

Seminář z obecné chemie

C1040
podzim 2010

Vyučující: Mgr. Karel Novotný PhD.

Požadavky na zápočet a program seminářů

V podzimním semestru 2010 bude 11 seminářů

- 17. 11. odpadá z důvodu státního svátku

poslední seminář - 8. 12. 2010

Celkem 4 dílčí testy, pokud na nich získá student v průměru nad 50% bodů, pak dostane zápočet a nemusí psát společnou zápočtovou písemku.

Společný zápočtový test pro ty, kteří nedosáhli 50% bodů bude ve čtvrtek 16.12. 2009 v A11/132 od 10-12.00 místo poslední přednášky z Obecné chemie. Tyto testy si vyhodnotí učitelé skupin a udělí zápočty.

Podmínky zápočtu:

- a) 100% docházka, omluvenky dodat na studijní oddělení, musí být vloženy do ISu.
- b) Absolvovat 4 testy, pokud získá v průměru nad 50% bodů, pak nemusí psát společnou zápočtovou písemku.

Skripta: Problémy a příklady z obecné chemie. Názvosloví anorganických sloučenin. (autoři Růžička, Toužín 2010) –
Malé centrum na Kotlářské.

sešit, periodická tabulka a vlastní kalkulačka (mobilní telefon není povolen jako kalkulačka)

Seminář 1.

Příloha 10.1 (str. 143) : Názvy, symboly a atomové hmotnosti prvků

- pravopisné "základnosti"

zdvojená písmena (Ga - Gallium, Y - Yttrium, Pd - Palladium, Te - Tellur)

-th (Ru - Ruthenium, La - Lanthan, Pm - Promethium)

objevené prvky - již kompletně až po 118

schválené názvy pouze do 112

110 - DsDarmstadtium

111 - Rg Roentgenium

112 - Cn Kopernicium

pozor na chyby ve skriptech:

98 - Cf - Kalifornium

41 - Nb - Niob

Používat označení skupin 1 - 18 ARABSKÝMI ČÍSLICEMI !!!!!

Názvosloví anorganických sloučenin

8.1. Obecné principy názvosloví

základní veličinou, na níž je názvosloví anorganické chemie vybudováno, je oxidační číslo prvků

- elektrony přiděleny elektronegativnějšímu partneru
- vodík konvenčně považován za elektropozitivnější
- atom prvku v základním stavu oxidační číslo 0
- vazba mezi atomy téhož prvku nepřispívá k oxidačnímu číslu

Stockovo oxidační číslo římskými číslicemi C(IV) nebo C^{IV}

Ewensovo-Bassetovo číslo arabskými číslicemi s nábojem, u názvů složitějších iontů



kladná oxidační čísla - zakončení příponami (-ný, -natý)

záporné oxidační číslo - koncovka -id, bez ohledu na jeho velikost

8.2. Názvy prvků a jejich skupin

izotopy prvků s výjimkou vodíku nemají samostatné názvy a značky

^1H - protium

^2H nebo D - deuterium

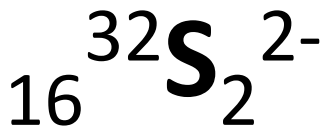
^3H nebo T - tritium

kovy - nekovy

Skupinové názvy:

1	(mimo vodík)	alkalické kovy
2	Ca, Sr, Ba, Ra	kovy alkalických zemin
13	B, Al, Ga, In, Tl	triely
14	C, Si, Ge, Sn, Pb	tetrelly
15	N, P, As, Sb, Bi	pentely
16	O, S, Se, Te, Po	chalkogeny
17	F, Cl, Br, I, At	halogeny
3 + lanthanoidy	Sc, Y, La, Ce až Lu	prvky vzácných zemin
	Ce až Lu	lanthanoidy

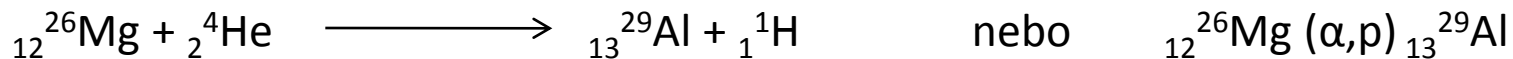
dále: vzácné plyny, přechodné prvky, transurany, aktinoidy



vlevo nahoře - hmotnostní číslo
vlevo dole - atomové (protonové) číslo
vpravo dole - počet atomů v molekule
vpravo nahoře - náboj iontu

disulfidový anion

Vyjadřování jaderných rovnic:



výchozí nuklid, ostřelující částice, vznikající nuklid, emitovaná částice

při zdůraznění, že sloučenina obsahuje určitý izotop:



8.3. Chemické vzorce a názvy sloučenin

stechiometrický

molekulový

funkční

strukturní

elektronový strukturní

geometrický

krystalochemický

ve vzorcích se uvádí elektropozitivní součást na prvním místě, v názvu je pořadí opačné

NaCl ... chlorid sodný

podstatné jméno je odvozeno od elektronegativní části, přídavné jméno je odvozeno od části elektropozitivní

CaSO₄ ... síran vápenatý

Název elektronegativní složky sestávající z atomů jednoho prvku (s výjimkou sloučenin vodíku s nekovy) se tvoří koncovkou **-id**

F⁻ - fluorid, O²⁻ - oxid, S²⁻ - sulfid, S₂²⁻ - disulfid

víceatomová elektronegativní složka - k základy názvu centrálního atomu se připojí zakončení **-an**

SO₄ - síran

SO₃ - siřičitan

elektropozitivní složky v názvech nevalenčních sloučenin, sloučenin s atomovými skupinami zakončenými na **-yl**, složených kationtů nebo některých sloučenin kyslíku se uvádí ve druhém pádu:

peroxid vodíku, tetrakarbonyl niklu, chloristan oxonia

Stechiometrické složení sloučenin se v názvu vyznačuje:

- zakončeními podle oxidačních čísel
- číslovkovými předponami



- Při počtu vyšším než **dvanáct** se číslovkové předpony nahrazují arabskými číslicemi.
- Je-li počet atomů velký, užívá se předpony **poly-**.

K vyznačení počtu větších atomových skupin nebo tam, kde by použití jednoduchých číslovkových předpon vedlo k nejasnostem, se používá násobných číslovkových předpon odvozených od základních číslovkových předpon příponou **-kis**. Je-li název sloučeniny jednoznačný, je možno číslovkové předpony vynechat



- Názvy vodíkatých sloučenin prvků 13. až 16. skupiny periodického systému i sloučenin odvozených se tvoří použitím koncovky **-an**

AlH_3	alan	AsH_3	arsan
BH_3	boran	SbH_3	stiban
B_2H_6	diboran	BiH_3	bismutan
SiH_4	silan	H_2S	sulfan
Si_2H_6	disilan	H_2S_x	polysulfan
PH_3	fosfan	H_2Se	selan
P_2H_4	difosfan	H_2Te	tellan

8.4. Názvy iontů a atomových skupin

- jednoatomové kationty koncovka určená oxidačním číslem

Cu^{2+} - kationt měďnatý

- adice protonu k jednoatomovým aniontům nebo molekule nemající charakter kyseliny **-onium**

H_3O^+ - oxonium

- adice protonu ke kyselině **-acidium**

H_3SO_4^+ - sulfatacidium, H_3SO_3^+ - sulfitacidium

$(\text{H}_3\text{SO}_4)\text{ClO}_4$ - cloristan sulfatacidia

- adice protonu na dusíkaté zásady - **ium**

$\text{NH}_2.\text{NH}_3^+$ - hydrazinium, $\text{N}_2\text{H}_5\text{Cl}$ - chlorid hydrazinia

Jednoatomové a některé víceatomové anionty mají zakončení **-id**

H^- hydrid, D^- deuterid, OH^- hydroxid, S_2^{2-} disulfid, C_2^{2-} acetylid

Se^{2-} selenid, Si^{4-} silicid, Sb^{3-} antimonid, N_3^- azid, N^{3-} nitrid

O^{2-} oxid, O_2^{2-} peroxid, O_2^- hyperoxid, O_3^- ozonid

NH_2^- amid, NH^{2-} imid, N_2H_3^- hydrazid,

CN^- kyanid,

I_3^- trijodid

skupiny se zakončením **-yl**

OH **hydroxyl**

CO **karbonyl**

NO **nitrosyl**

NO₂ **nitryl**

PO **fosforyl**

VO **vanadyl**

SO **thionyl**

SO₂ **sulfuryl**

S₂O₅ **disulfuryl**

SeO **seleninyl**

SeO₂ **selenonyl**

CrO₂ **chromyl**

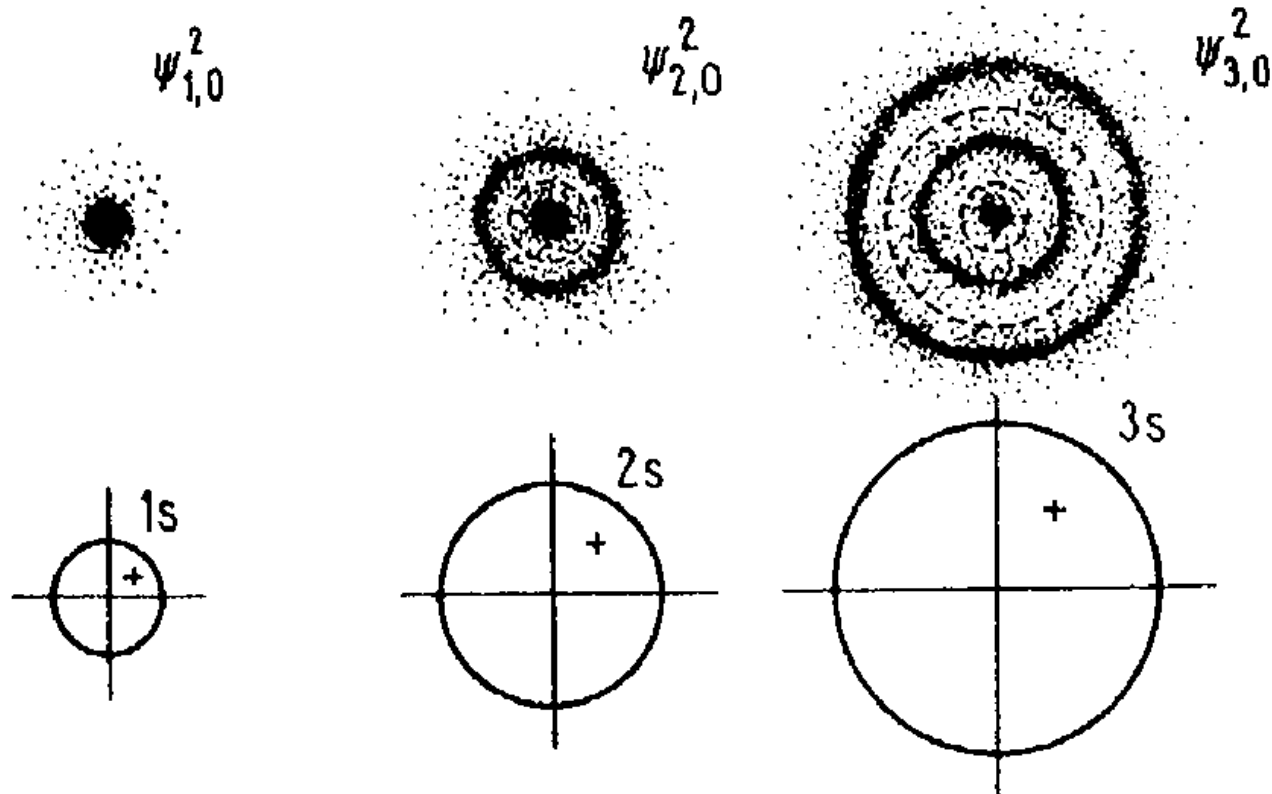
UO₂ **uranyl**

ClO **chlorosyl**

ClO₂ **chloryl**

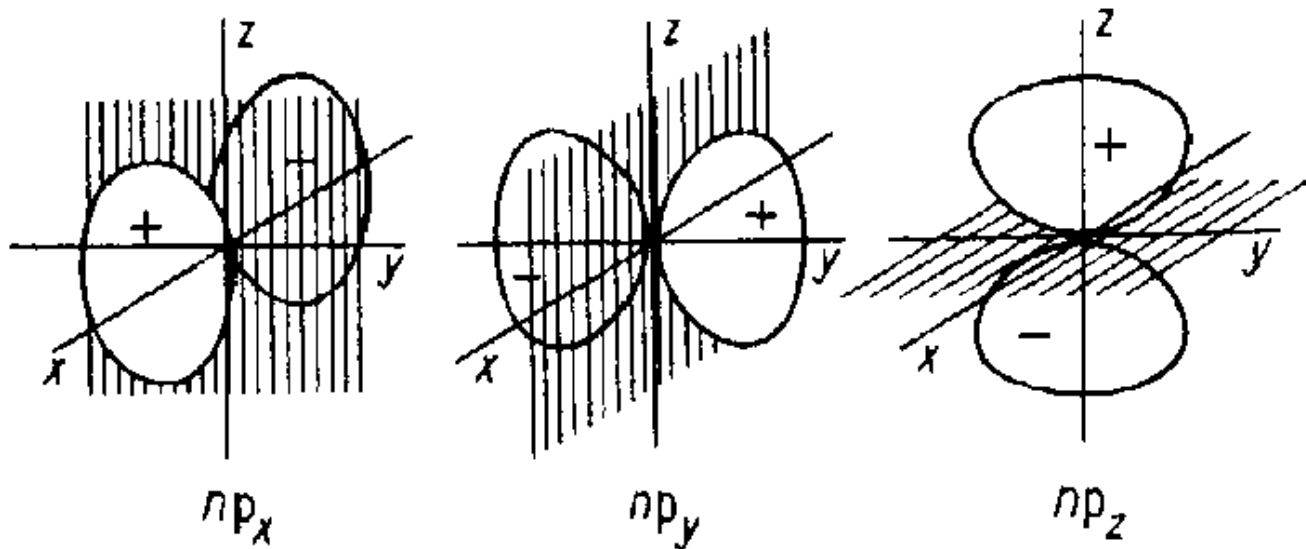
ClO₃ **perchloryl**

Tvary orbitalů s



Nodální (uzlové) plochy - změna znaménka vlnové funkce (u s orbitalů (ns) je $n-1$)
 $1s$ - nemá nodální plochu, $2s$ - jedna, $3s$ - dvě nodální kulové plochy

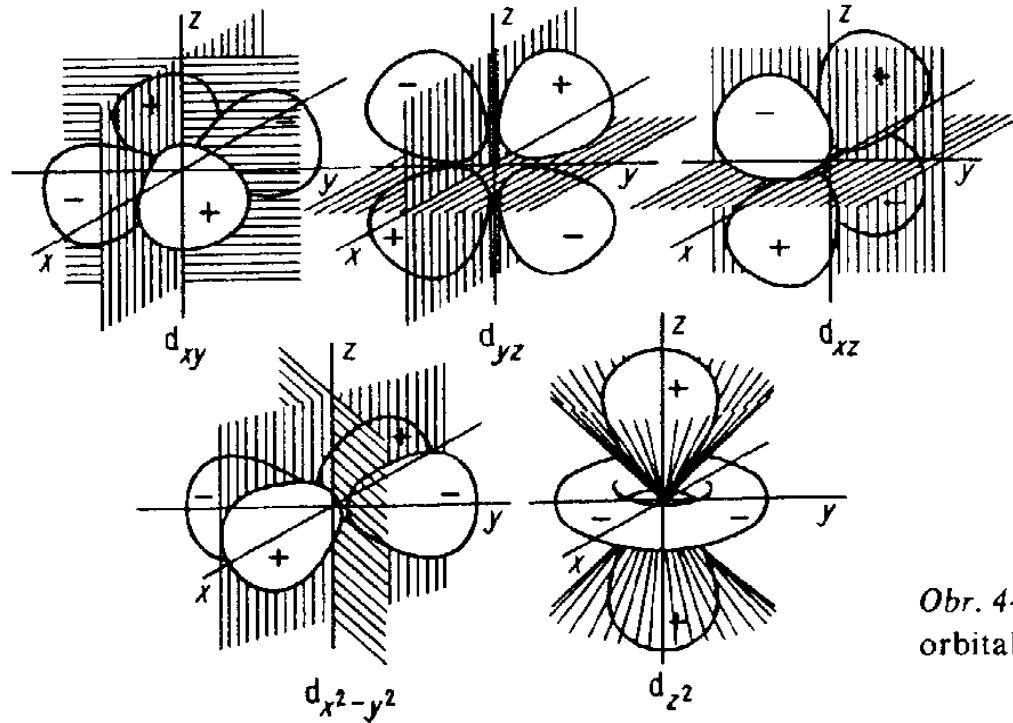
Tvary orbitalů p



tvary jednoduchého dvojvřetena

složitou vnitřní strukturu orbitalů np v případě kdy $n > 2$ zanedbáváme,

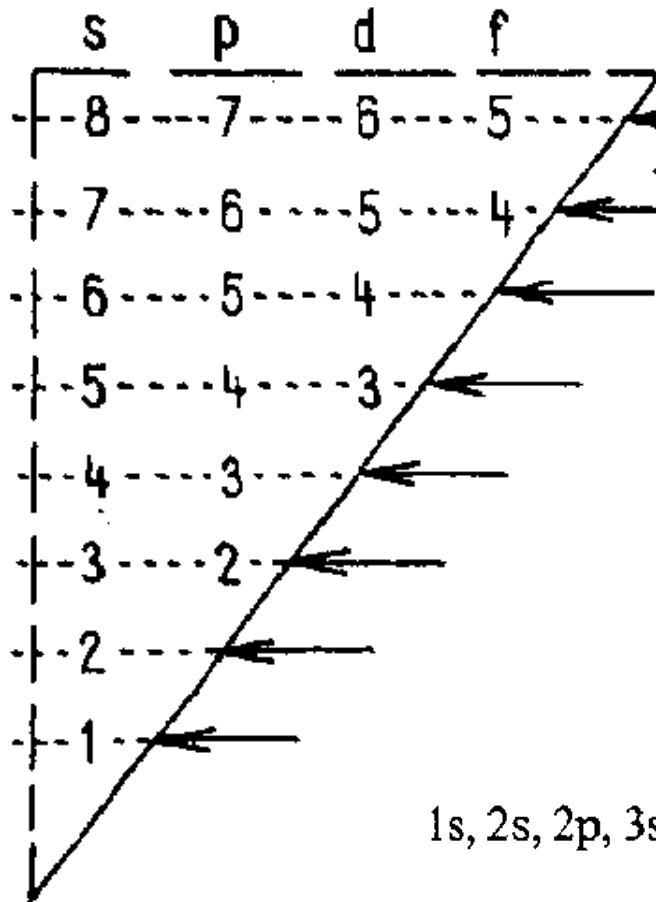
Tvary orbitalů d



Obr. 4-18.
orbitalů d

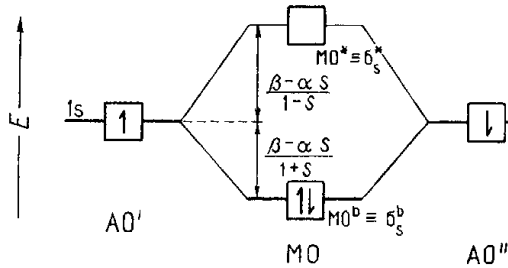
zjednodušené tvary orbitalů d mají vždy dvě nodální plochy

Výstavbový trojúhelník



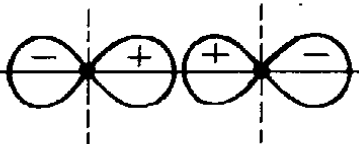
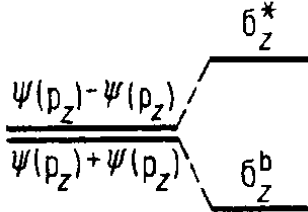
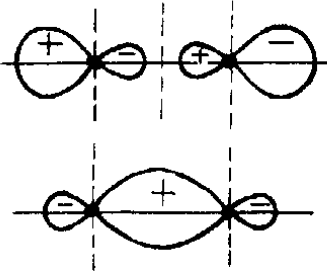
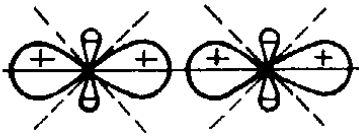
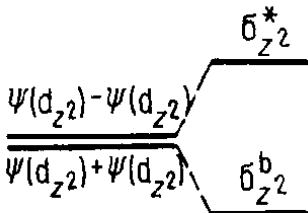
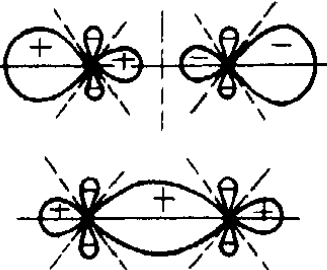
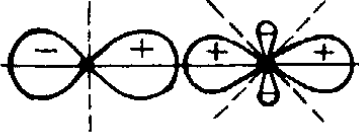
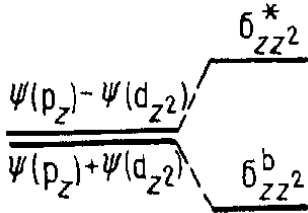
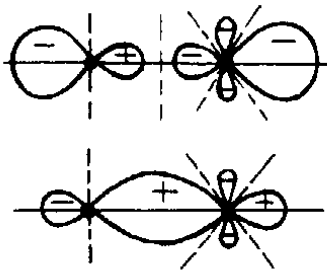
1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d, 5p, 6s, 4f, 5d, 6p, ...

Překryvy orbitalů

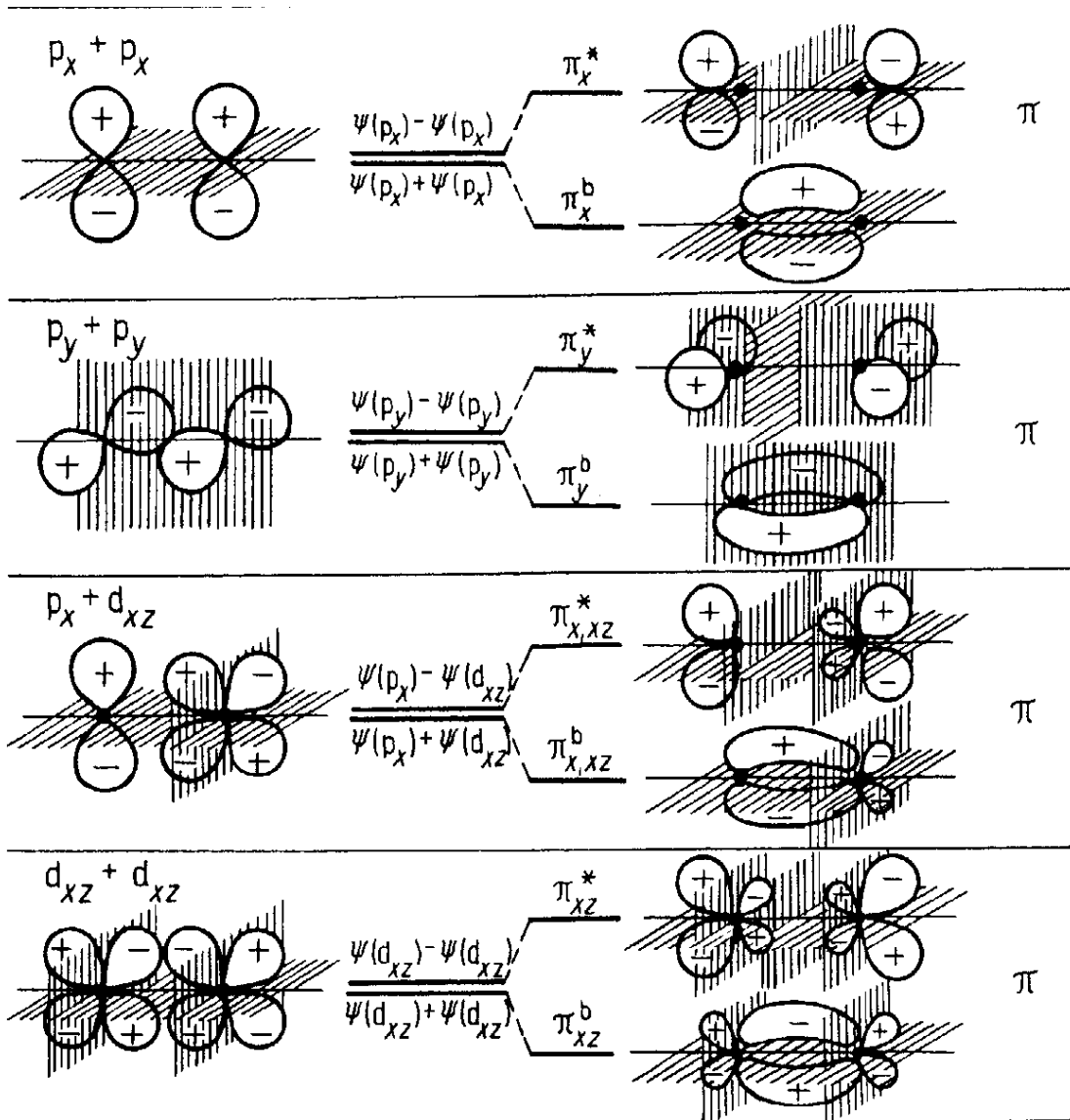


Kombinace AO	Energie	Tvar MO	Typ MO
$s + s$ 	$\frac{\psi(s) - \psi(s)}{\psi(s) + \psi(s)}$ 	 	σ
$s + p_z$ 	$\frac{\psi(s) - \psi(p_z)}{\psi(s) + \psi(p_z)}$ 	 	σ
$s + d_{z^2}$ 	$\frac{\psi(s) - \psi(d_{z^2})}{\psi(s) + \psi(d_{z^2})}$ 	 	σ

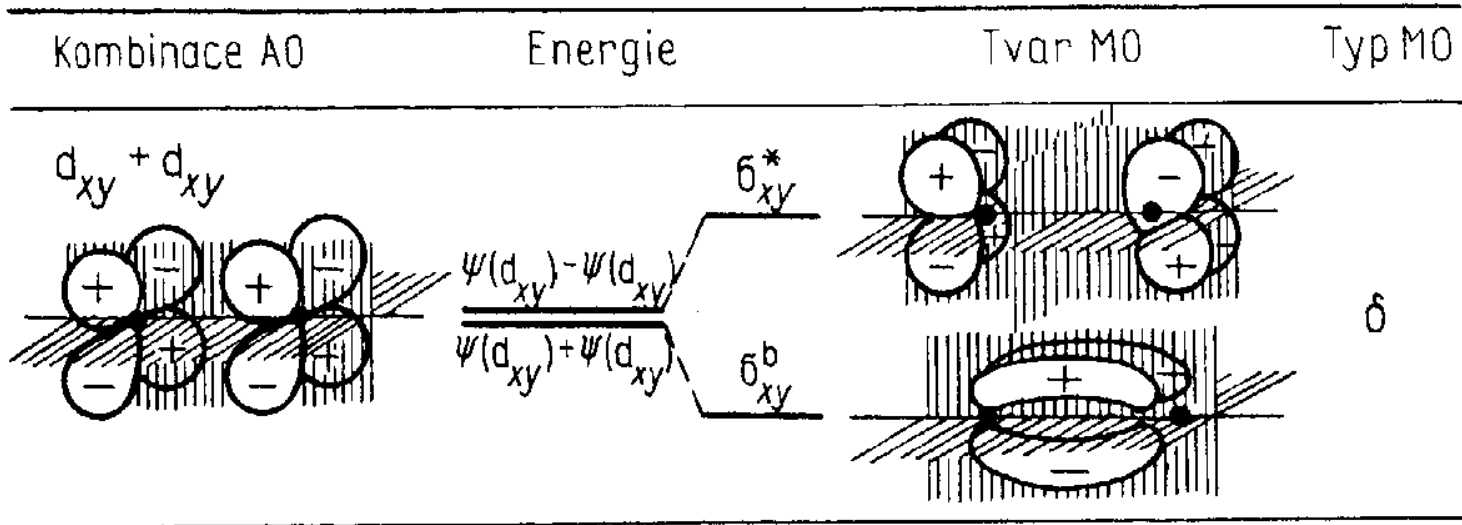
Překryvy orbitalů

Kombinace AO	Energie	Tvar MO	Typ MO
$p_z + p_z$ 	$\frac{\psi(p_z) - \psi(p_z)}{\psi(p_z) + \psi(p_z)}$ 		σ
$d_{z^2} + d_{z^2}$ 	$\frac{\psi(d_{z^2}) - \psi(d_{z^2})}{\psi(d_{z^2}) + \psi(d_{z^2})}$ 		σ
$p_z + d_{z^2}$ 	$\frac{\psi(p_z) - \psi(d_{z^2})}{\psi(p_z) + \psi(d_{z^2})}$ 		σ

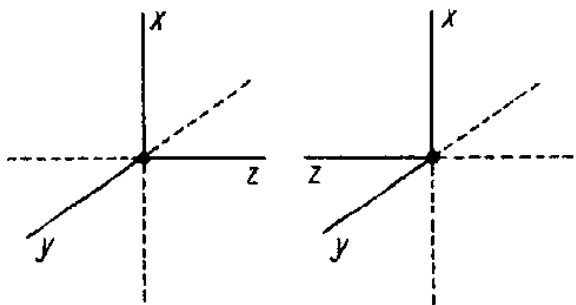
Překryvy orbitalů



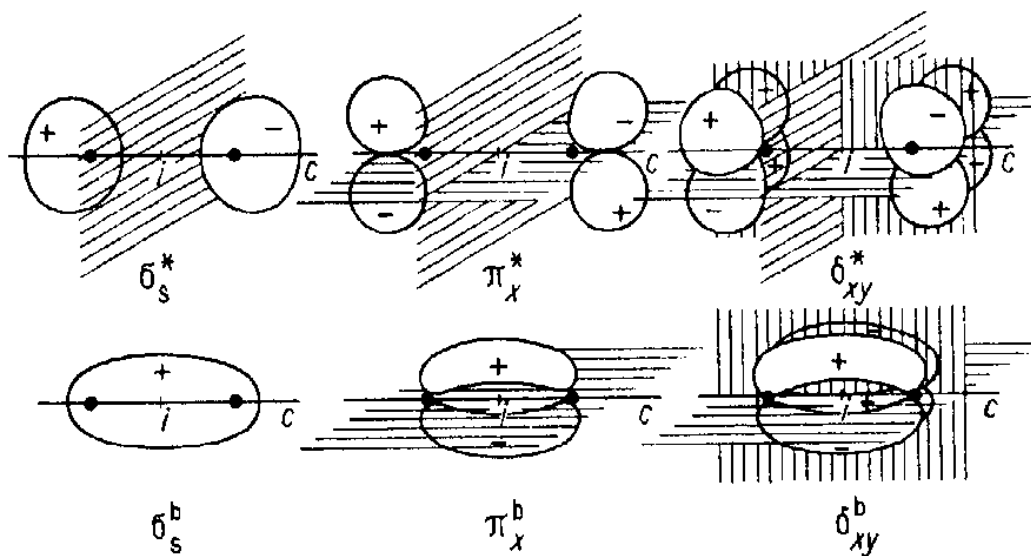
Překryvy orbitalů



Překryvy orbitalů



Obr. 5-9. Smluvený souřadný systém dvouatomové molekuly

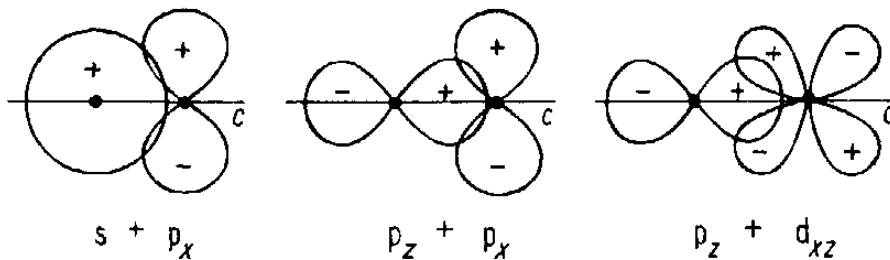


Obr. 5-10. Vazebné i protivazebné MO typu σ , π a δ . Šrafováním jsou vyznačeny nodální plochy, černé kroužky jsou jádra atomů

Překryvy orbitalů

Tabulka 5-2. Přehled účinných překryvů v systému AO s, p a d

AO			
m_l AO	0	± 1	± 2
Typ MO	σ	π	δ



Obr. 5-11. Neúčinný překryv AO ($S = 0$)

Tabulka 5-3. Indexy geneze MO a jejich význam

σ	Kombinace AO	$s + s$	$p_z + p_z$	$d_{z^2} + d_{z^2}$	$s + p_z$	$s + d_{z^2}$	$p_z + d_{z^2}$
	Index	s	z	z^2	s, z	s, z^2	z, z^2

π	Kombinace AO	$p_x + p_x$	$p_y + p_y$	$d_{xz} + d_{xz}$	$d_{yz} + d_{yz}$	$p_x + d_{xz}$	$p_y + d_{yz}$
	Index	x	y	xz	yz	x, xz	y, yz

δ	Kombinace AO	$d_{xy} + d_{xy}$	$d_{x^2-y^2} + d_{x^2-y^2}$
	Index	xy	$x^2 - y^2$

Příklady značení MO:

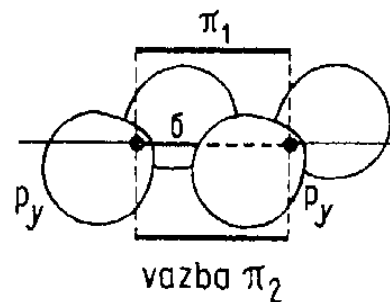
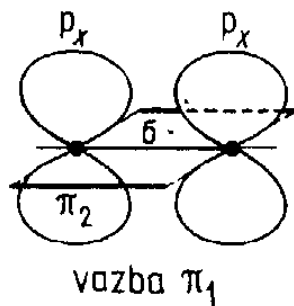
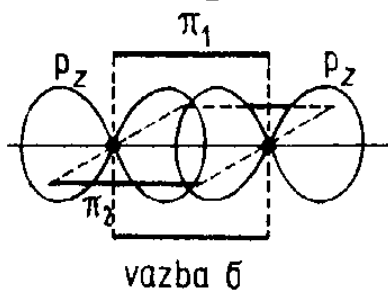
$\sigma_{s,z}^b$ je vazebný MO typu σ vzniklý kombinací AO typu s a AO p_z

$\pi_{y,yz}^*$ je protivazebný MO typu π vzniklý kombinací AO p_y a d_{yz}

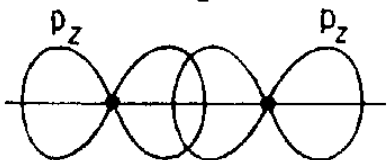
$\delta_{x^2-y^2}^b$ je vazebný MO typu δ vzniklý kombinací dvou AO $d_{x^2-y^2}$

π_x je nevazebný MO představovaný v podstatě nezměněným AO p_x

molekula N_2



molekula F_2



vazby π nejsou přítomny

Obr. 5-17. Vazby σ a π v jednoduchých molekulách prvků

VSEPR

Volné elektronové páry a jednotlivé vazby zaujmou v prostoru kolem centrálního atomu uspořádání s nejnižší energií, tj. s nejmenším odpuzováním mezi elektronovými páry:

centrální atom + 2 ligandy

centrální atom + 3 ligandy

centrální atom + 4 ligandy

centrální atom + 5 ligandů

centrální atom + 6 ligandů

centrální atom + 7 ligandů

lineární

rovnostranný trojúhelník

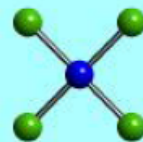
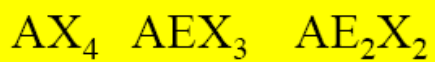
tetraedr

trigonální bipyramida nebo
čtvercová pyramida

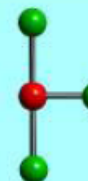
oktaedr

pentagonální bipyramida

VSEPR

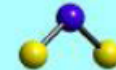
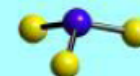


6

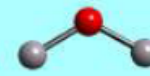


5

4



3



2



VSEPR

Pro **pojmenování** výsledného tvaru molekuly uvažujeme **jen polohy jader**, NE volné elektronové páry

Objem obsazený vazebnými el.páry klesá v řadě :

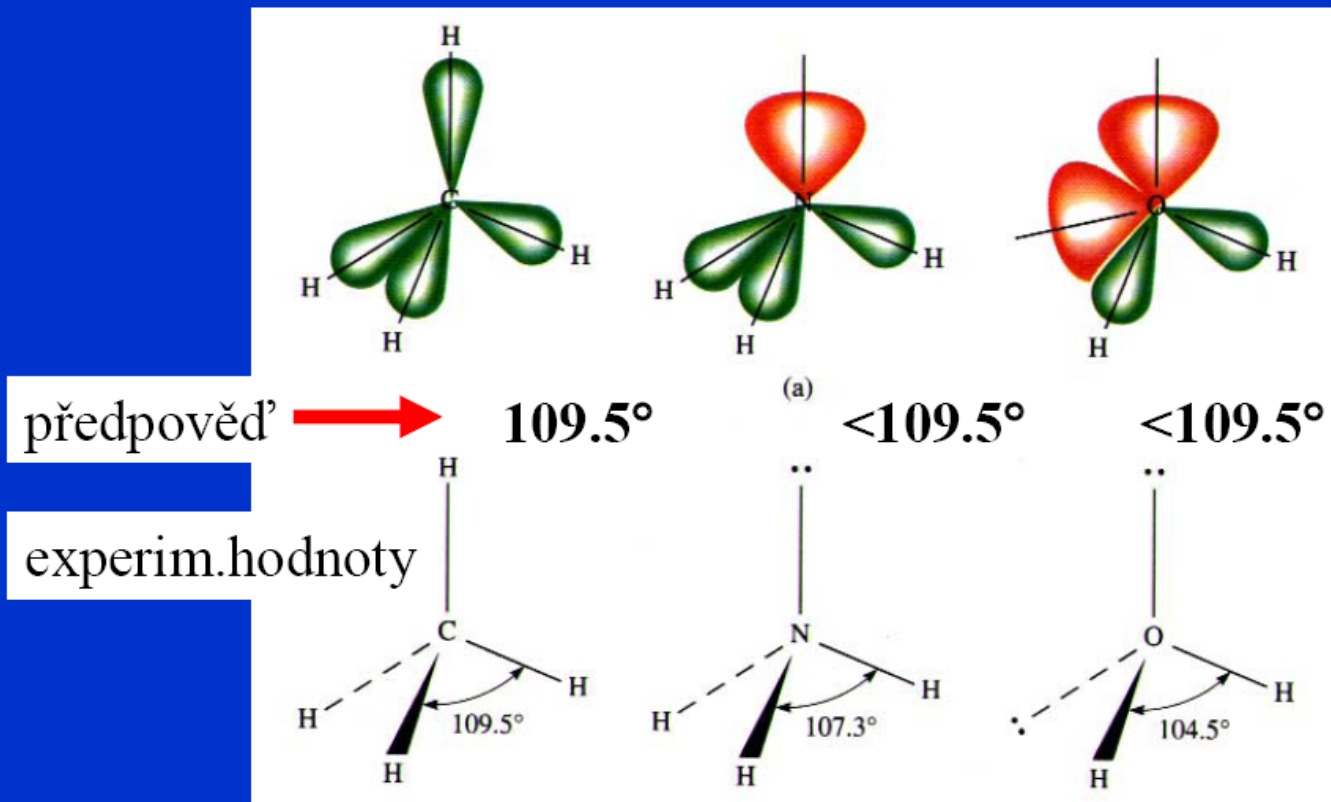
trojná vazba > dvojná vazba > jednoduchá vazba.

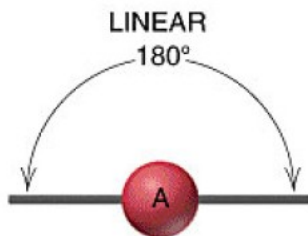
Odpuzování mezi el.páry klesá v řadě:

volný-volný > volný-vazebný > vazebný-vazebný

Změny vazebných úhlů

VSEPR předpovídá změnu vazebného úhlu od ideální hodnoty
Ne však numerickou hodnotu vazebného úhlu



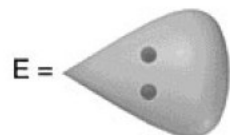


Class	Shape
-------	-------

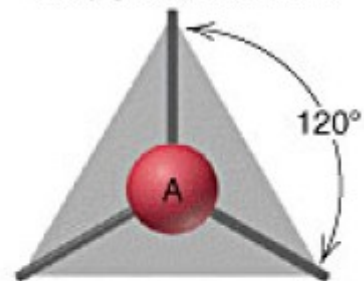
AX_2	
--------	--



Examples: CS_2 , HCN , BeF_2

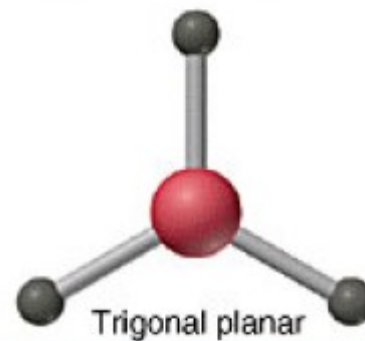


TRIGONAL PLANAR



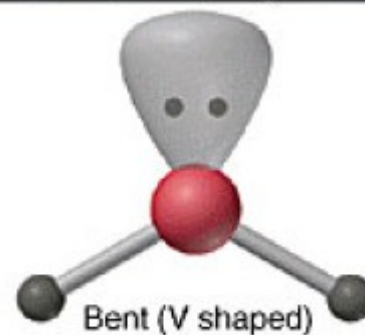
Class	Shape
-------	-------

AX_3	
--------	--



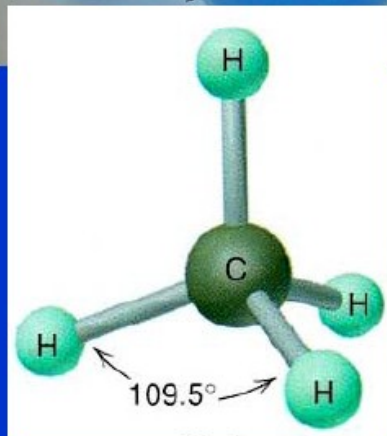
Examples: SO_3 , BF_3 , NO_3^- , CO_3^{2-}

AX_2E	
---------	--

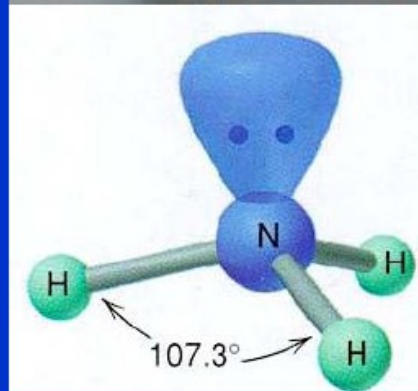


Examples: SO_2 , O_3 , $PbCl_2$, $SnBr_2$

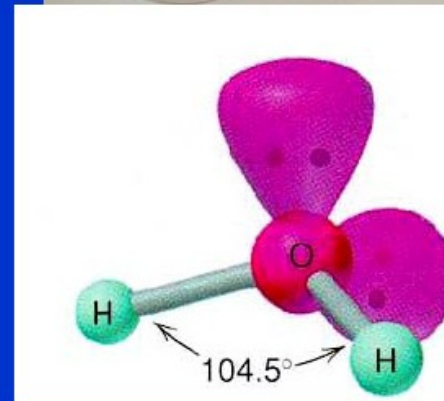
Deformace vazebných úhlů



Tetraedr

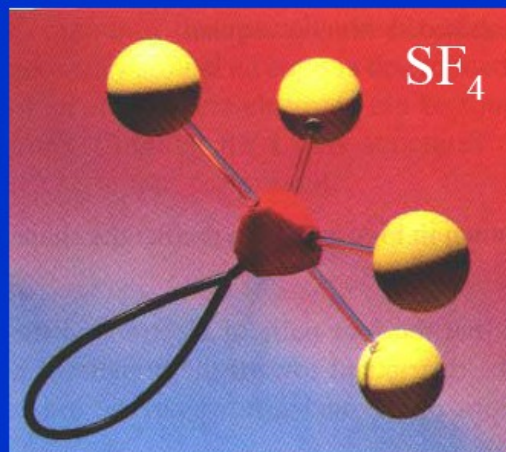
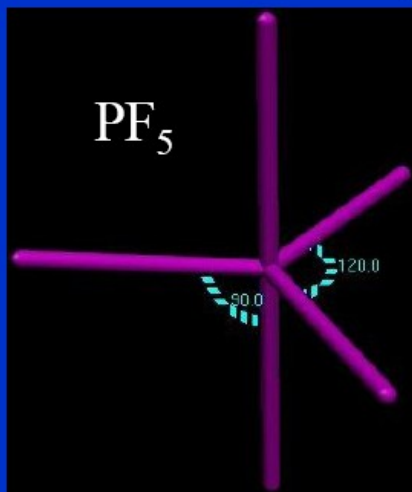


Trojboká pyramida

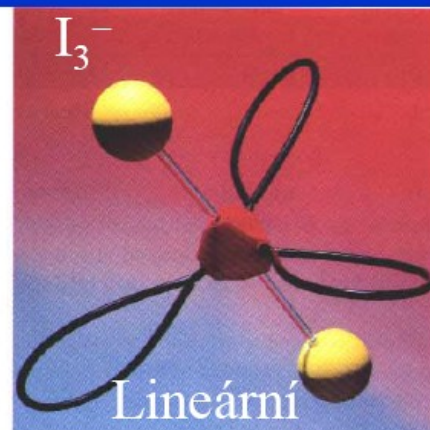
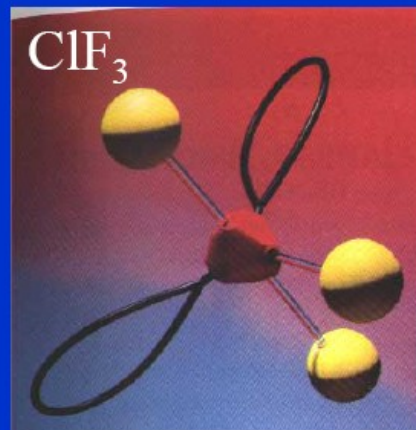
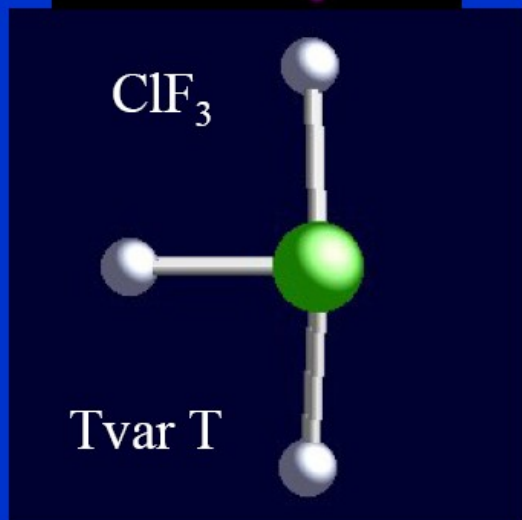


Lomená

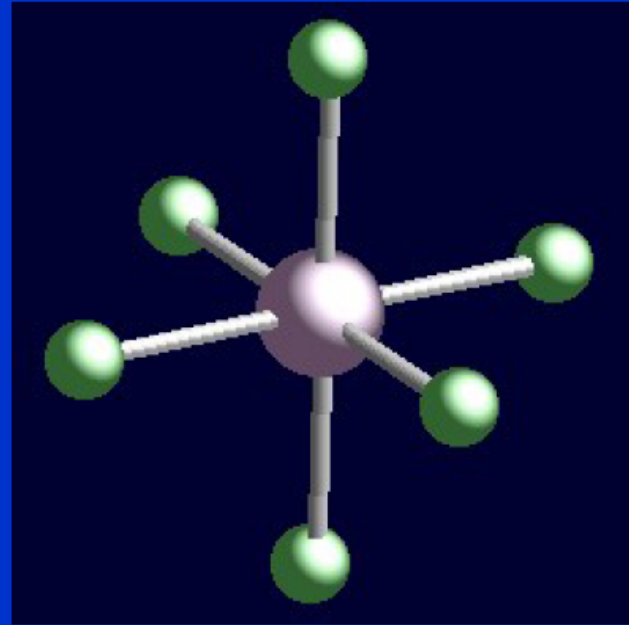
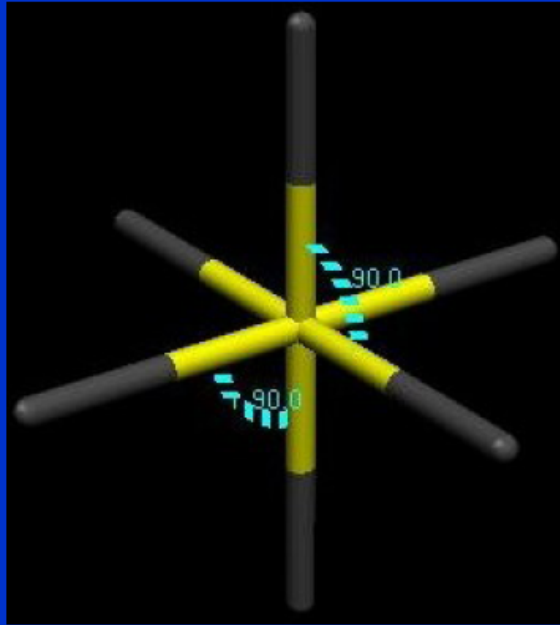
Trigonální bipyramida



Výsledný název tvaru molekuly určuje poloha jader, neuvažujeme volné elektronové páry

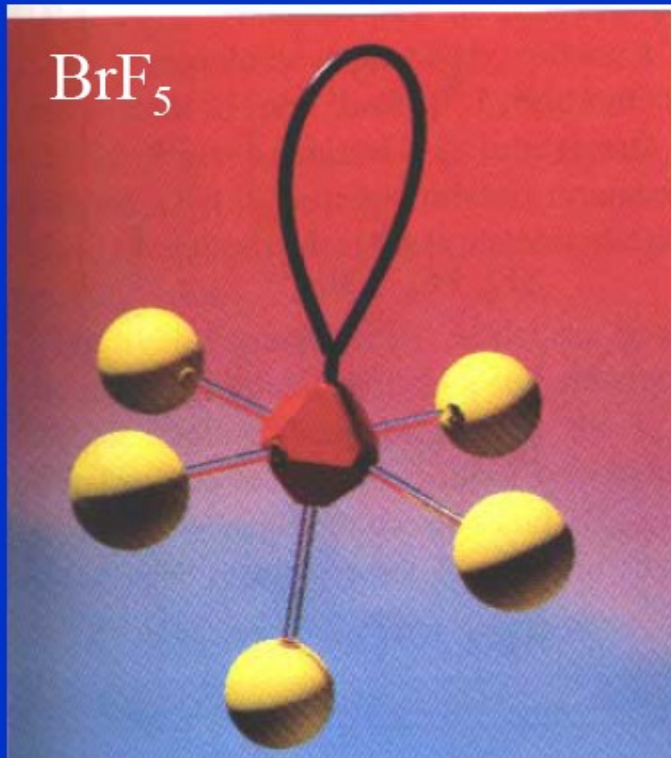


Oktaedr

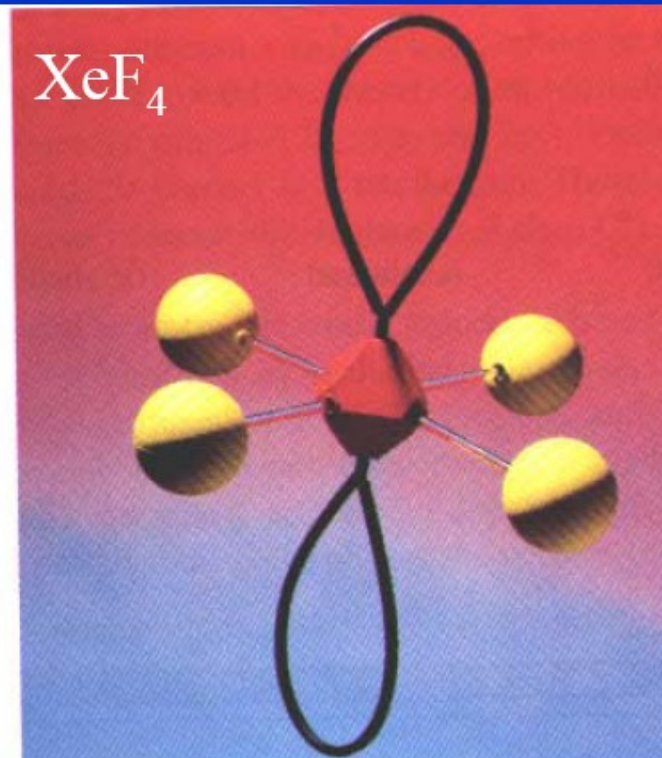


Oktaedrický vazebný úhel = 90°

Oktaedr

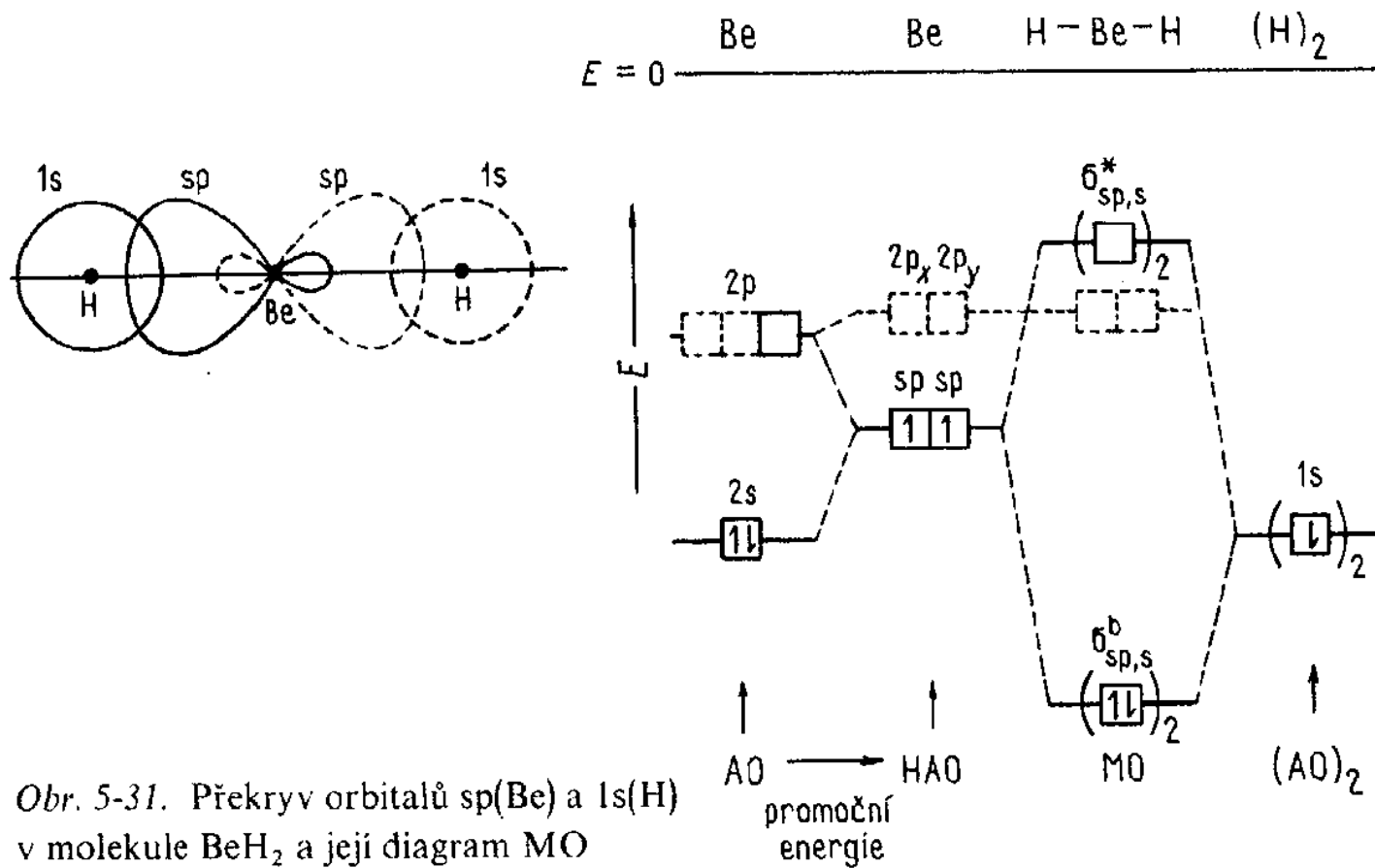


Čtvercová pyramida



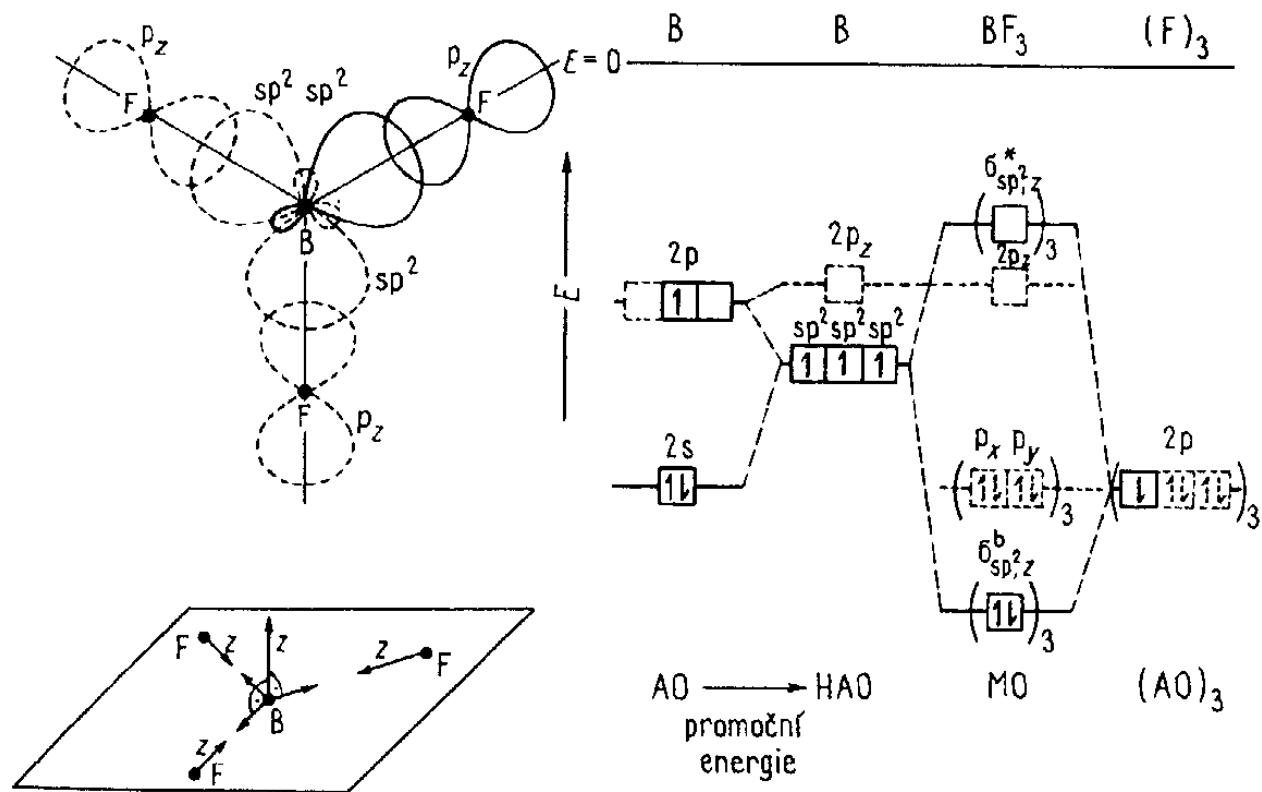
Čtverec

Hybridizace sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d sp^3d^2



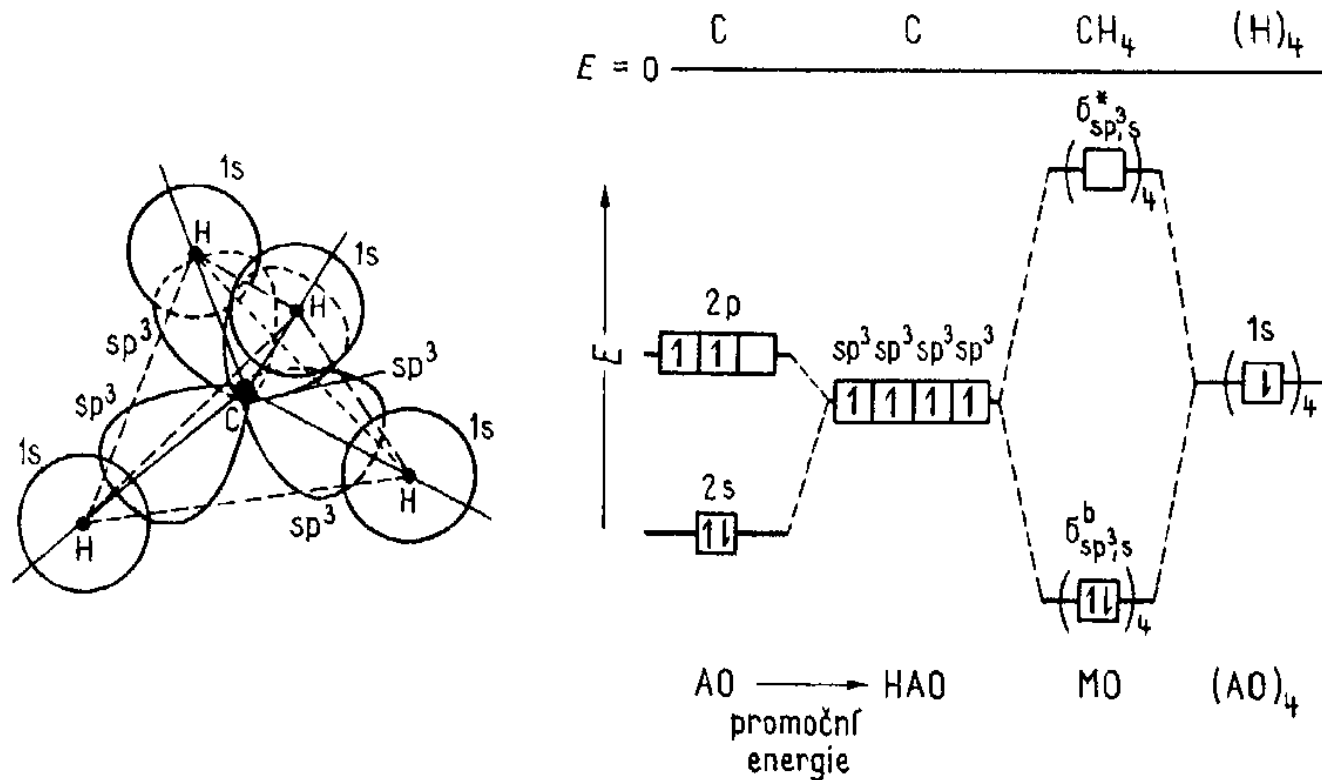
Obr. 5-31. Překryv orbitalů $sp(\text{Be})$ a $1s(\text{H})$ v molekule BeH_2 a její diagram MO

Hybridizace sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d sp^3d^2



Obr. 5-32. Schematické znázornění jednoduché představy překryvu v molekule BF_3 , volba souřadného systému a diagram MO molekuly BF_3

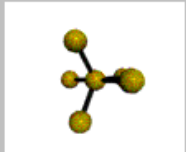
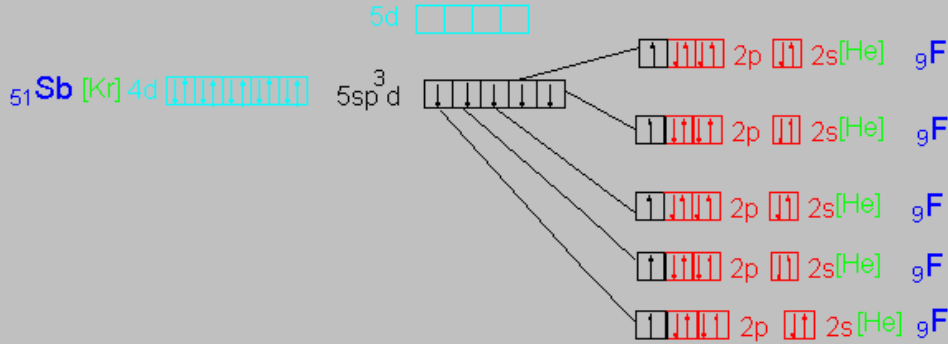
Hybridizace sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d sp^3d^2



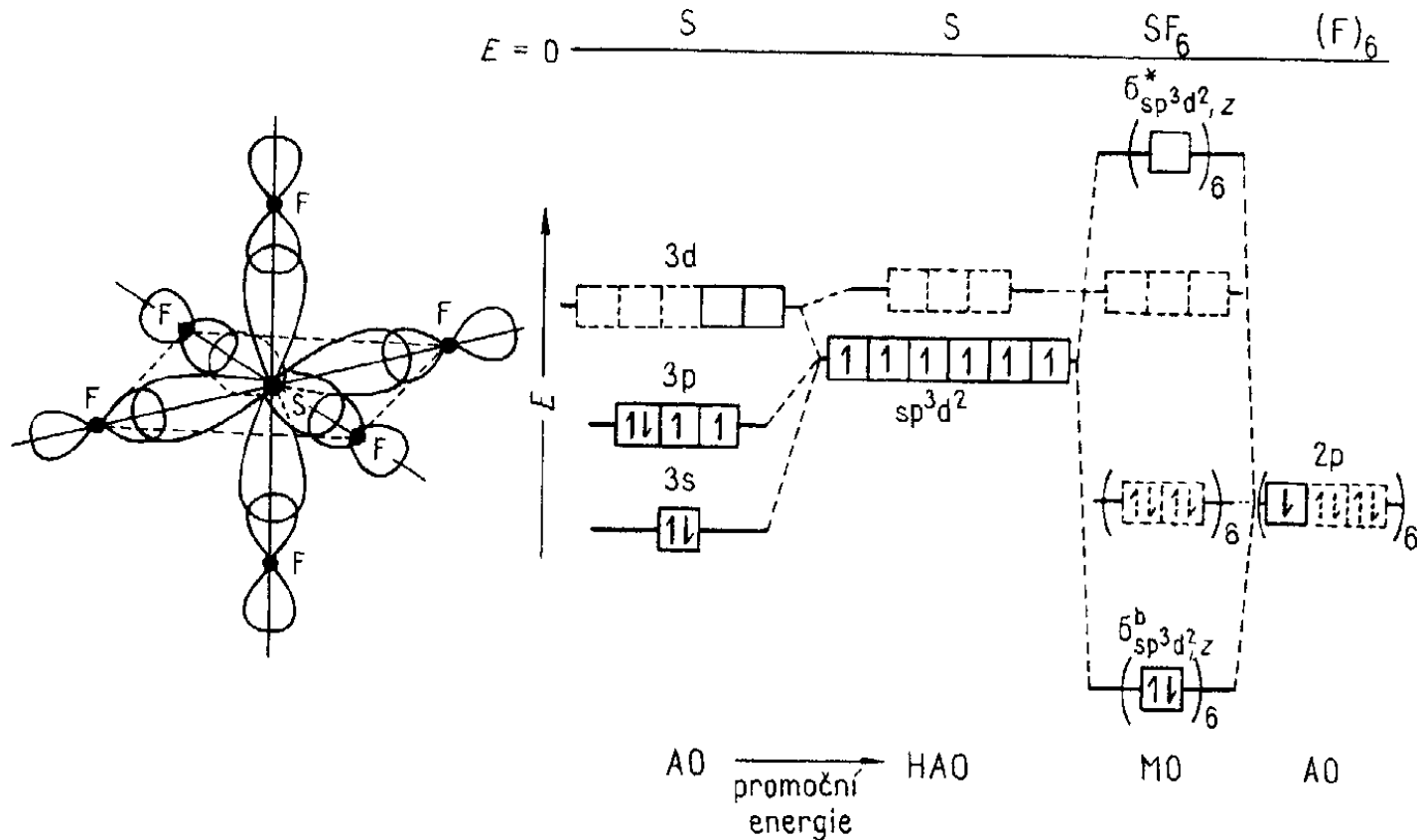
Obr. 5-33. Překryv v molekule CH_4 a její diagram MO

Hybridizace sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d sp^3d^2

Hybridizace orbitalů sp^3d na příkladu SbF_5 (5 vazeb)

<p>obrázkový model</p>	<p>Elektronová konfigurace antimonu</p> <p>$_{51}\text{Sb}$ [Kr] $5s^2$ $\uparrow\downarrow$ $4d^{10}$ $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ $5p^3$ $\uparrow\uparrow\uparrow$</p>
	<p>Elektronová konfigurace fluoru</p> <p>$_9\text{F}$ [He] $2s^2$ $\uparrow\downarrow$ $2p^5$ $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$</p>
<p>Excitovaný stav antimonu</p> <p>$_{51}\text{Sb}^*$ [Kr] $4d^{10}$ $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ $5s^1$ \uparrow $5p^3$ $\uparrow\uparrow\uparrow$ $5d^1$ \uparrow $\square\square\square\square$</p>	
<p>Struktura orbitalů v SbF_5</p> 	
<p>teorie hybridizovaných orbitalů sp^3d</p>	

Hybridizace sp , sp^2 , sp^3 , sp^3d sp^3d^2



Obr. 5-39. Překryv v molekule SF_6 a její diagram MO

Tabulka 5-5. Hybridizace s účastí orbitalů d

Hybridizace	Užité AO	Energetické schéma	Směry vývinu HAO, název geometrického tvaru	Počet HAO
SD^3	$n(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz})$ ns			4
D^3S	ns $(n-1)(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz})$		čtyřstěn (tetraedr)	
SP^2D	$n d_{x^2-y^2}$ $n(p_x, p_y)$ ns			4
DSP^2	$n(p_x, p_y)$ ns $(n-1)d_{x^2-y^2}$		čtverec (tetragon)	
$SP^3D_{z^2}$	$n d_{z^2}$ $n(p_x, p_y, p_z)$ ns			
$D_{z^2}SP^3$	$n(p_x, p_y, p_z)$ ns $(n-1)d_{z^2}$		trojboký dvojjehlan (trigonální bipyramida)	5
$SP^3D_{x^2-y^2}$	$n d_{x^2-y^2}$ $n(p_x, p_y, p_z)$ ns			
$D_{x^2-y^2}SP^3$	$n(p_x, p_y, p_z)$ ns $(n-1)d_{x^2-y^2}$		čtyřboký jehlan (tetragonální pyramida)	
SP^3D^2	$n(d_{z^2}, d_{x^2-y^2})$ $n(p_x, p_y, p_z)$ ns			6
D^2SP^3	$n(p_x, p_y, p_z)$ ns $(n-1)(d_{z^2}, d_{x^2-y^2})$		osmistěn (oktaedr)	

Seminář 8

Teorie Molekulových Orbitalů (MO)

Kombinace **atomových** orbitalů na **všech atomech** v molekule

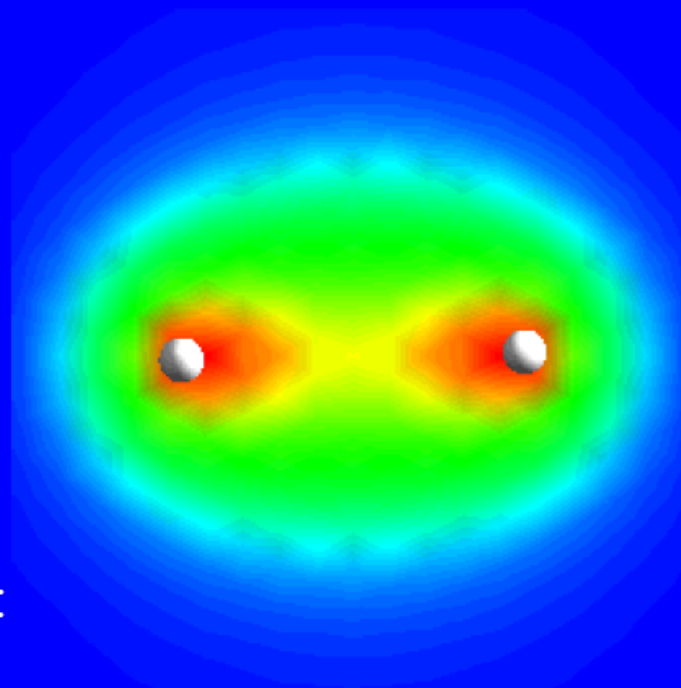
- Vhodná symetrie
- Vhodná (podobná) energie

Z n AO vytvoříme n MO

Pro začátek dvouatomové molekuly:

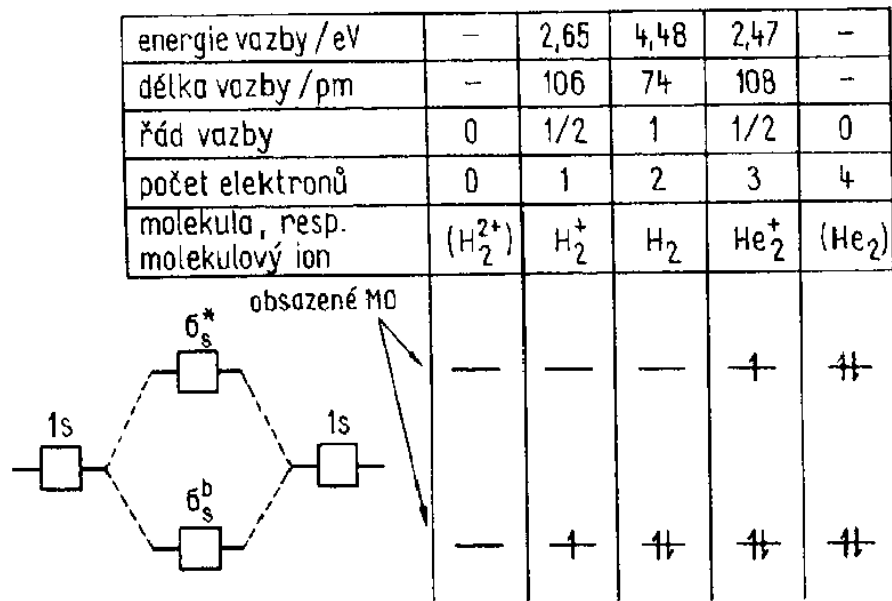
H_2 , F_2 , CO ,....

Stejně i pro víceatomové: BF_3 , CH_4 ,....



Vazebný MO v molekule H_2

VAZBA VE STEJNOJADERNÝCH DVOUATOMOVÝCH MOLEKULÁCH A MOLEKULOVÝCH IONTECH

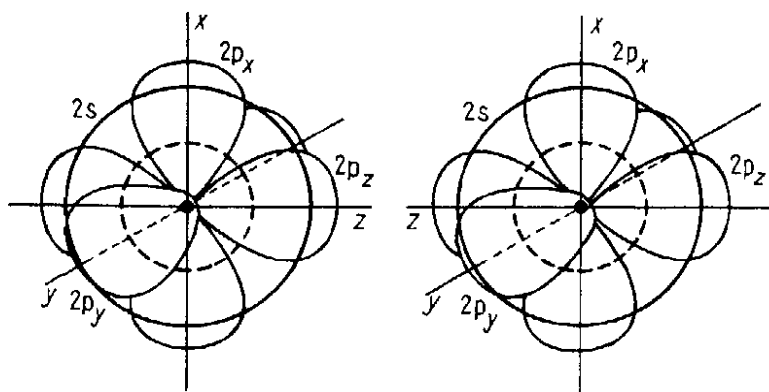


Obr. 5-13. Diagram MO překryvu AO 1s a 1s. Objasňuje vazbu v částicích H₂⁺, H₂, He₂⁺

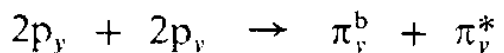
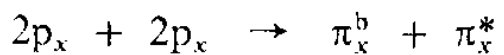
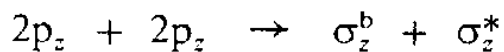
řád vazby 1/2 pro částice H₂⁺ a He₂⁺

částice H₂²⁺ a He₂ nejsou schopné reálné existence

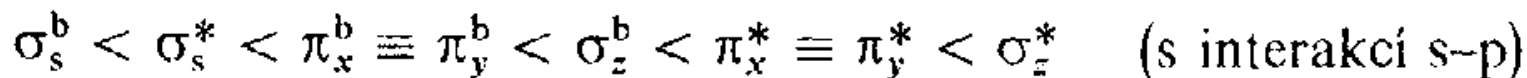
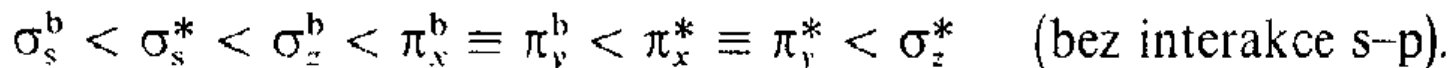
Stejnojaderné molekuly s překryvem skupin orbitalů 2s 2p a 2s 2p

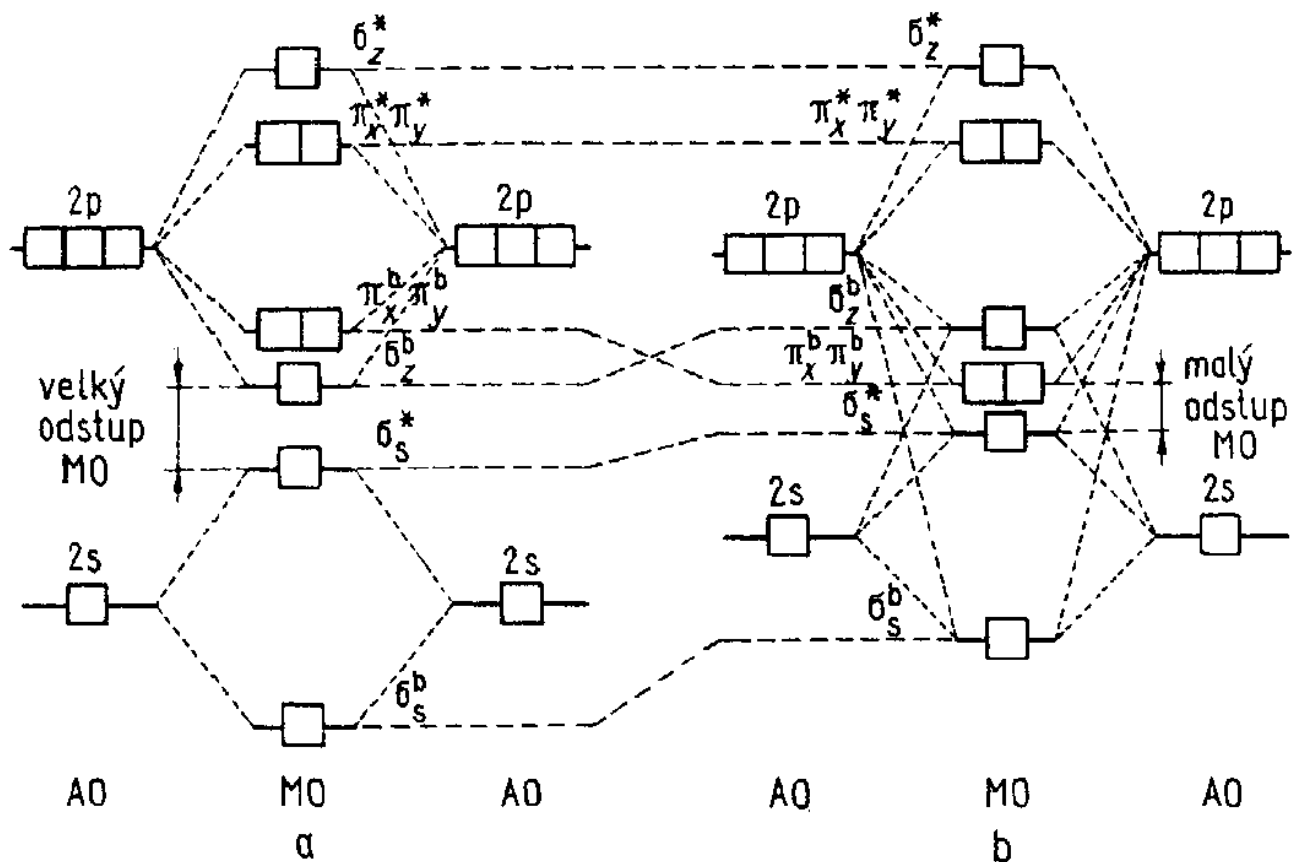


Obr. 5-14. Dva interagující soubory orbitalů 2s 2p (orbitaly 1s jsou uloženy hluboko uvnitř elektronového obalu atomů a interakci nepodléhají)



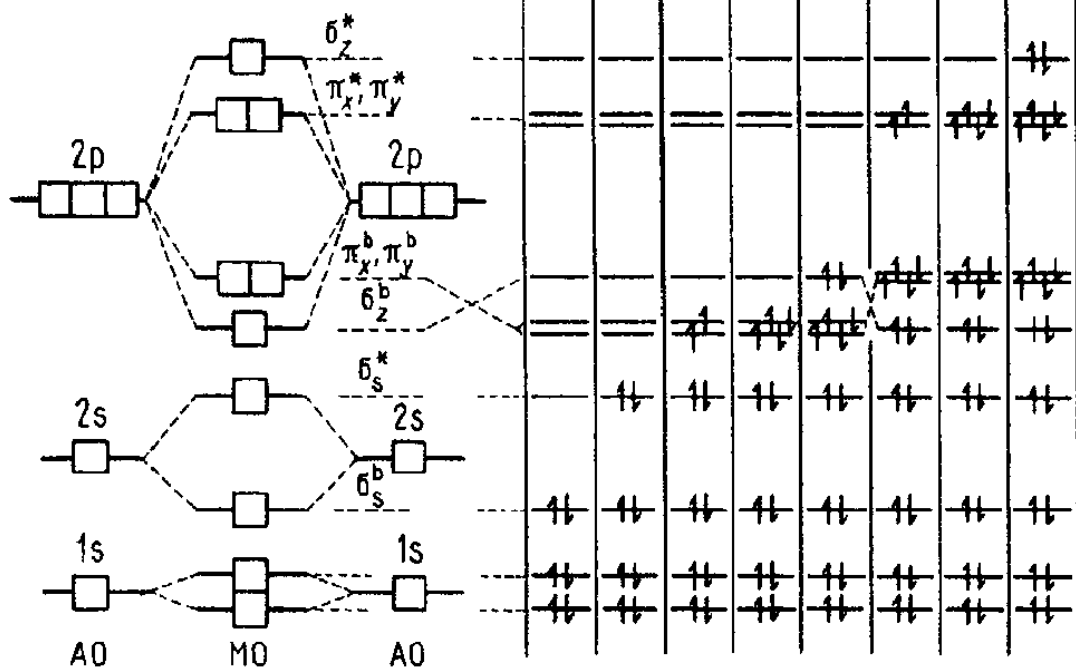
Energetická posloupnost všech vzniklých MO je dána řadou





Obr. 5-15. Diagramy MO dvouatomových homonukleárních molekul:
 a) bez interakce s-p, b) s interakcí s-p

energie vazby /eV		-	2,99	6,33	9,81	5,12	1,61	-
řád vazby	1	0	1	2	3	2	1	0
počet elektronů	6	8	10	12	14	16	18	20
molekula	Li ₂	(Be) ₂	B ₂	C ₂	N ₂	O ₂	F ₂	(Ne) ₂



Obr. 5-16. Diagram MO překryvu AO 2s 2p a 2s 2p. Objasňuje vazbu v molekulách Li₂, B₂, C₂, N₂, O₂, F₂