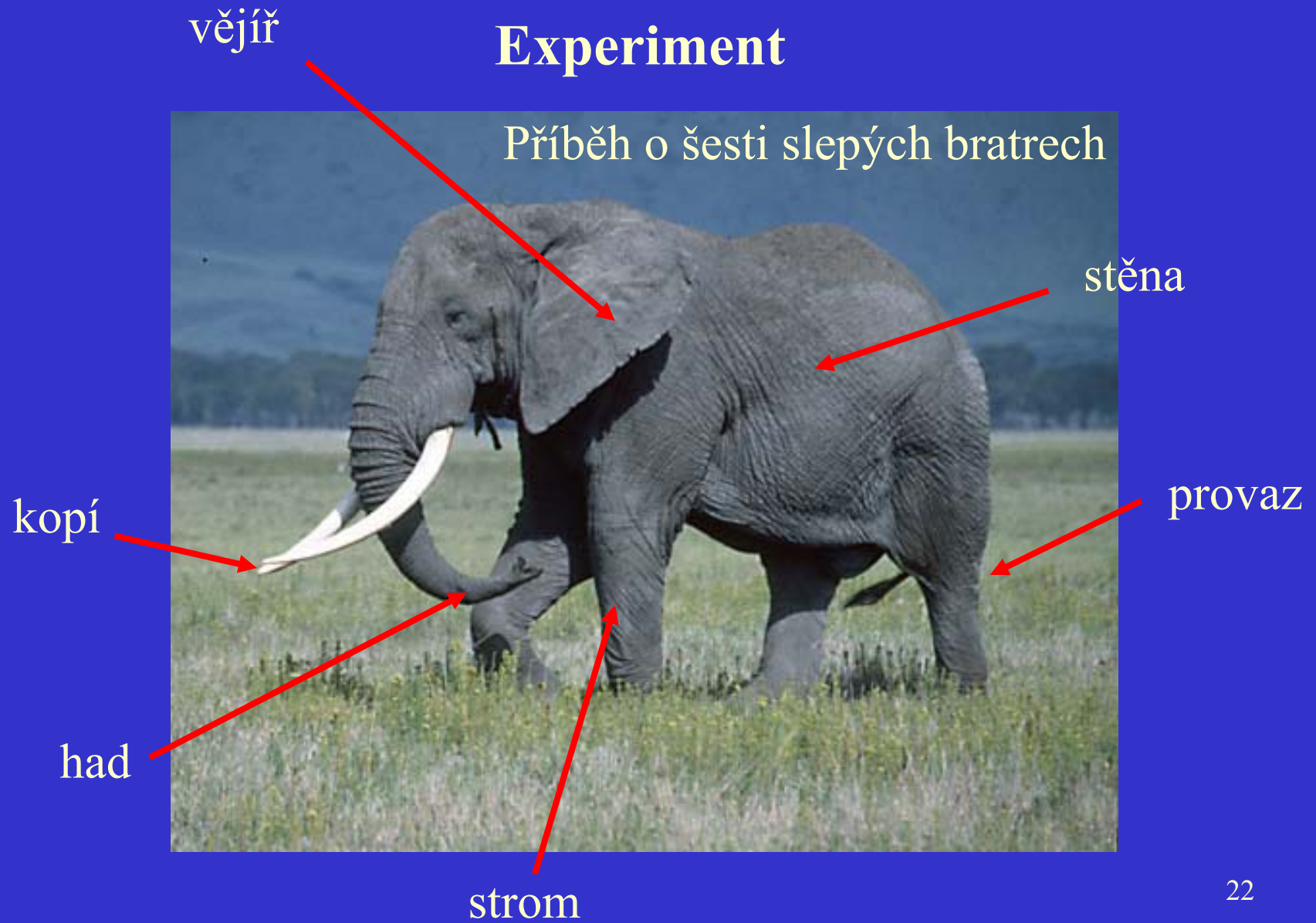
Kde je hmota, tam je geometrie
měření

Johannes Kepler
(1571 - 1630)

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

Experiment

Příběh o šesti slepých bratřech

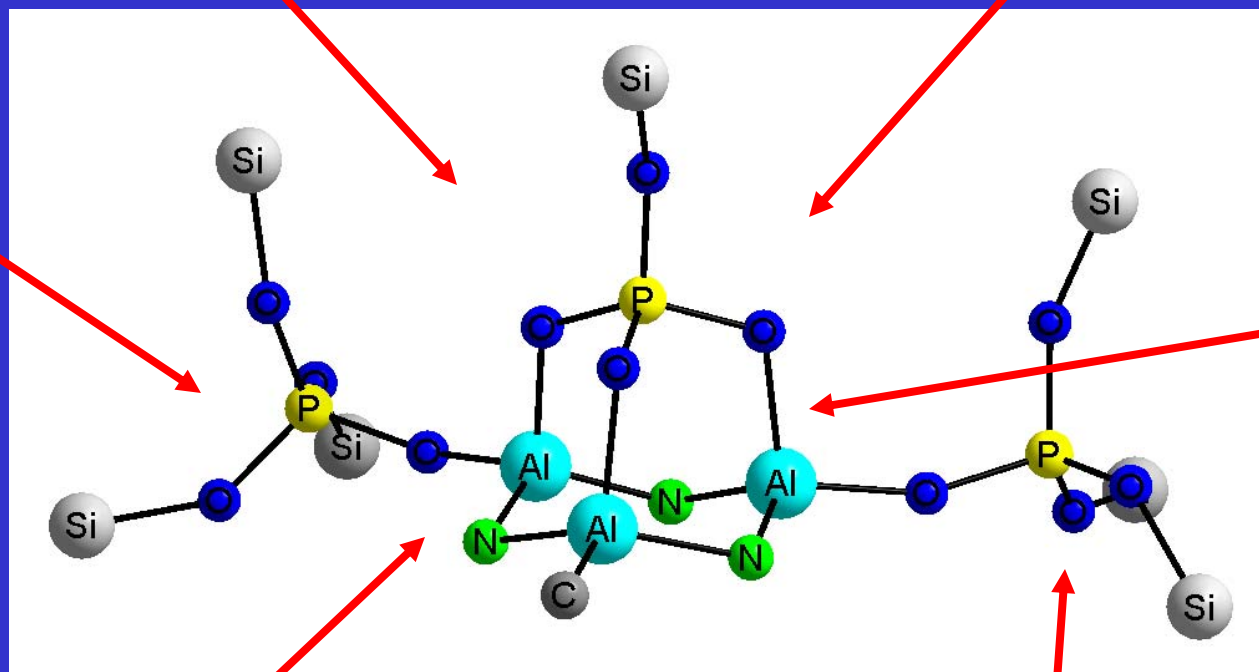


Elementární analýza

Experiment

RTG strukturní analýza

NMR



UV-vis

Hmotnostní spektrometrie, MS

Vibrační spektroskopie, IR, RA₂₃

Kvantitativní experiment

Johann Baptista van Helmont
(1579 - 1644)

Robert Boyle
(1627 - 1691)

Joseph Black
(1728 - 1799)

Henry Cavendish
(1731 - 1810)

Měření



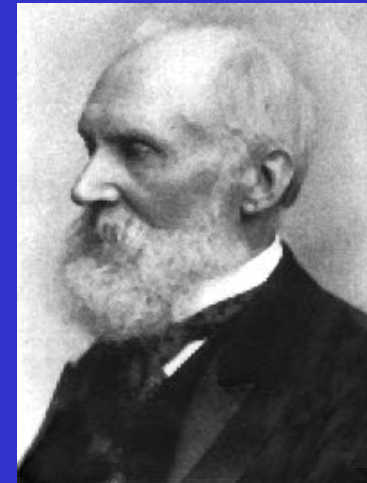
Objemy plynů

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

Frekvence?

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

Základní jednotky SI

1 m = délka dráhy, kterou proběhne světlo ve vakuu za $1/299\,792\,458$ sekundy

1 kg = hmotnost mezinárodního prototypu kilogramu uloženého v Mezinárodním úřadě pro váhy a míry v Sévres u Paříže

1 s = doba rovnající se $9\,192\,631\,770$ periodám záření, které odpovídá přechodu mezi dvěma hladinami velmi jemné struktury základního stavu atomu cesia 133

Základní jednotky SI

**1 A = stálý elektrický proud, který při průchodu dvěma
přímými rovnoběžnými nekonečně dlouhými vodiči
zanedbatelného kruhového průřezu umístěnými ve vakuu
ve vzájemné vzdálenosti 1 metr vyvolá mezi nimi stálou sílu
 $2 \cdot 10^{-7}$ newtonu na 1 metr délky vodiče**

1 K = 1/273.16 termodynamické teploty *trojného bodu vody*

Základní jednotky SI

1 mol = látkové množství soustavy, která obsahuje právě tolik elementárních částic (entit), kolik je atomů v 0.012 kilogramu nuklidu uhlíku ^{12}C (přesně)

1 cd = svítivost zdroje, který v daném směru vysílá monochromatické záření o kmitočtu $540 \cdot 10^{12}$ hertzů a jehož zářivost v tomto směru je $1/683$ wattu na steradián

Násobky – předpony

Y	Yotta	10^{24}
Z	Zetta	10^{21}
E	Exa	10^{18}
P	Peta	10^{15}
T	Tera	10^{12}
G	Giga	10^9
M	Mega	10^6
k	kilo	10^3
1		10^0

Násobky – předpony

1		10^0
m	mili	10^{-3}
μ	mikro	10^{-6}
n	nano	10^{-9}
p	piko	10^{-12}
f	femto	10^{-15}
a	atto	10^{-18}
z	zepto	10^{-21}
y	yokto	10^{-24}

Násobky – předpony

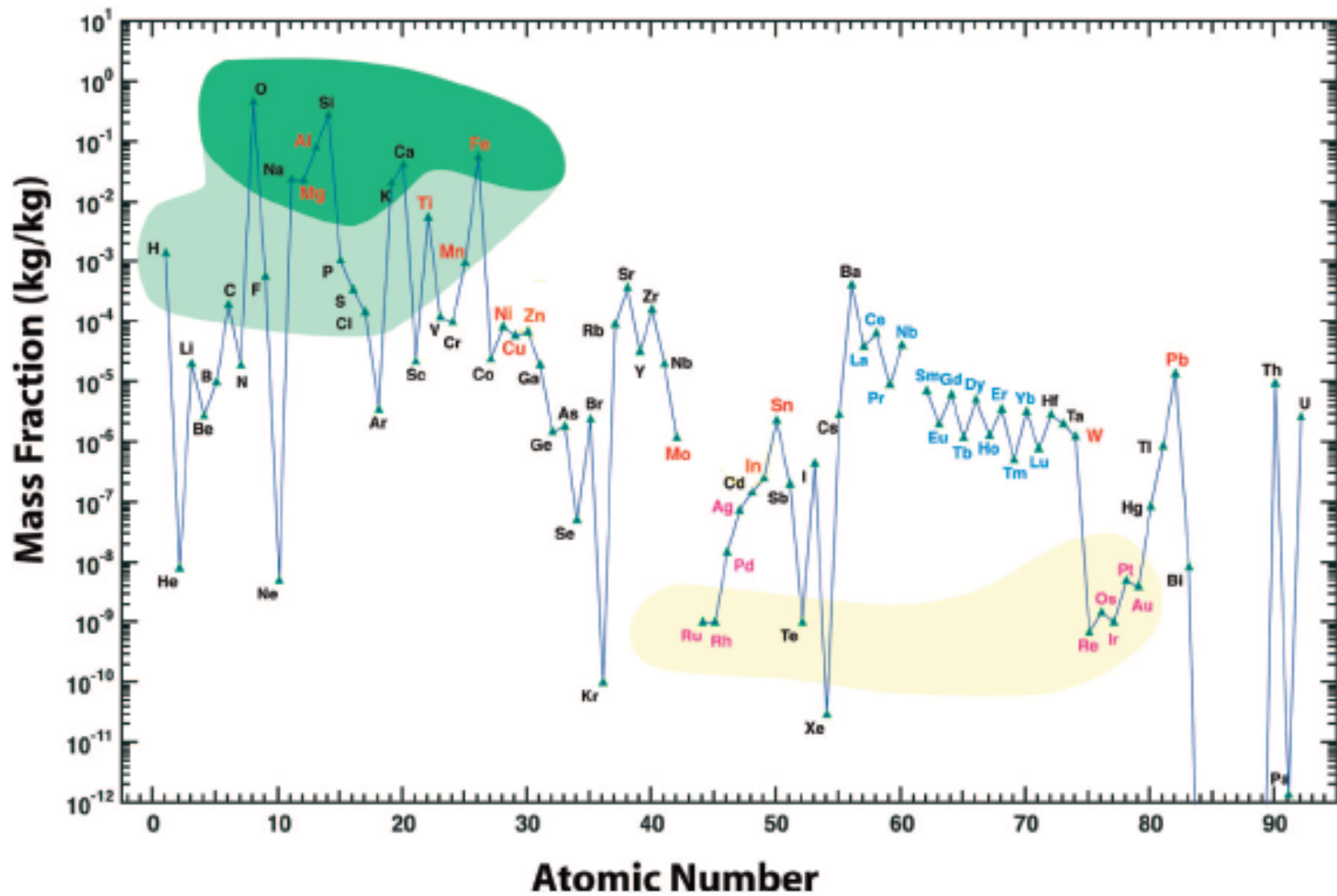
$$\% = 1 \text{ v } 10^2$$

$$\text{‰} = 1 \text{ v } 10^3$$

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

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

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

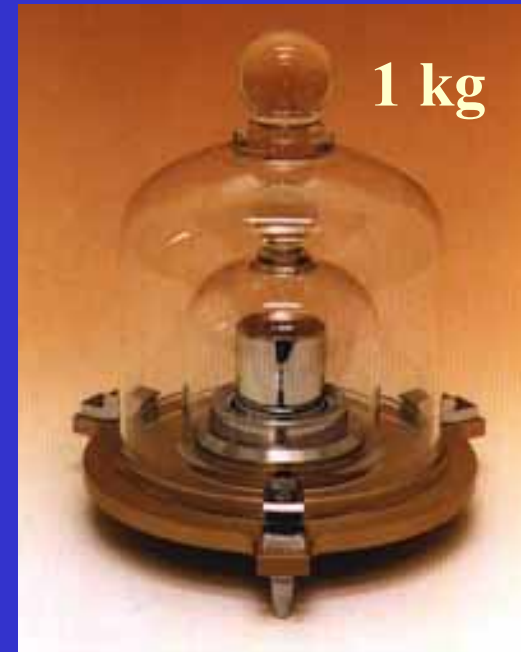


Hmotnost

Atomová hmotnostní jednotka

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

1 amu = 1 u = 1.6606 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 N (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}]

$$\begin{aligned} A_m(^{12}\text{C}) &= 12 \times u \times N_A = \\ &= 12 \times 1.6606 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \times 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1} = \\ &= 0.01200 \text{ kg mol}^{-1} = 12.00 \text{ g mol}^{-1} \end{aligned}$$

Délka

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

$$1 \text{ \AA} = 100 \text{ pm} = 0.1 \text{ nm}$$

Bohrův poloměr

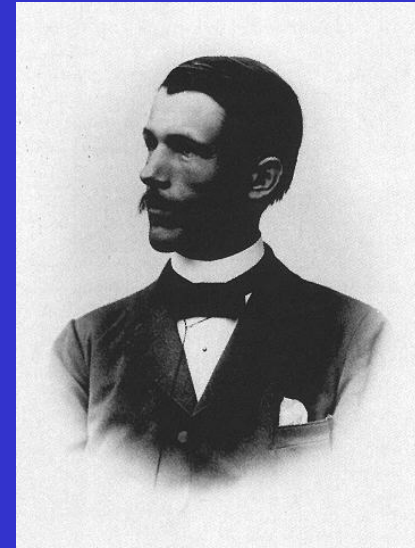
$$a_0 = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m} = 0.53 \text{ \AA}$$

Délky vazeb v molekulách 1 až 4 \AA

Průměr atomu Cu je 2.55 \AA

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)



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

Vazebné vzdálenosti

Vazebné vzdálenosti (v Å)

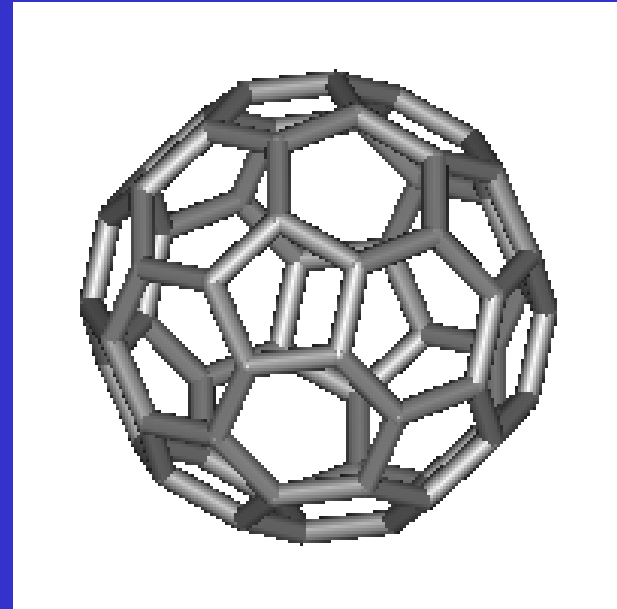
Vazba	CC	CN	CO	CH	NH	OH
Jednoduchá	1.53	1.47	1.42	1.09	1.00	0.96
Dvojná	1.34	1.27	1.21			
Trojná	1.20	1.15				

Kolik pm?

Objem

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

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



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

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

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

[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

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

[g cm⁻³]

Hustota



Hustota závisí na teplotě

Pyknometr

Při 20 °C

Nádoba na dolití IN
Nádoba na vylití EX



Čas

Kinetika dějů, chemických reakcí

Doba, s	Událost
10^{-21}	Jaderné srážky
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

Rychlost

Rychlost světla ve vakuu

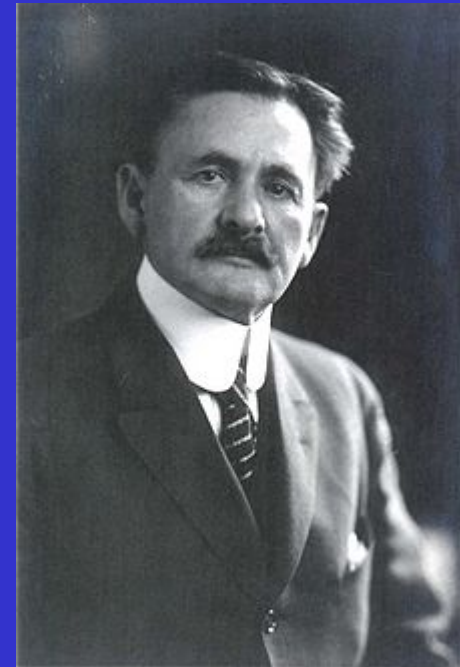
$$c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

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

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

$$E = m c^2$$

$$v \lambda = c$$



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

Frekvence, vlnová délka, vlnočet

Počet periodických dějů za časový interval

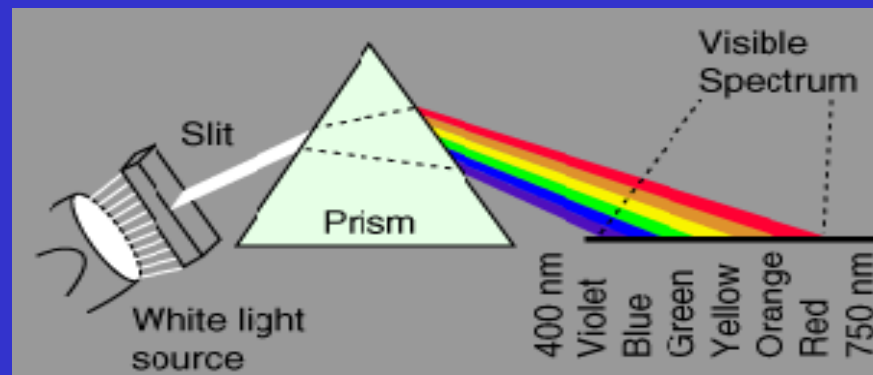
Frekvence $\nu = 1/t$ [Hz = s⁻¹]

Kmity

Vibrace

Rotace

Srážky molekul



Vzdálenost mezi dvěma maximy

Vlnová délka λ [m]

$$\nu \lambda = c$$

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

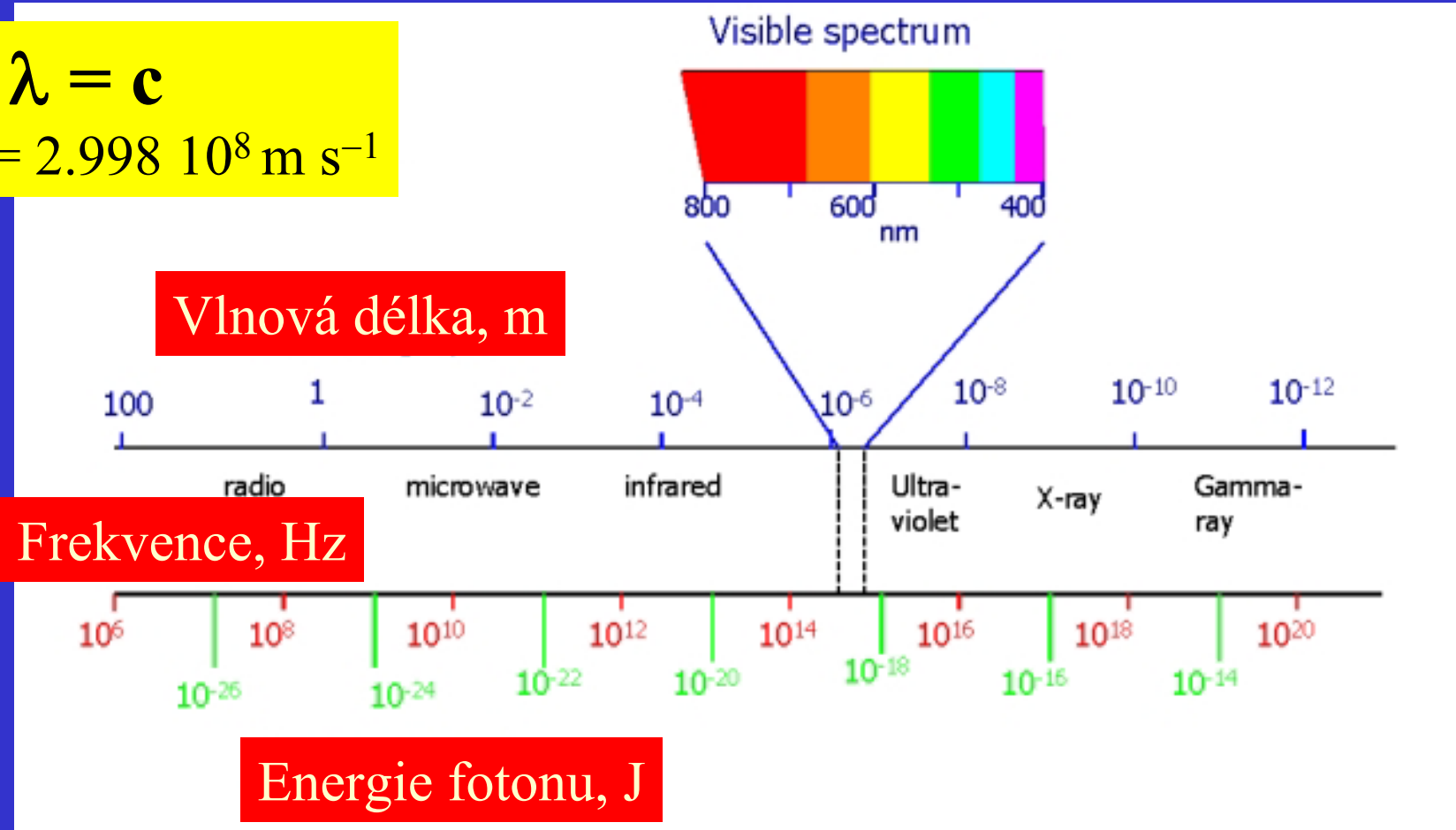
Počet vln na jednotku délky

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

Frekvence, vlnová délka, vlnočet

$$\nu \lambda = c$$

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



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)

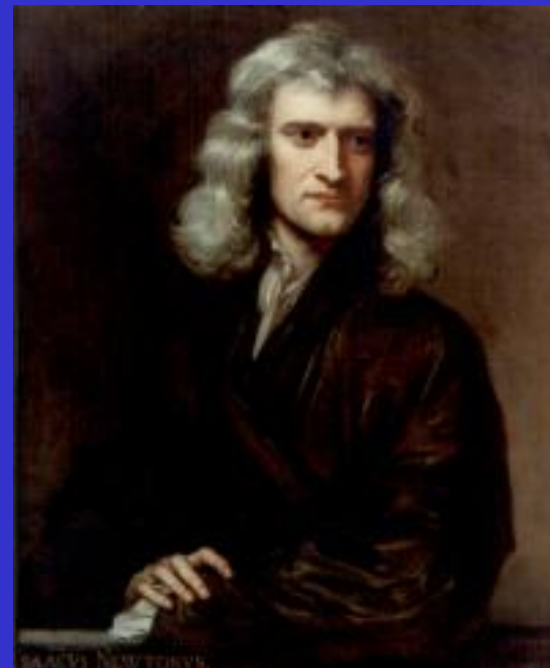
Síla

1 Newton = gravitační síla působící na jablko



$$F = m g$$

$$g = 9.80665 \text{ m s}^{-2}$$



Isaac Newton
(1642 - 1727)

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)

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

Tlak

1 Pascal = tlak kterým působí jablko na 1 m²

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

$$1 \text{ atm} = 101\,325 \text{ Pa} = 760 \text{ mm Hg (Torr)} = 1.01325 \text{ bar}$$

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

Standardní tlak = 1 bar

Teplota

Kelvin, K

Absolutní nula 0 K je nedosažitelná

– 273.15 °C

Současný rekord: ~100 pK

Celsius, °C

0 °C = 273.15 K

$T[°C] = T[K] - 273.15$

Standardní teplota 25 °C = 298 K



Lord Kelvin
(William Thomson)
(1824 - 1907)

Teploměr

1592 Galileo

1629 teploměr plněný brandy

Joseph Solomon Delmedigo, lékař a rabín

Změna fyzikální vlastnosti závislé na teplotě:

- Objemová roztažnost rtuti
- Délková roztažnost kovů
- Elektrický odpor 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 Mezinárodní teplotní stupnice

Trojný bod vody = 273.16 K

ITS-90

ITS-90 Mezinárodní teplotní stupnice

T = Trojný bod

Interpolace

Kalibrace

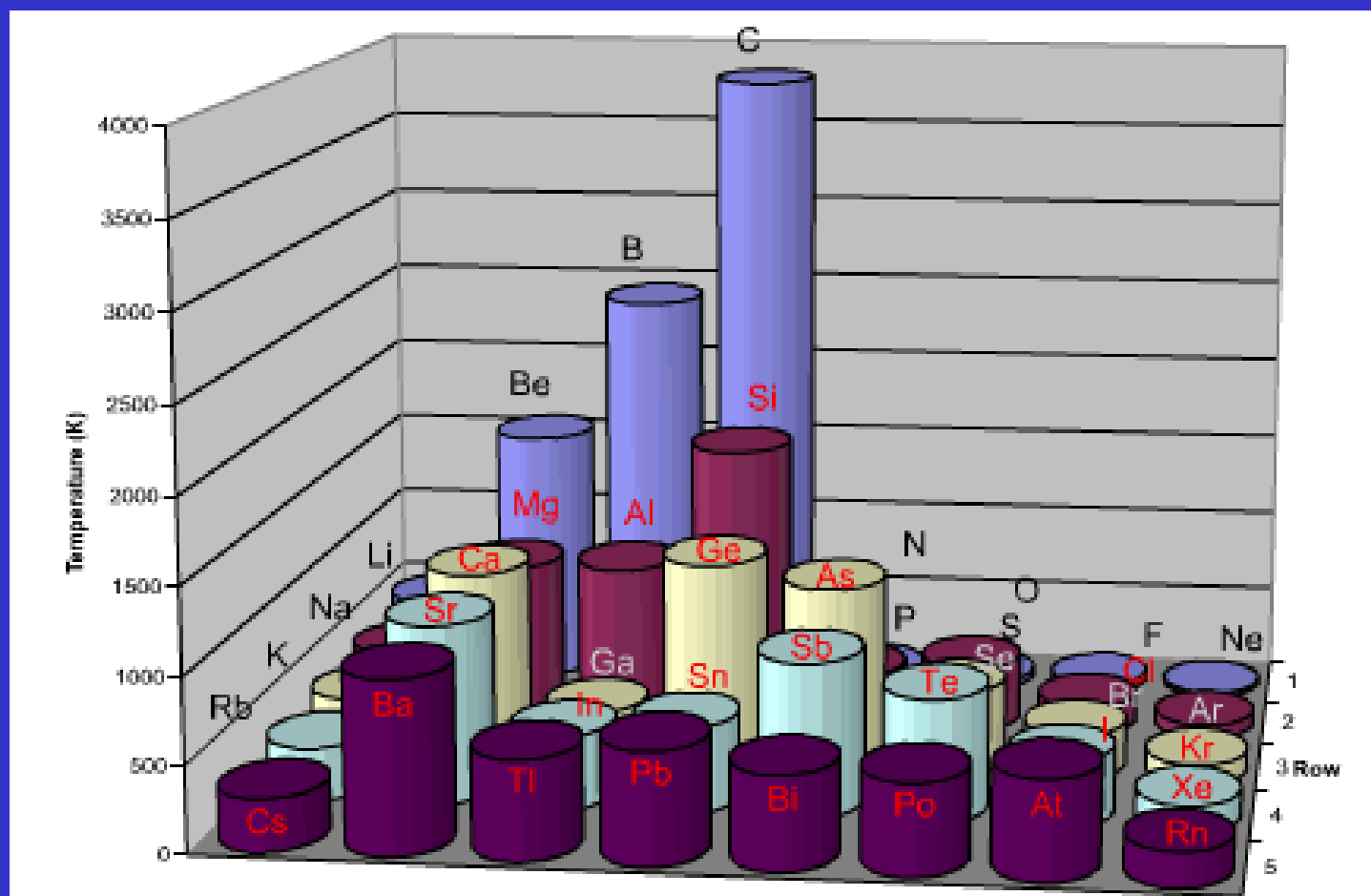
T, K

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

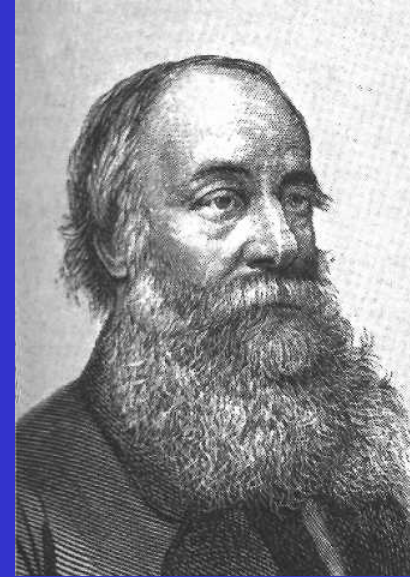
1 Joule = energie úderu lidského srdce

1 cal = 4.184 J

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

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

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



James Prescott Joule
(1818 - 1889)

Energie

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

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

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

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

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

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

$$E = h \nu$$

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

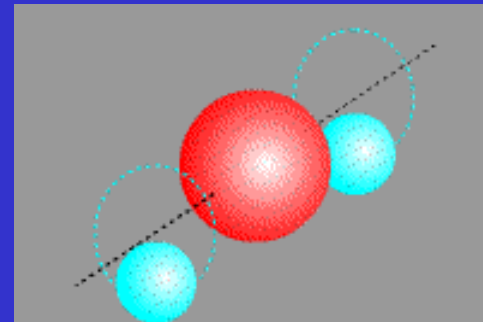
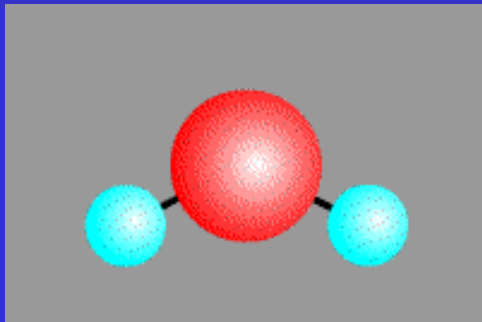
Energie

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

E(elektronová) 100 kJ mol⁻¹

E(vibrační) 1.5 – 50 kJ mol⁻¹

E(rotační) 0.1 – 1.5 kJ mol⁻¹

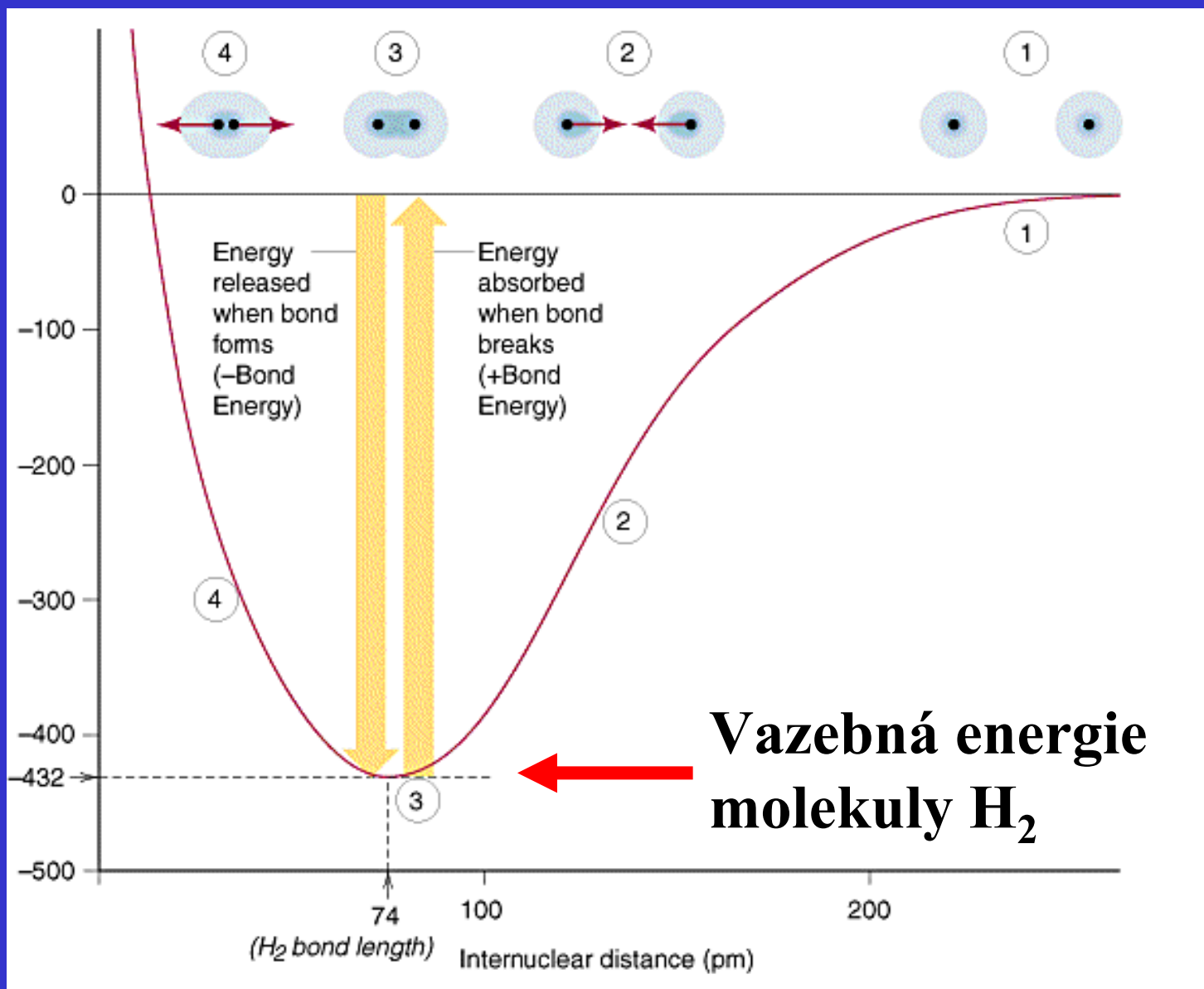


Vazebné energie, kJ mol⁻¹ (jednoduché vazby)

	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

Potenciální energie kJ mol^{-1}



Vazebná vzdálenost v molekule H₂

Měření, platné číslice

Měření = určení velikosti veličiny v daných jednotkách

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

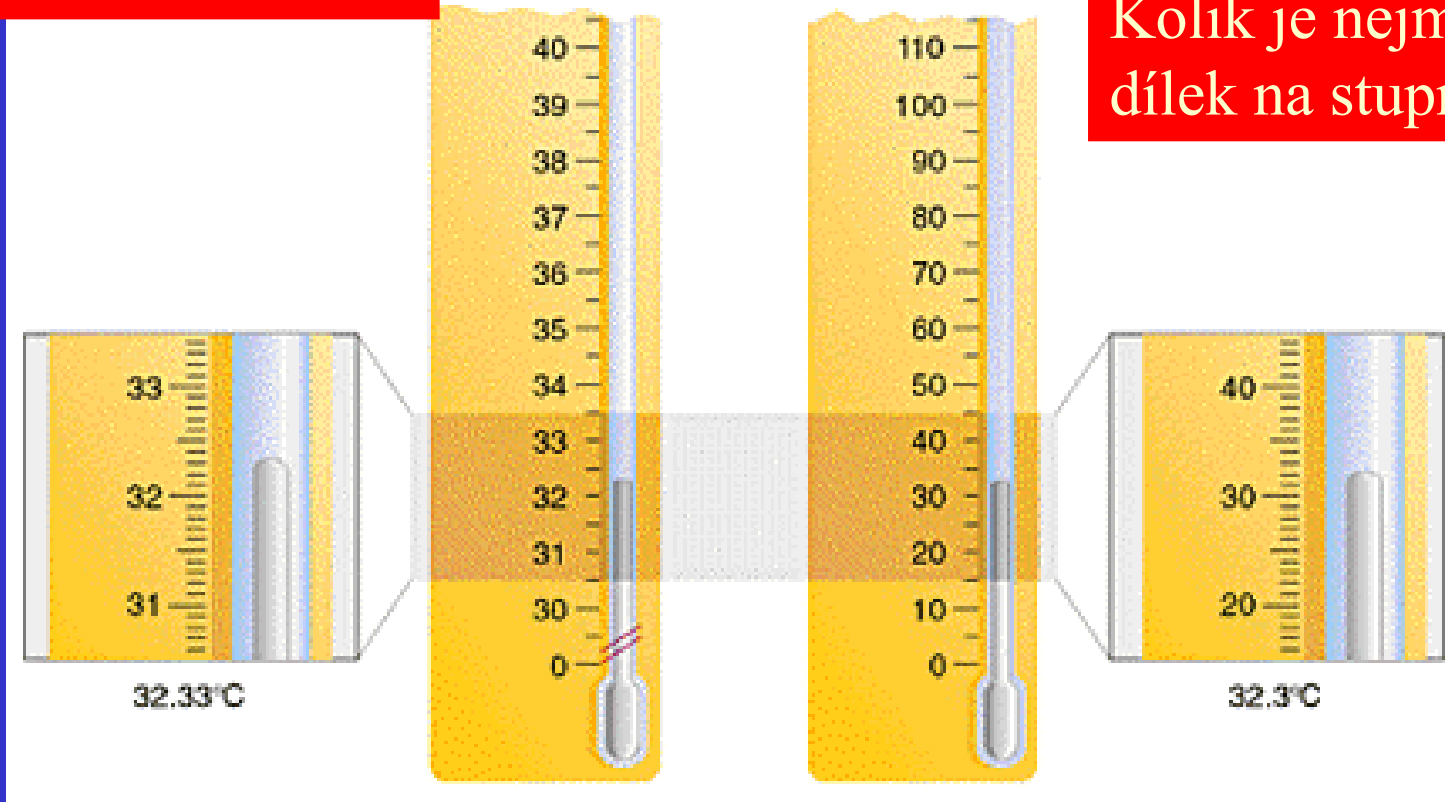
Platné číslice = čísla odečtená ze stupnice + poslední **odhadnuté místo**

**Chybu měření předpokládáme minimálně
 ± 1 posledního místa**

Měření

Před měřením určit

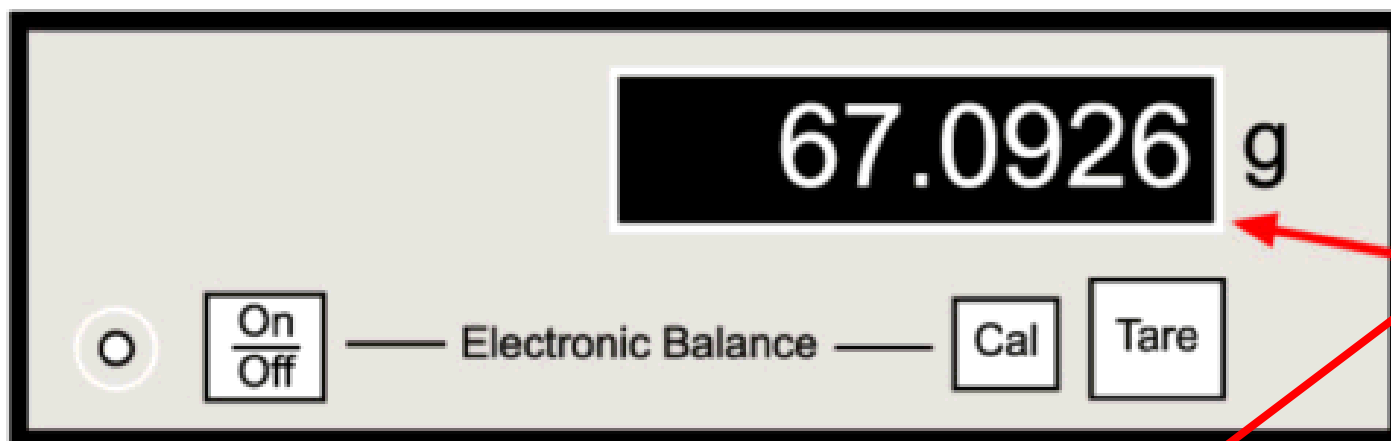
Kolik je nejmenší
dílek na stupnici



32.33 °C

32.3 °C

Odečtení z digitální stupnice



Chybu měření předpokládáme ± 1 posledního místa

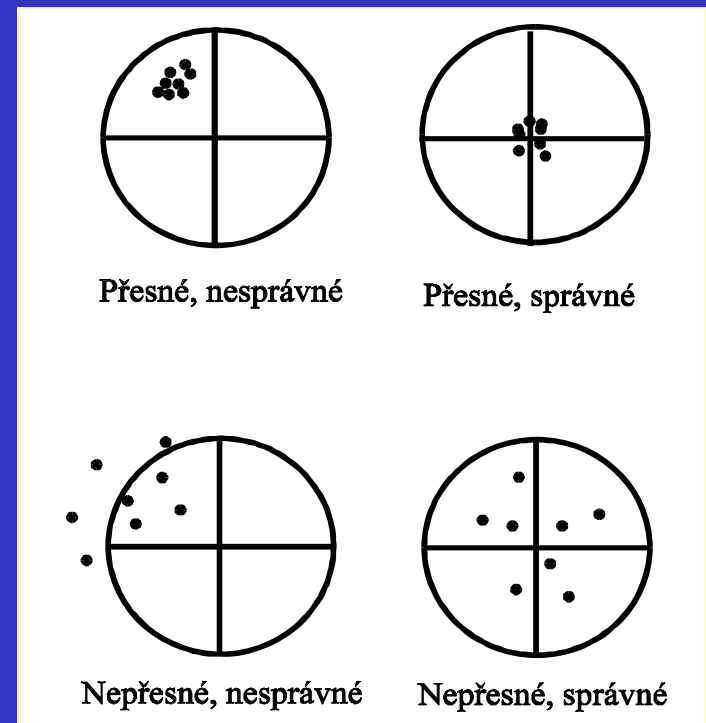
Přesnost a správnost měření

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 měřícího přístroje



Platné číslice

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

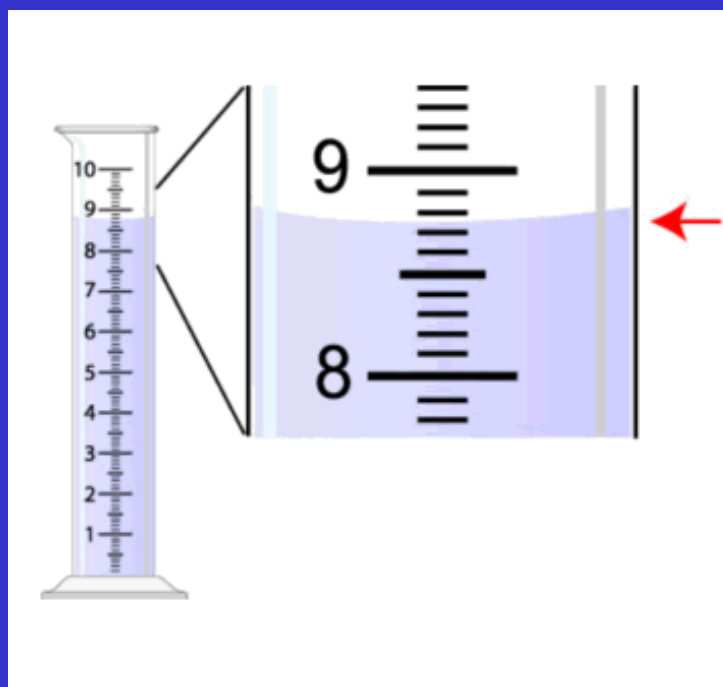
Nuly za nenulovými číslicemi ve výsledku vyjádřeném desetinným číslem *jsou* platnými číslicemi 0.00**3400**

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

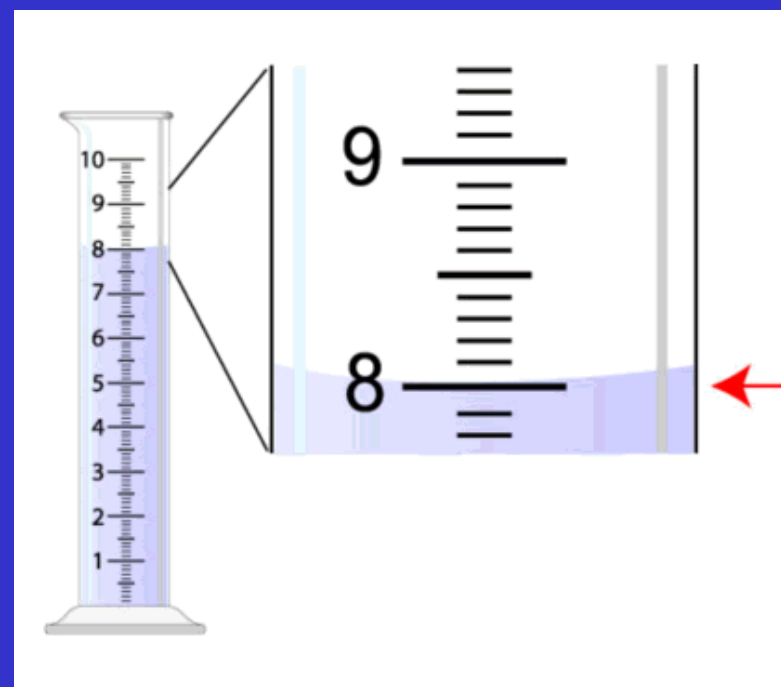
Proto pro jednoznačnost se používá **EXPONENCIÁLNÍ** zápis: jedno místo před desetinnou čárkou, desetinná místa odpovídající přesnosti měření, exponent, jednotka: $1.2 \cdot 10^3$

Platné číslice

Odečtení ze stupnice – počet platných číslic určen kvalitou přístroje



8.75 cm³



8.00 cm³

NE 8 cm³ !!!!

67

čísla odečtená ze stupnice + poslední **odhadnuté** místo

Vážení



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 pravítka 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

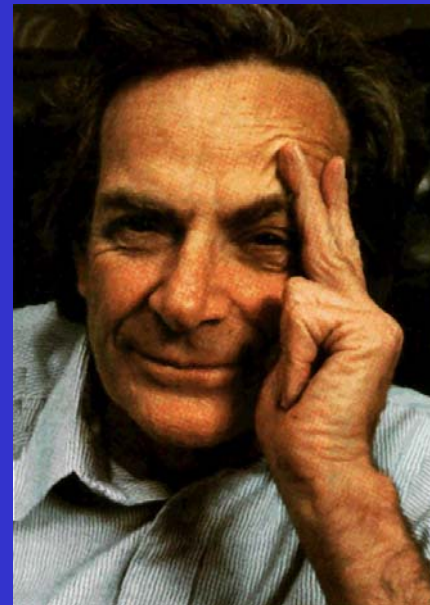
protože chyba prvního měření převyšuje řádově hodnotu druhého měření

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

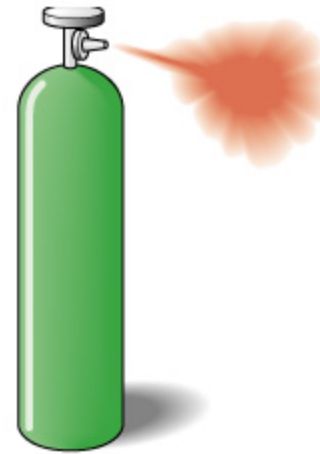
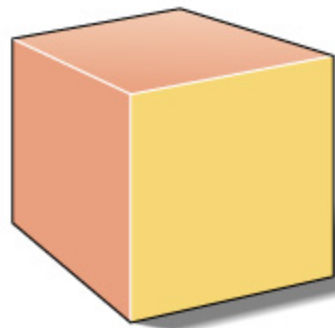
Kapaliny

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



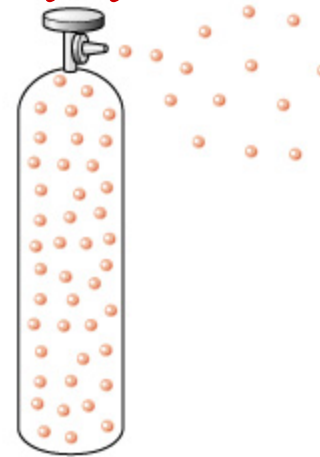
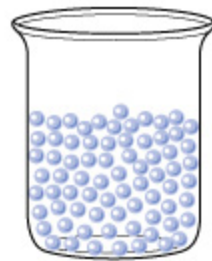
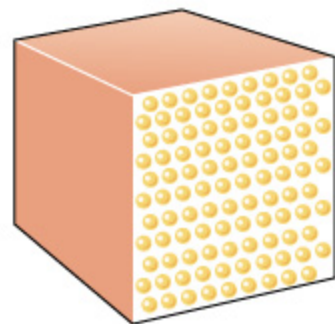


(a)

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.

Zákon je výsledkem přesného měření: **vážení** reaktantů a produktů



Zákon zachování hmotnosti a energie

Hmotnost je mírou gravitačních vlastností a setrvačnosti

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

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

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, CuCO_3

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



Louis Joseph Proust
(1754 - 1826)

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
(=1) jako standardu.



John Dalton
(1766 - 1844)

Oxidy chromu

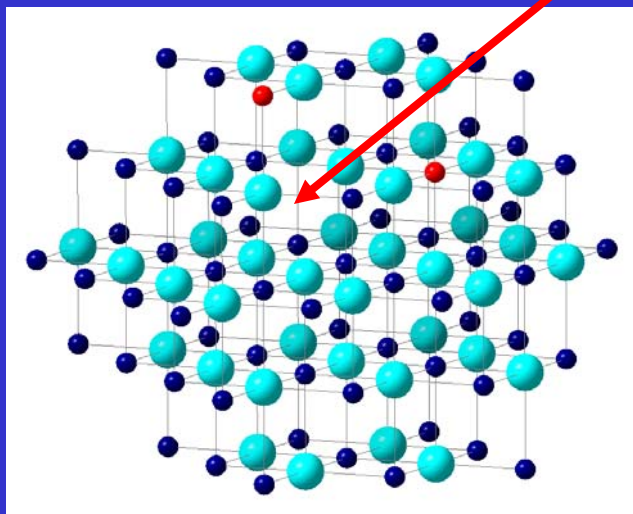
$$r = \frac{m(O)Cr_xO_y}{m(O)CrO}$$

Sloučenina	m(Cr), g	m(O), 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,...



Fe^{2+} = modrá

Fe^{3+} = červená

Vakance = neobsazená pozice



C. L. Berthollet
(1748 - 1822)

Daltonova atomová teorie

1805

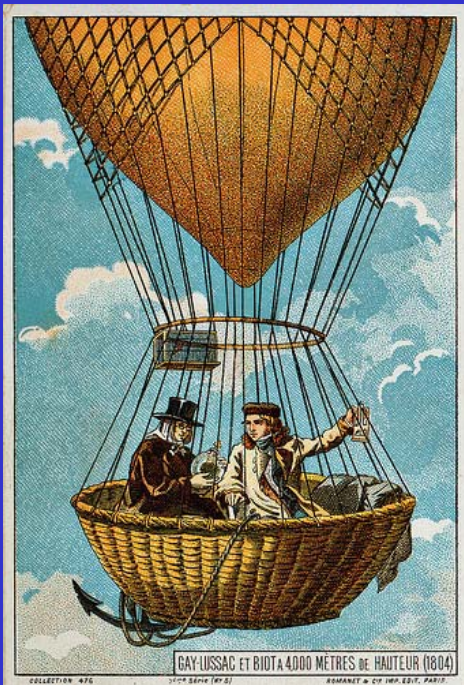
Každý prvek se skládá z malých nedělitelných a nezničitelných částic – atomů (ne pro jaderné přeměny).

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 - teorie



Zákon stálých objemů

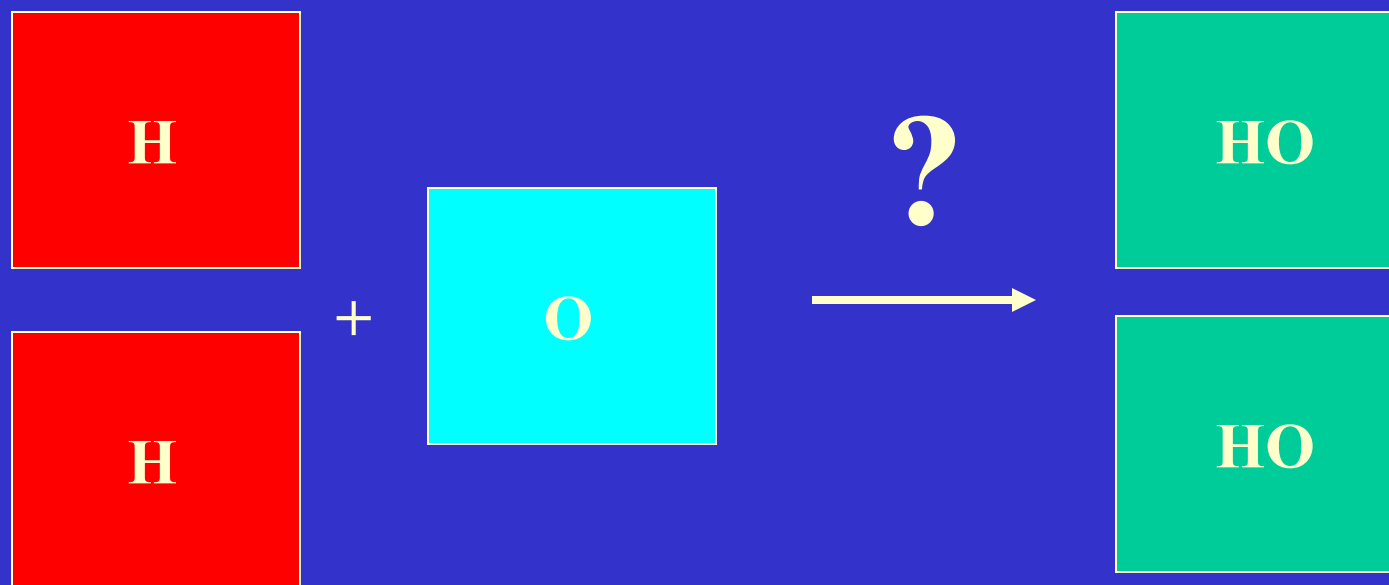
Joseph Louis Gay-Lussac
(1778 - 1850)



1809 Plyny se slučují v jednoduchých poměrech objemových

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

Zákon stálých objemů



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

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

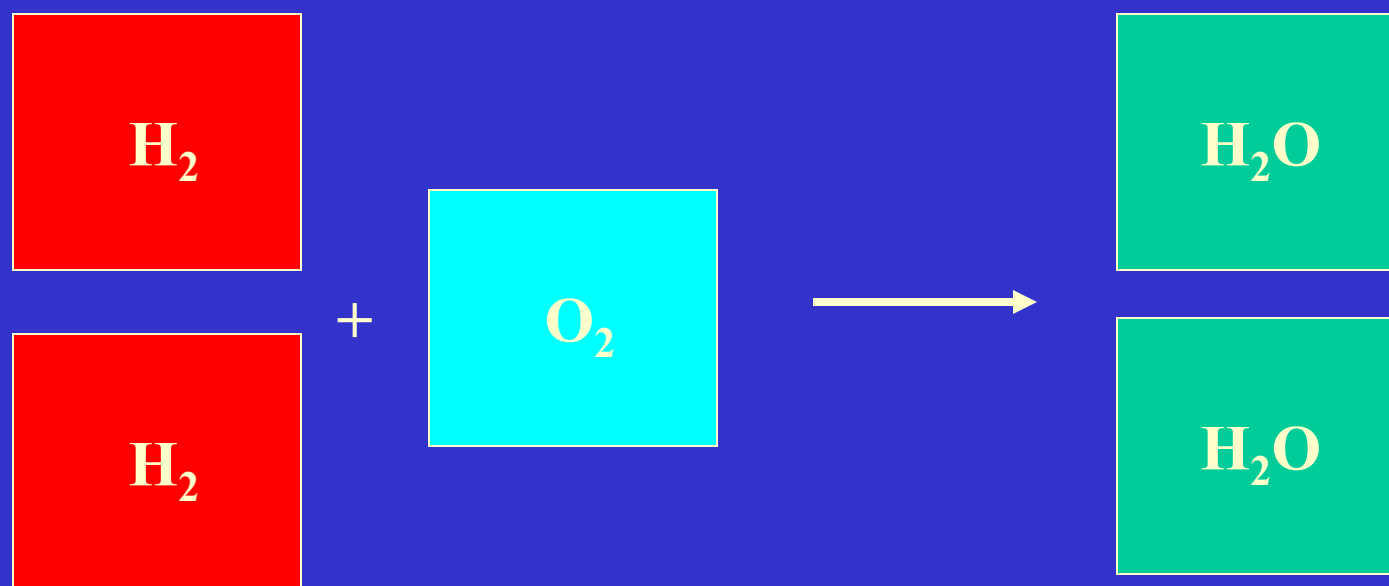
Objem 1 molu plynu je 22.4 litru při 0 °C a 101325 Pa

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



Amadeo Avogadro
(1776 - 1856)

Zákon stálých objemů



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

Avogadrova molekula

Molekuly = nejmenší částice látky schopné samostatné existence
Určují chemické vlastnosti látek.

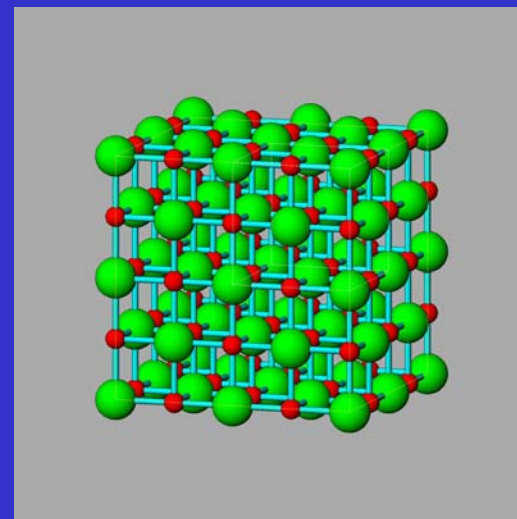
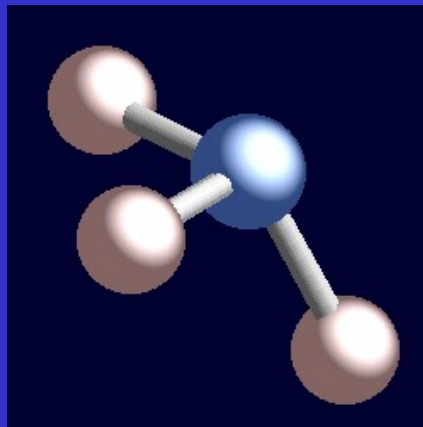
He, Ne, Ar,

N_2 , P_4 (bílý), S_8 , C_{60} ,

BCl_3 , CH_4 , H_2O , NH_3

Nejsou molekuly:

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



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 C = 1 mol
Pak 23.0 g Na = 1 mol
1 mol = 22.4 litru

Změřit kolik částic je v 1 molu (Loschmidt, Perrin,...)
 $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

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 Na_2SO_4

Stechiometrie chemických rovnic



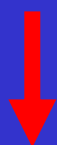
Výpočet Avogadrovy konstanty

Loschmidtovo číslo = počet molekul v jednotce objemu ideálního plynu

1865 z kinetické teorie plynů vypočetl

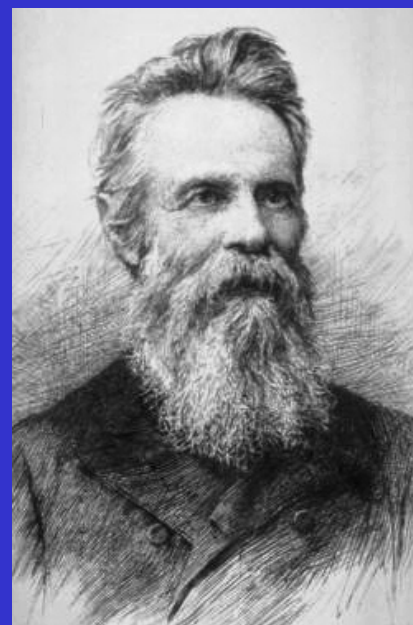
$$n_0 = 2.6 \cdot 10^{19} \text{ molekul cm}^{-3}$$

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



Avogadrova konstanta

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



Johann Josef Loschmidt
(1821 - 1895)

Počerny u KV

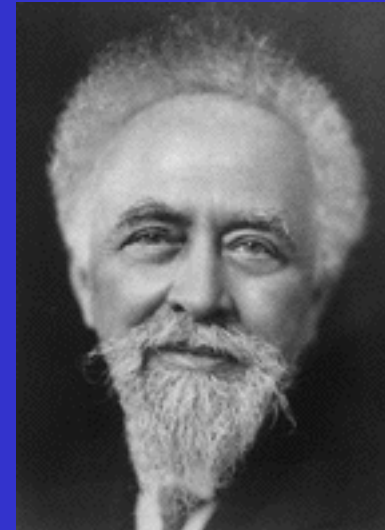
Výpočet Avogadrovy konstanty



Brownův pohyb částic v kapalině
1908 Důkaz existence molekul

Zavedl pojem Avogadrova konstanta
a experimentálně zjistil její hodnotu

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



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

Výpočet Avogadrovy konstanty

Z rentgenové strukturní analýzy Ti 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 $V = a^3$

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

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

