



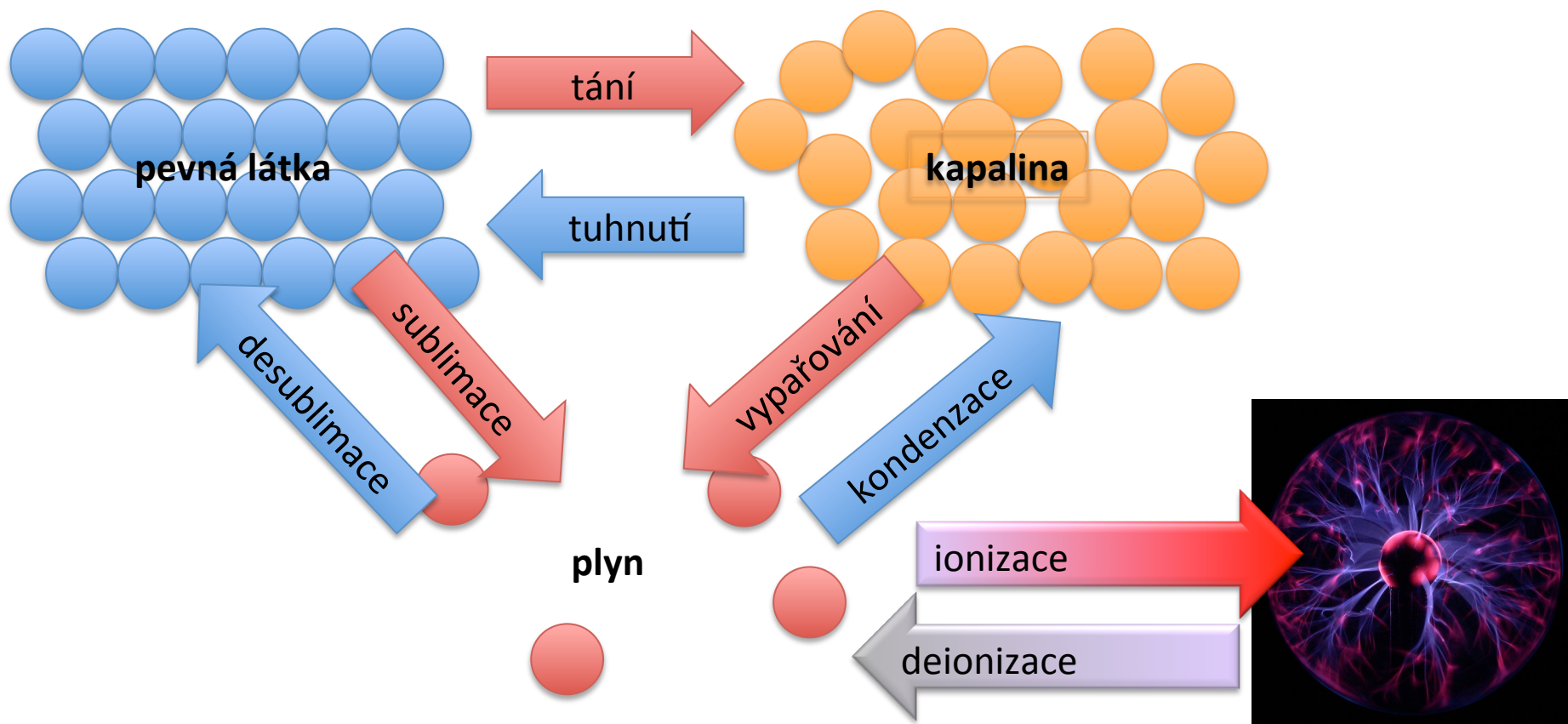
Soubory (atomů) molekul

- H_2O
- $M_r = 18,015$
- $M_h = 18,015 \text{ g/mol}$
- $V = \rho \cdot m$, $\rho_{25^\circ\text{C}} = 0,99710 \text{ g/cm}^3$
- 1 mol: $m = 18,015 \text{ g}$, $V = 17,963 \text{ cm}^3$
- $N = n \cdot N_A$, $N_A = 6,02214129(27) \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- 1 mol: $N = 6,022 \times 10^{23}$ molekul vody
– pro představu – to je fakt hodně 😊



Skupenství hmoty

- **pevné, kapalné, plynné**
- *plazma, kvark-gluonové plazma (kvagma), Bose-Einsteinův kondenzát*

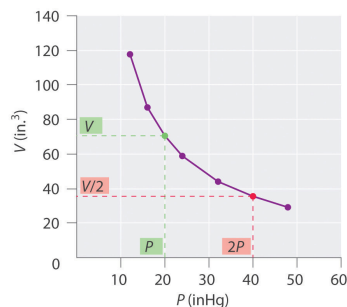


Plyny

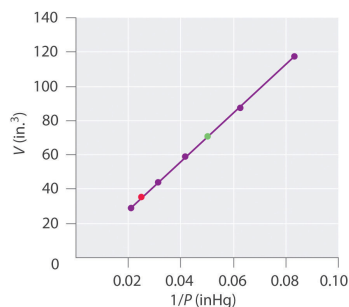
- Atomární (He, Ne ...)
 - Jaderné stavy (při chemické změně se nemění)
 - Elektronické stavy (za norm. podmínek v základním stavu)
 - Jen translační pohyb
- Molekulární
 - Translační, rotační a vibrační stavy
- Řídká fáze
 - Nízké hustoty (0.1-5.7 kg/m³)

Tlak, p

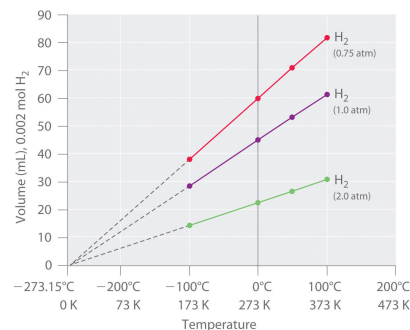
- Tlak plynu je dán nárazy na stěnu nádoby



(b) Volume vs. pressure



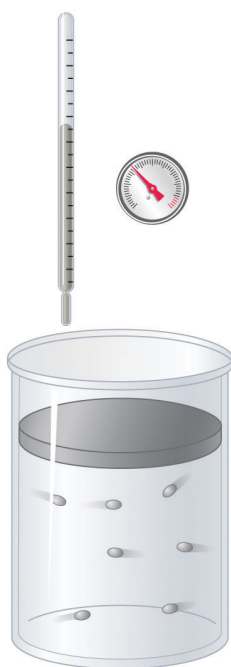
(c) Volume vs. 1/pressure



(a)



(a) P vs. V (Boyle's law): At constant temperature and amount of gas, pressure decreases as volume increases (and vice versa).



(b) V vs. T (Charles' law): At constant pressure and amount of gas, volume increases as temperature increases (and vice versa).



(c) V vs. n (Avogadro's law): At constant pressure and temperature, volume increases as amount of gas increases (and vice versa).

Ideální plyn

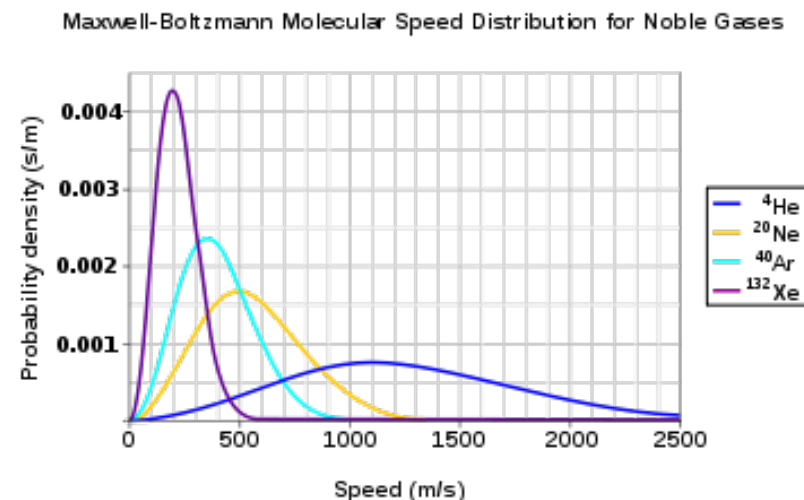
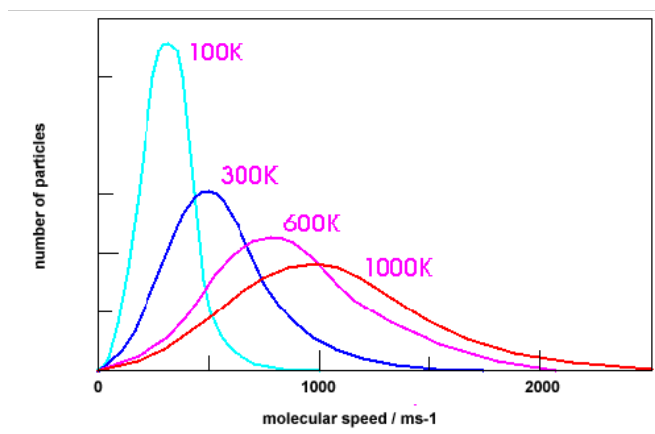
- Idealizace - nekonečně stlačitelný (žádný objem),
- bez interakcí mezi částicemi plynu

$$pV = nRT$$

stavová rovnice id. plynu

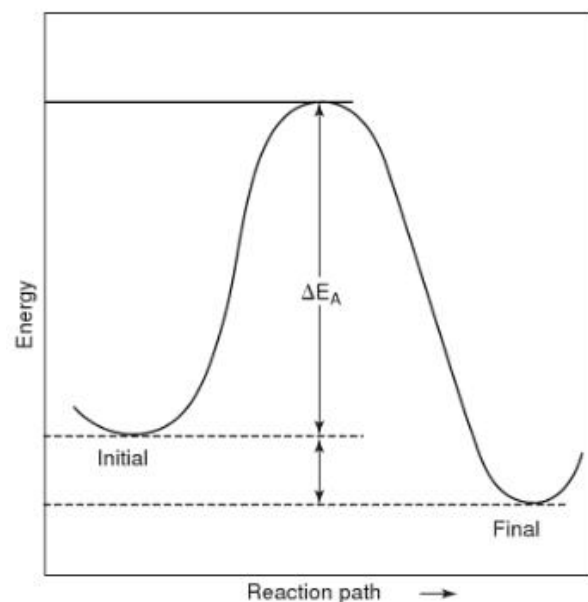
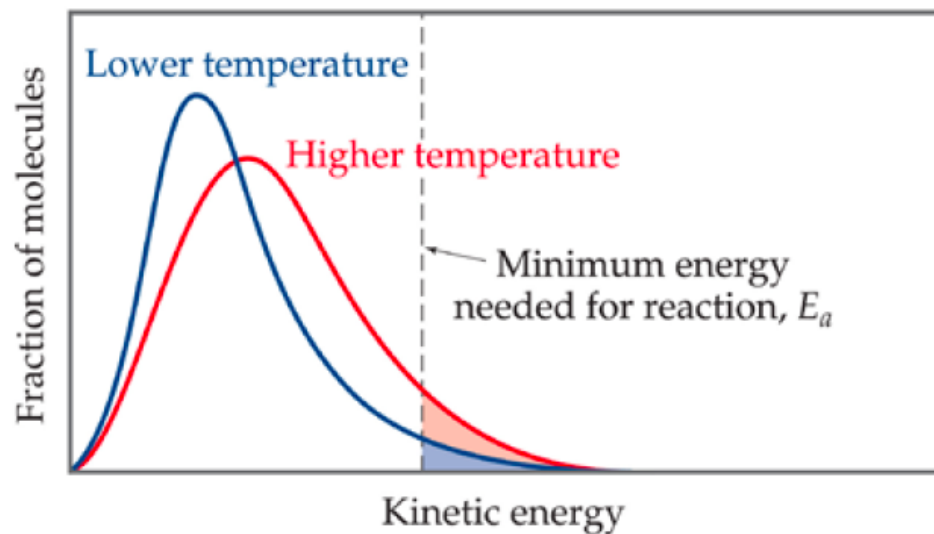
- Každá částice plynu má svou rychlost/kin. energii E_k (liší se, řídí se rozdělením ...)

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{M}{2\pi RT} \right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{Mv^2}{2RT}\right)$$



Souvislost s reaktivitou

$$f(E_k) = 2\sqrt{\frac{E_k}{\pi}} \left(\frac{1}{k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_k}{k_B T}\right)$$



Reálný plyn

- Konečně stlačitelný (částice plynu mají objem)
- Mezi částicemi působí mezimolekulové interakce

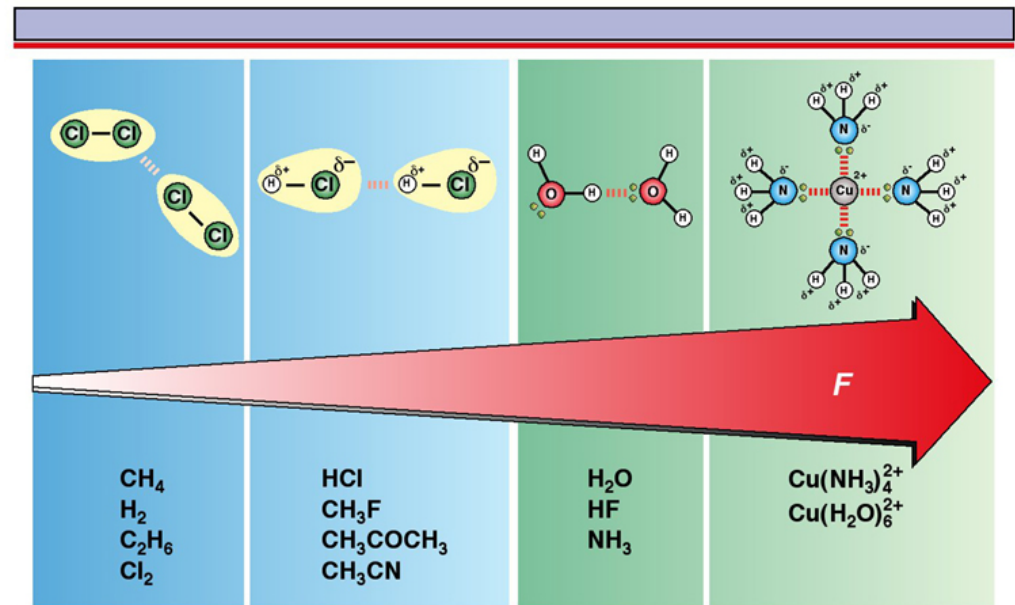
Van der Waalsova rovnice

$$\left(p + \frac{n^2 a}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$



korekce objemu – odečítáme
konečný objem molekul

korekce tlaku – přičítáme
kohézní tlak v důsledku
existence mez. mol. interakcí

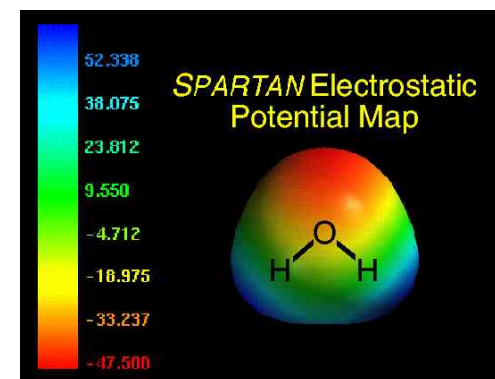


CB 13

	a (m ⁶ Pa/mol ²)	b (dm ³ /mol)
Aceton	1.409	0.0994
Helium	0.00345	0.02237

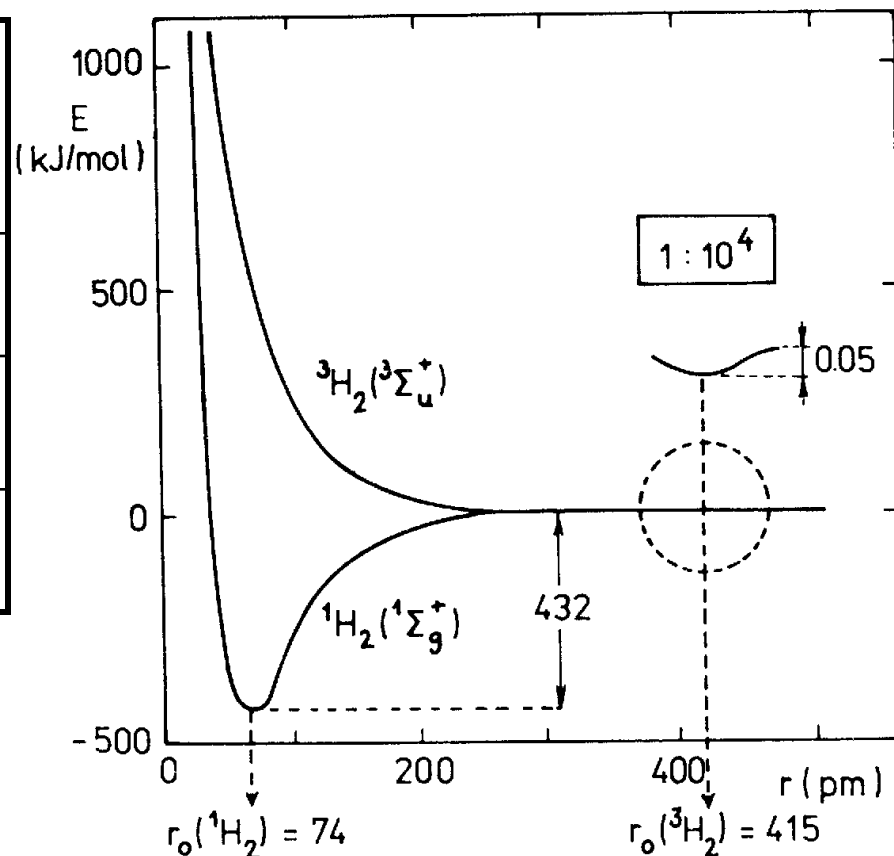
Mezimolekulové interakce

- Výrazně slabší než kovalentní interakce (~ 10 kJ/mol)
- Původ není v kovalentních vazbách (nekovalentní interakce)
 - Interakce permanentních elektrostatických polí (Coulombická interakce)
 - Interakce permanentního el. stat. pole s indukovaným polem (indukční, polarizační interakce)
 - Interakce fluktuujících elektronových hustot (disperzní interakce, Londonovy síly)
 - Repulze – v důsledku překryvu el. obalů

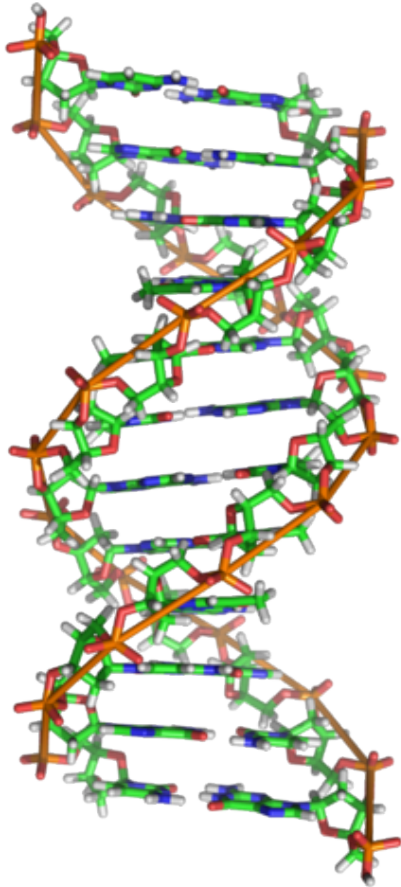


vdW molekula $^3\text{H}_2$ vs. $^1\text{H}_2$

charakter.	$^1\text{H}_2 (^1\Sigma_g^+)$	$^3\text{H}_2 (^3\Sigma_u^+)$
D (pm)	74.09	415.4
E_D kJ/mol	432.0	0.0514
Multipl. sp.	singlet	triplet



Projevy nekovalentních interakcí



... skoro všude okolo nás

Jouleův-Thomsonův efekt, existence kapalin,
existence molekulových krystalů

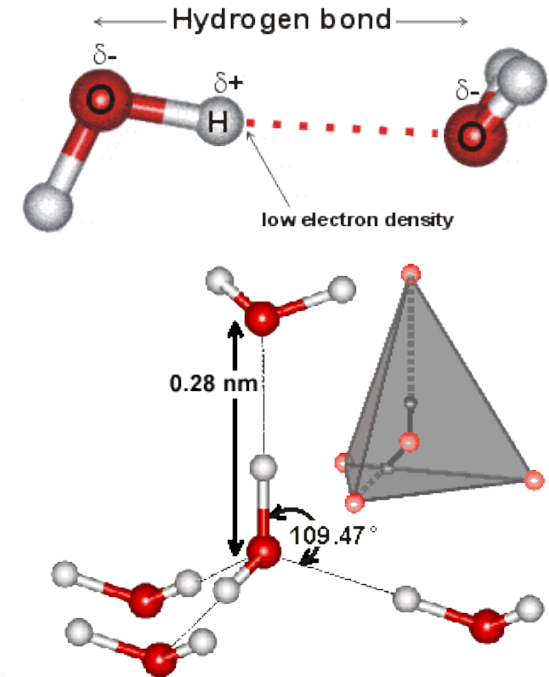
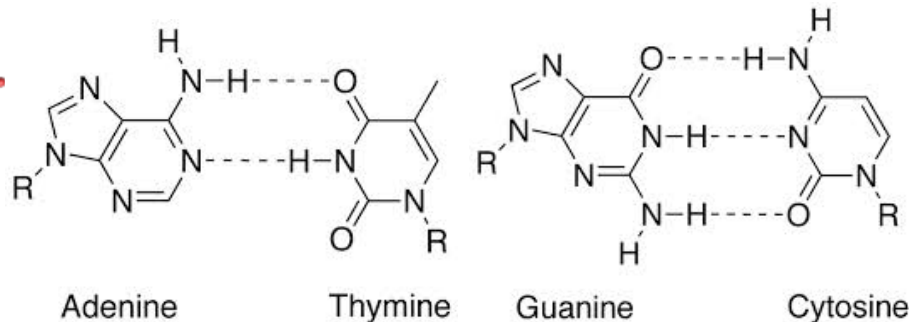
Vodíkové můstky, stabilizace a určování tvarů
biomolekul, rozpoznávání substrátů

Mezifázové jevy – adsorpce

Membrány

Praní – micelární solubilizace

...

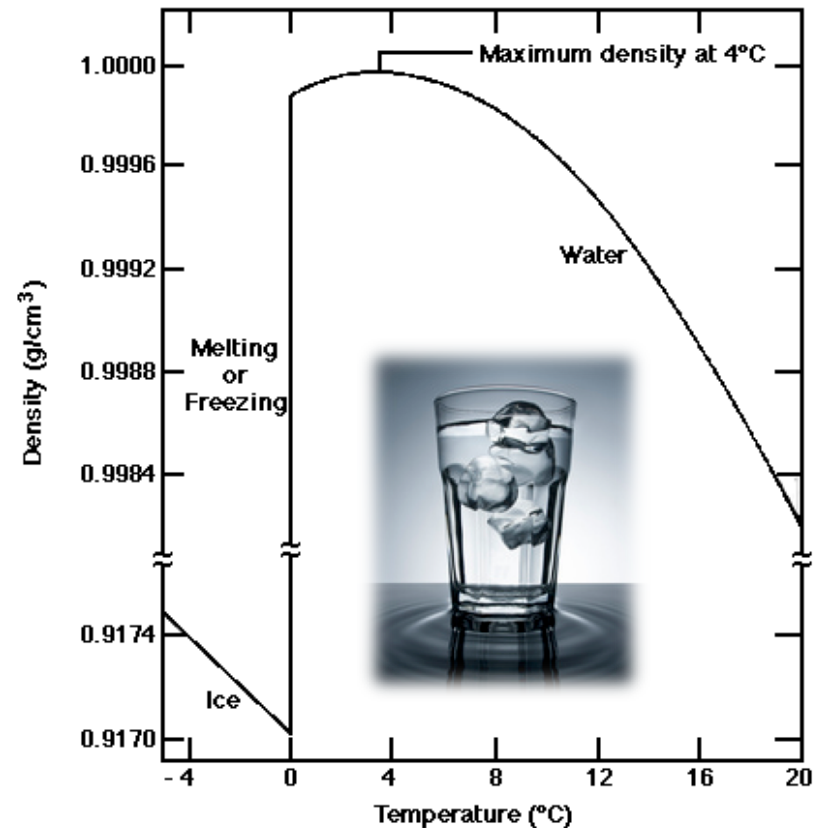


Kapaliny

- Nemají pevný tvar
- Jsou téměř nestlačitelné
- Hovoříme o kondenzované fázi
- Jednotlivé entity (např. molekuly) se přemísťují - difúze
- Nemají pravidelnou vnitřní strukturu
- ~1000krát větší hustotu než plyny

Hustota

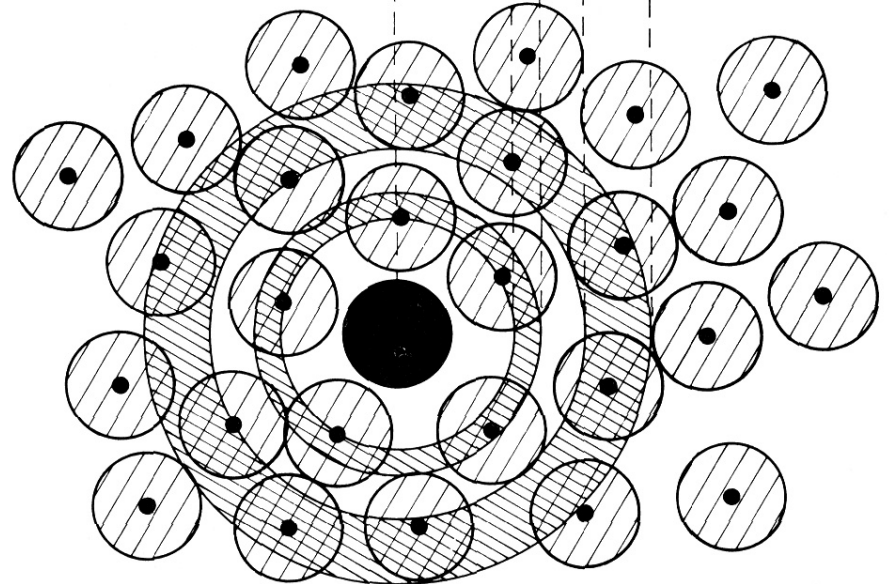
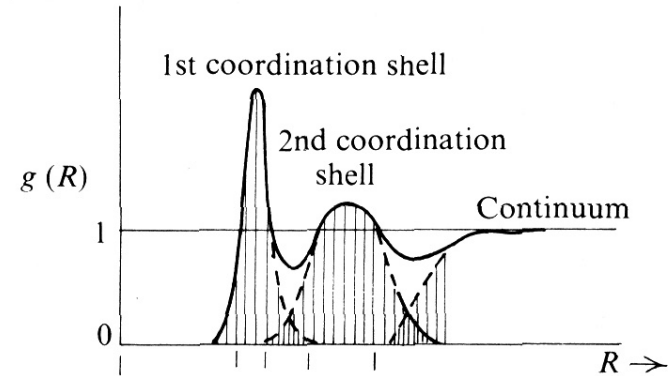
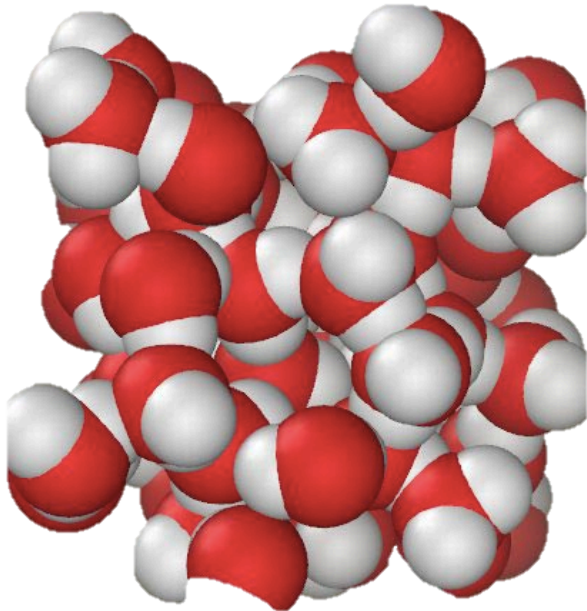
Substance	Relative density
Acetylene	0.0017
Air, dry	0.0013
Alcohol	0.82
Aluminum	2.72
Cadmium	8.57
Chromium	7.03
Copper	8.79
Carbon dioxide	0.00198
Hydrogen	0.00009
Lead	11.35
Mercury	13.59
Nickel	8.73
Nitrogen	0.00125
Oxygen	0.00143
Paraffin	0.80
Steel	7.82
Tin	7.28
Zinc	7.12
Water (4 °C)	1.00



Density of water (and ice) as a function of temperature. Note maximum density of water at 4°C. (Data from Pauling 1953 and Hutchinson 1957: 204.)

Struktura kapalin

- Vnitřní struktura lze popsat pomocí radiální distribuční funkce



RDF

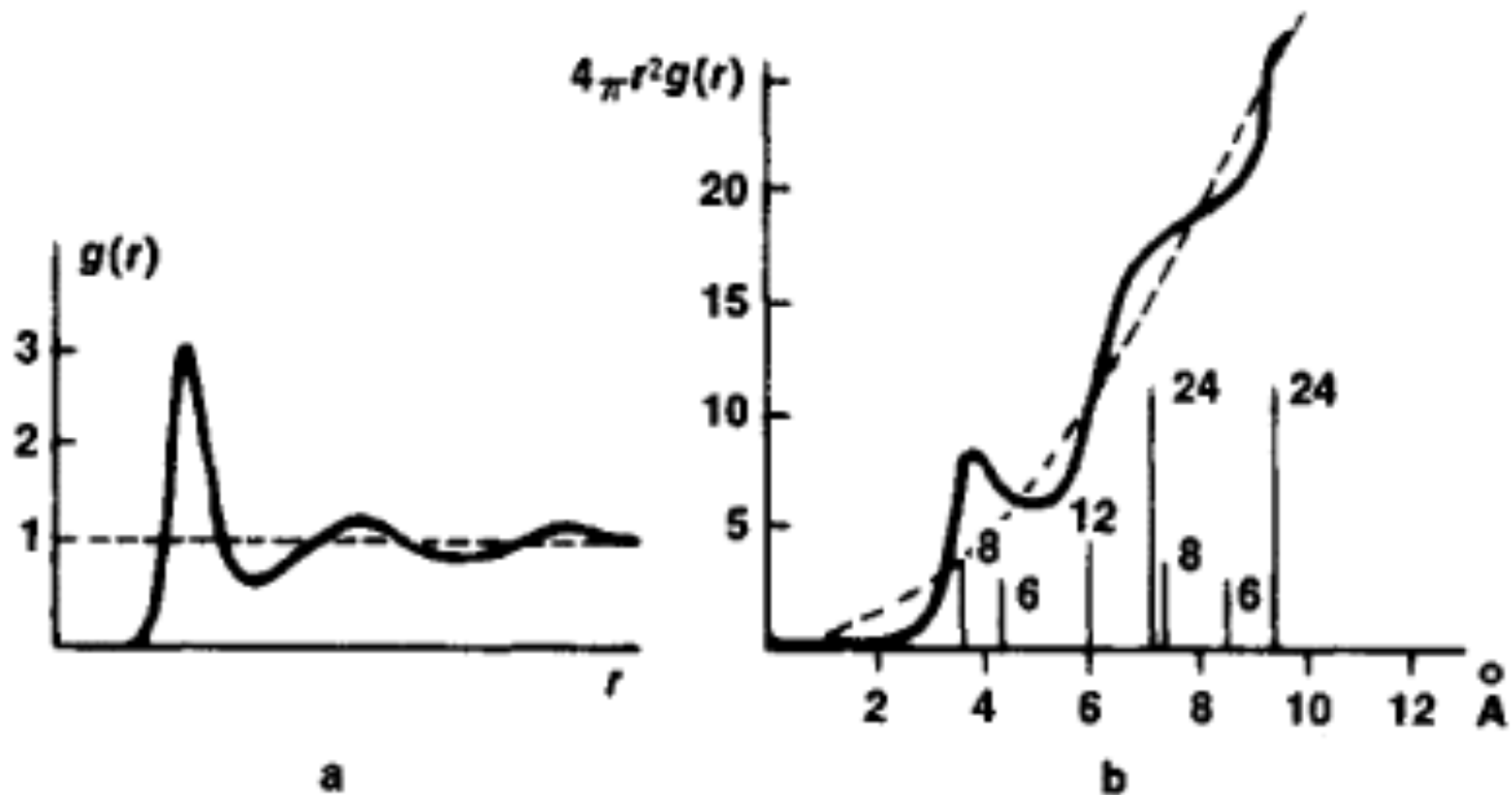


Figure 1. Shape of the radial distribution function $g(r)$ for liquid sodium (in arbitrary units): (a) particle distribution as a function of the distance r , (b) number of particles in a thin spherical layer as a function of the distance r . The dotted line indicates the distribution of molecules in the absence of order in their arrangement (a gas). The vertical line segments are the positions of atoms in crystalline sodium; the numbers on them are the number of atoms in the corresponding coordination spheres (the so-called coordination numbers).

Transportní vlastnosti

- Tok – veličina popisující průtok nějaké vlastnosti látky danou plochou, během daného čas. intervalu dělený obsahem této plochy a čas. intervalem
 - Příklady lineárních fenomenologických zákonů
 - Difúze – přenos hmoty v důsledku konc. gradientu
 - Vedení tepla – přenos energie v důsl. gradientu teplot
 - Viskozita – přenos hybnosti v důsl. gradientu rychlosti

$$\mathbf{J}_i = \sum_j L_{ij} \mathbf{X}_{ij}$$

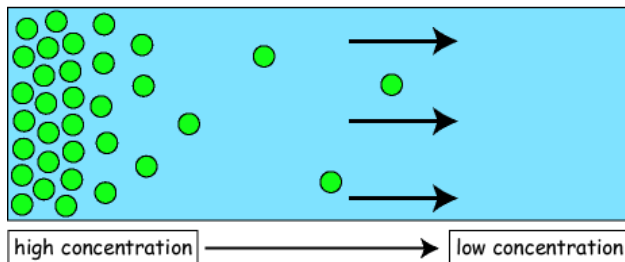
tok i -té fyz. veličiny

fenomenologické koeficienty

j -tá termodynamická síla (gradient term. veličin)

Difuze

- 1. Fickův zákon, D je difuzní koeficient



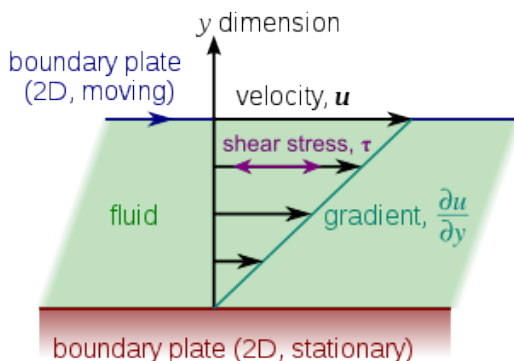
$$J_m = -D \frac{dc}{dx}$$



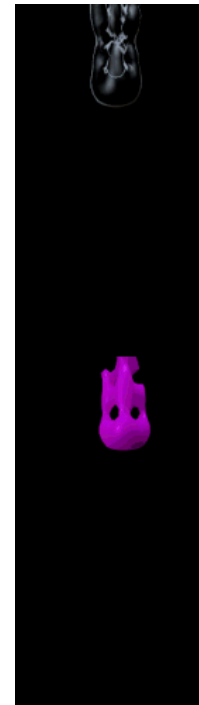
Diffusion

Viskozita

- η je koeficient viskozity - viskozita



$$J_x = -\eta \frac{du_x}{dy}$$



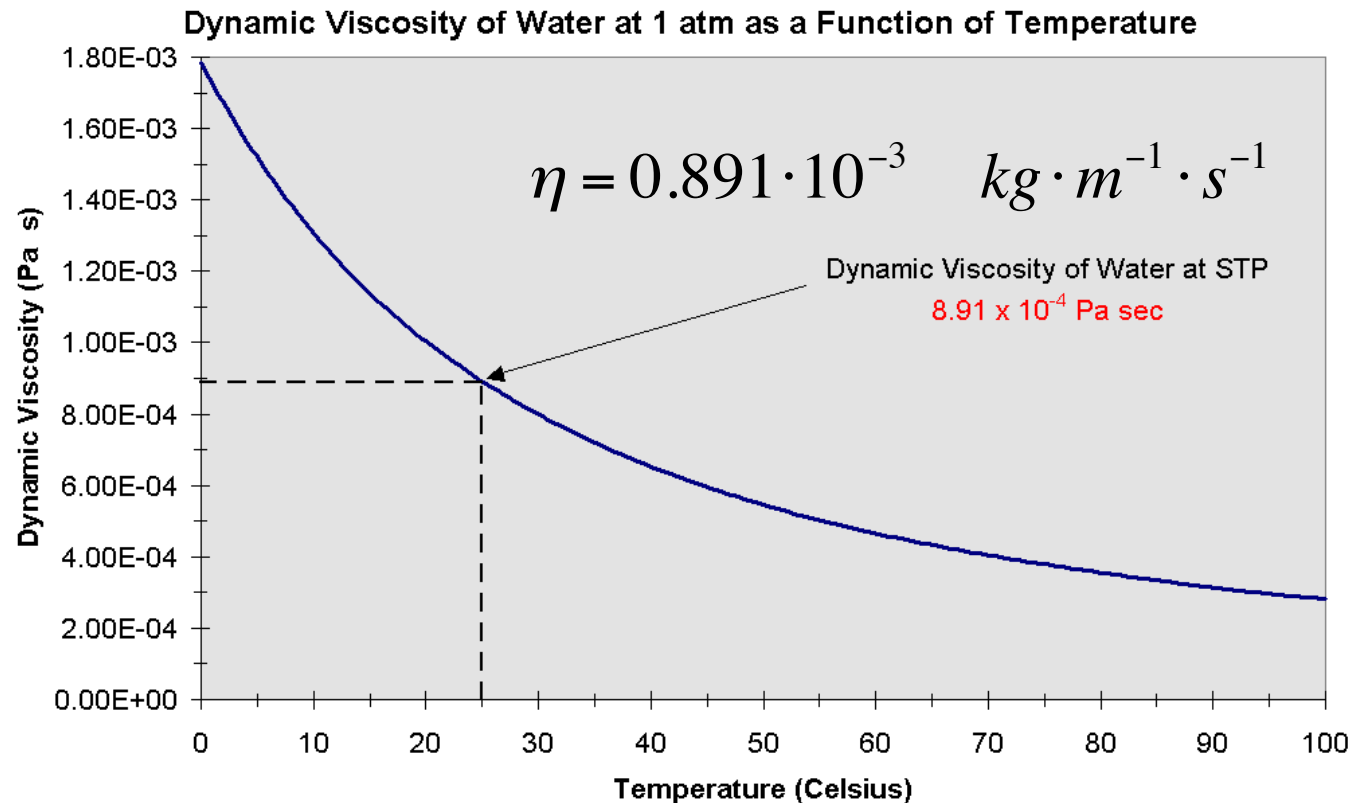
Viskozita

- Viskozita závisí na teplotě, E_A aktivační energie viskozního toku, R univerzální plyn. konstanta

$$\eta \propto e^{E_A/RT}$$

$$R = N_A \cdot k_B$$

$$R = 8,3144621(75) \text{ J/mol.K}$$



Měření viskozity

- Viskozimetry, rheometry
 - více cvičení z FCh, seminář



Ubbelohdeho

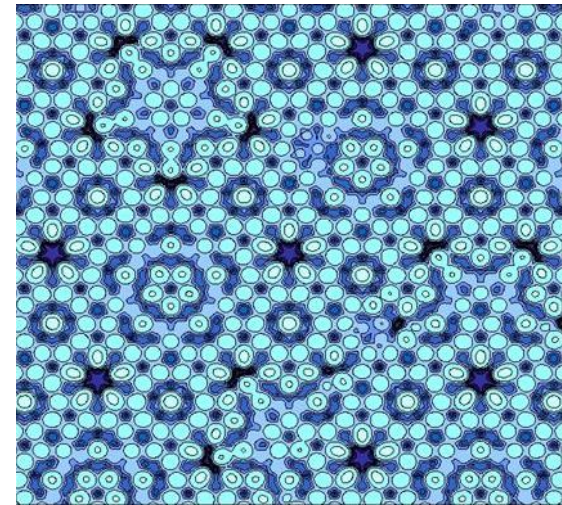


Höpplerův



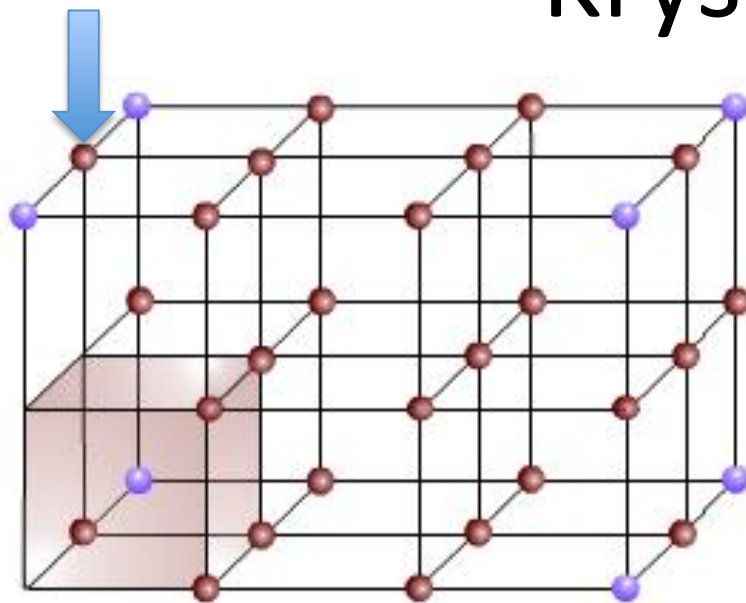
Pevné látky

- Mají stálý tvar
- Amorfní
 - Hranice kapalina/amorfní látka není ostrá
 - sklo, asfalt
- Krystalické
 - Mají periodickou vnitřní strukturu
 - pozor na kvazikrystaly
 - Uspořádaná struktura ale ne periodická
 - Postrádá translační symetrii

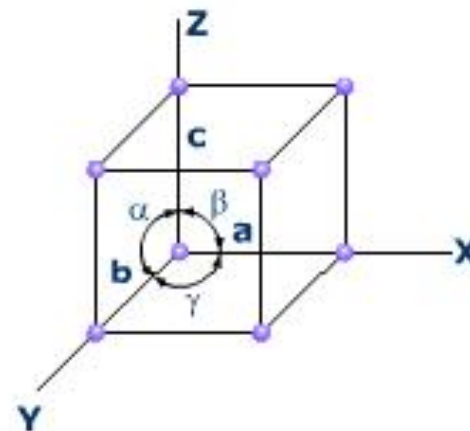


částice kmitají kolem
rovnovážných poloh

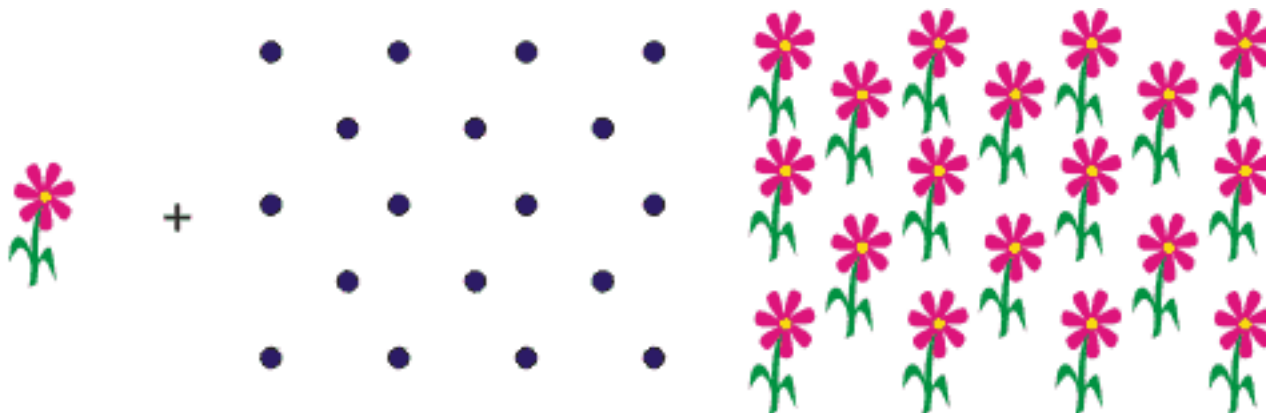
Krystaly



Representation of space
lattice and unit cell



Representation of dimensions
of a unit cell



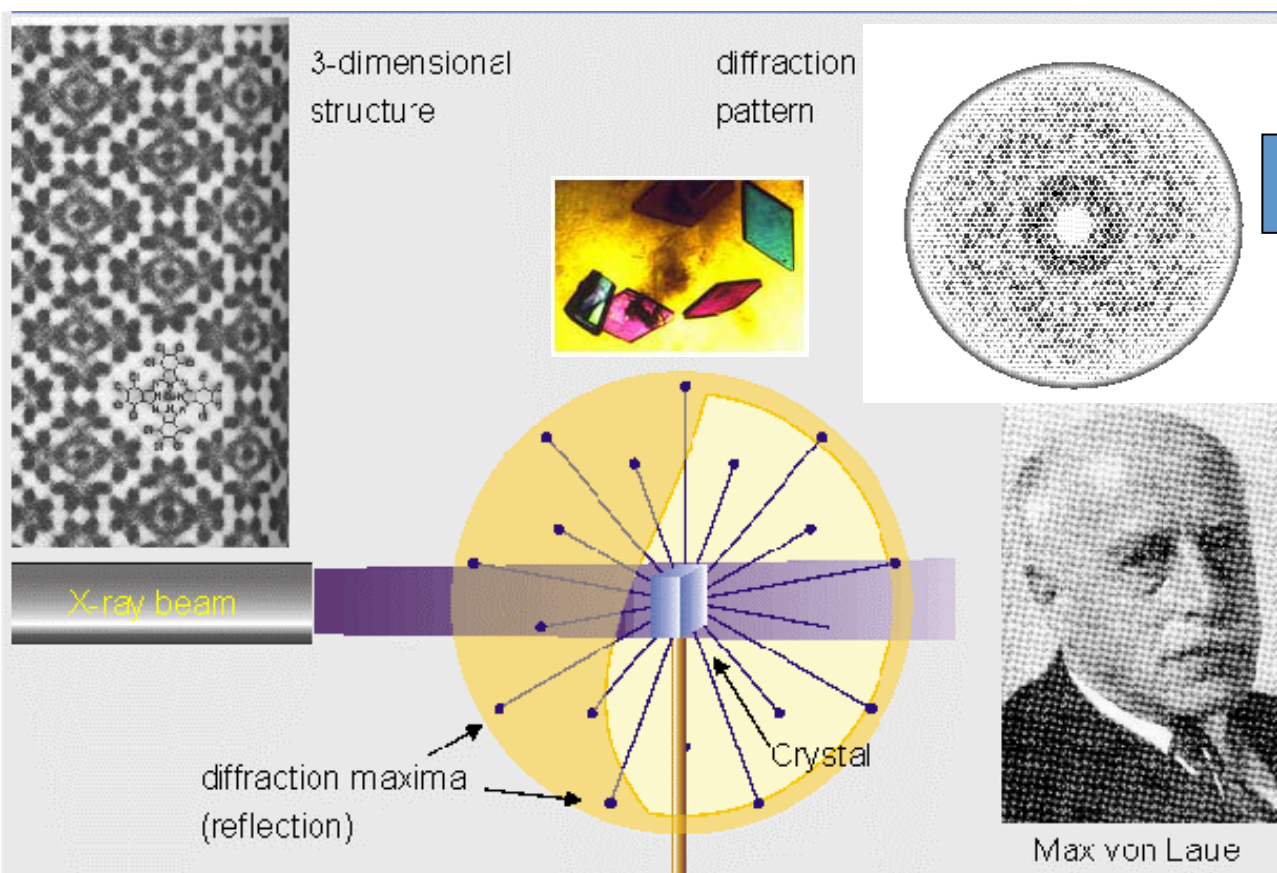
Basis

Lattice

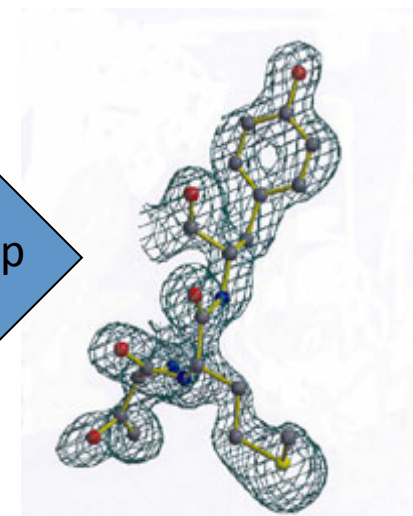
=

Crystal

Difrakce RTG záření na monokrystalu

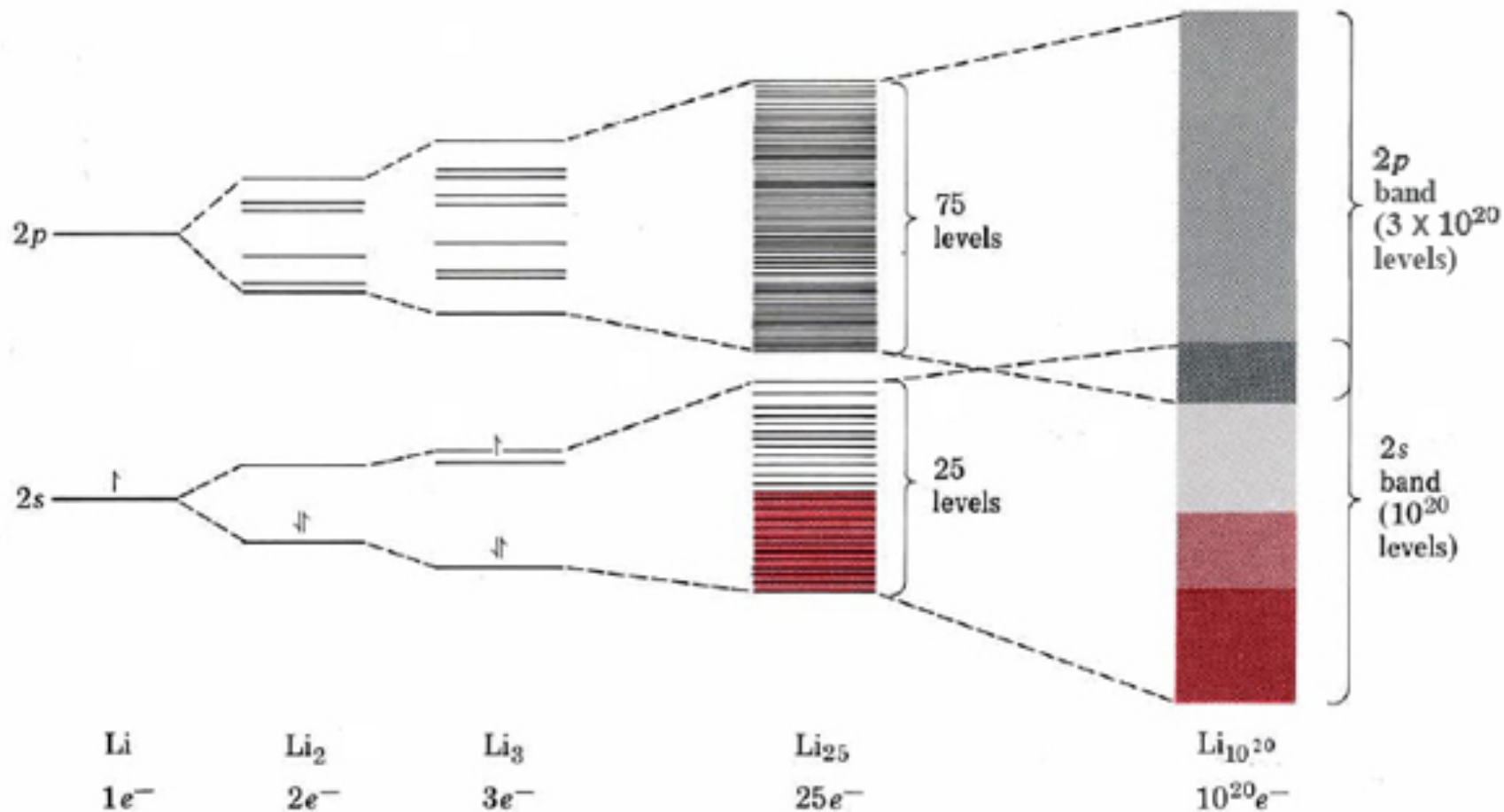


el. den. map

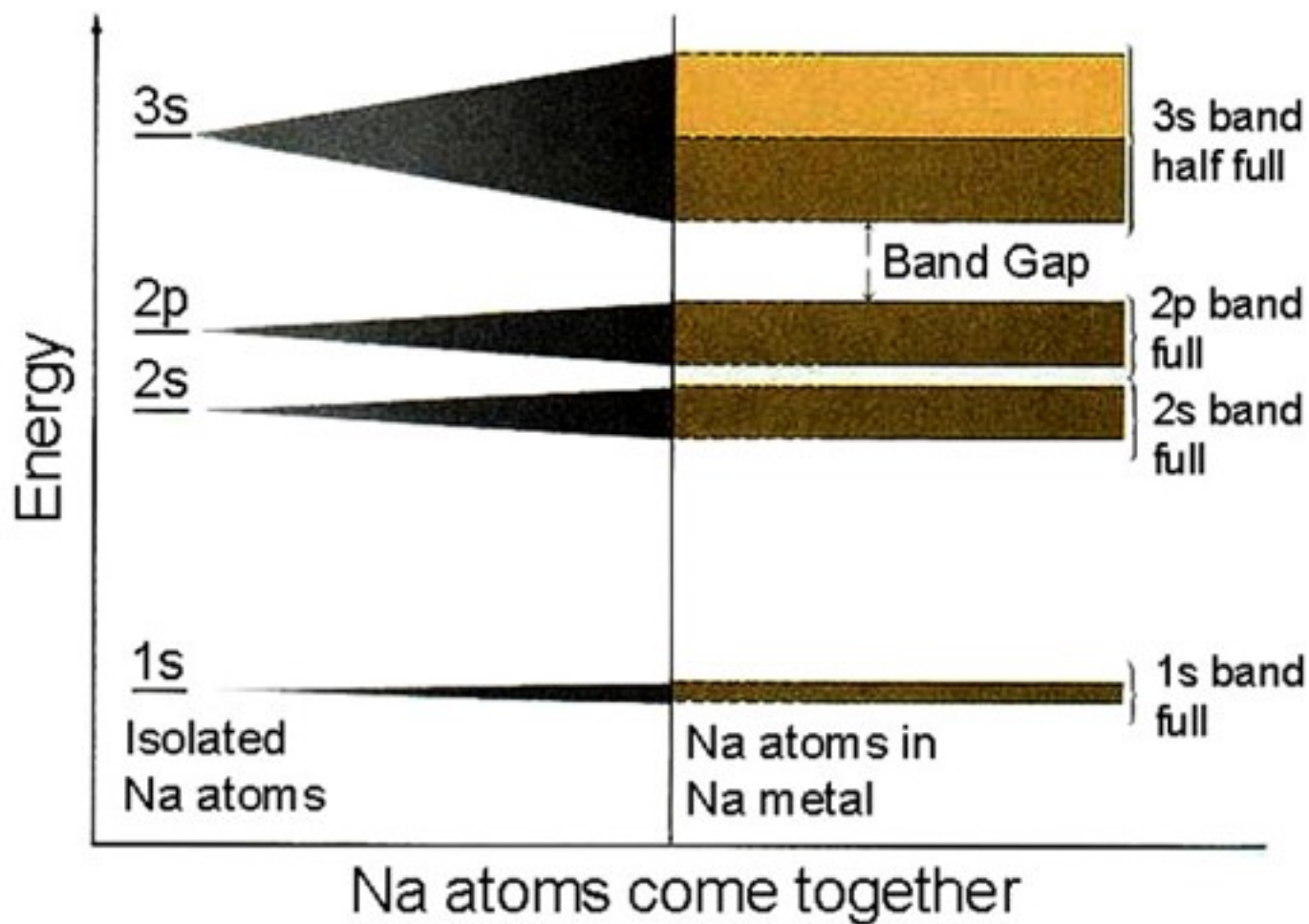


Molecular structure is fitted to the EDM.

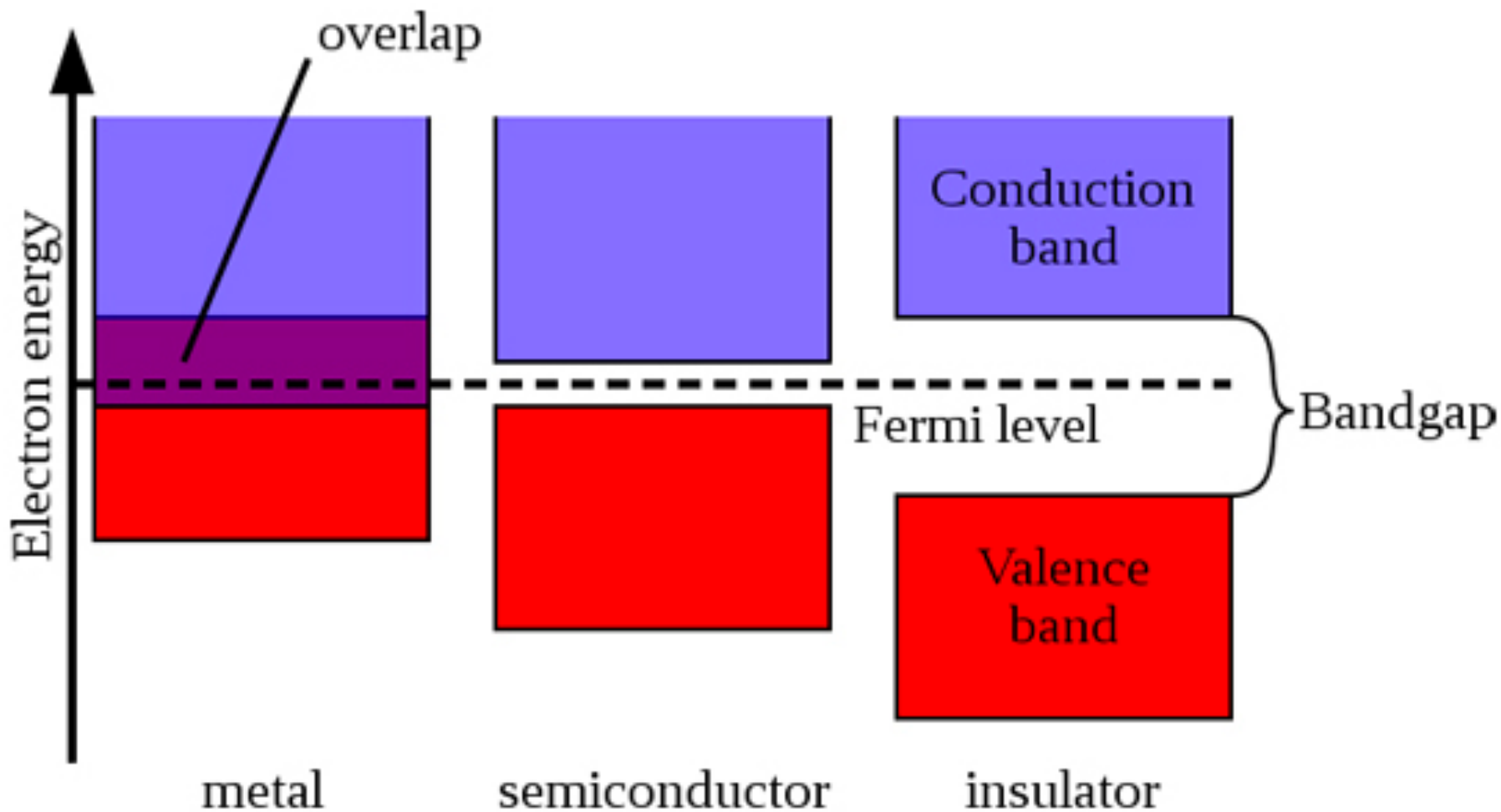
Elektronová struktura pevných látek



Elektronová struktura pevných látek

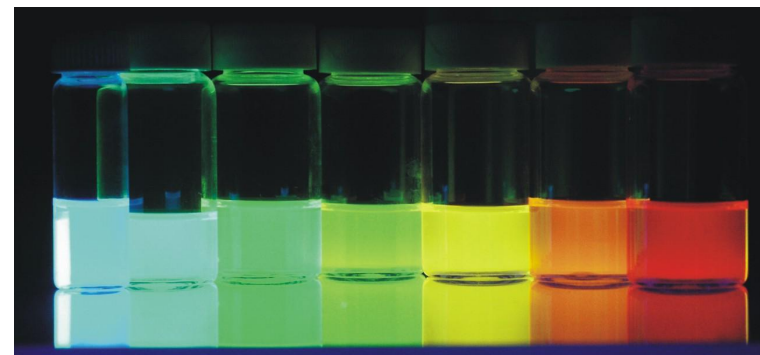
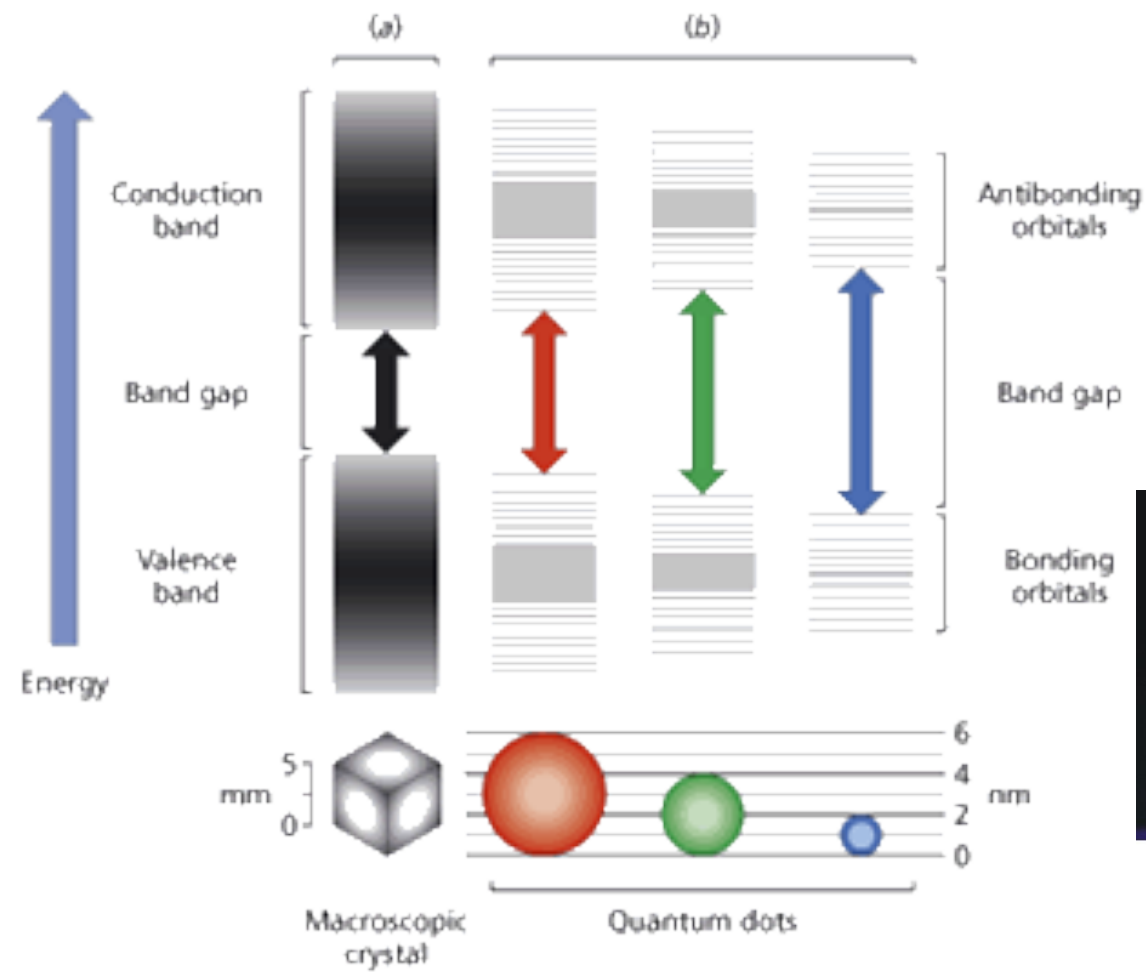


Pásová struktura



Band gap do 2-3 eV

Kvantové tečky



2.3 $\longrightarrow$ 5.5
Size (nanometers)