



Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLMOUCI

Fyzikální chemie 1 KFC/FC1

1. Úvod do fyzikální chemie matematický základ stavba hmoty

Karel Berka

Osnova

- Úvodní informace
- Matematický základ
- Struktura hmoty
- Interakce hmoty se zářením
- Soubory atomů – plyny, kapaliny, pevné látky
- Termodynamika
- Chemické rovnováhy
- Chemická kinetika
- (Fázové rovnováhy, Elektrochemie, Koloidní chemie) => FC2

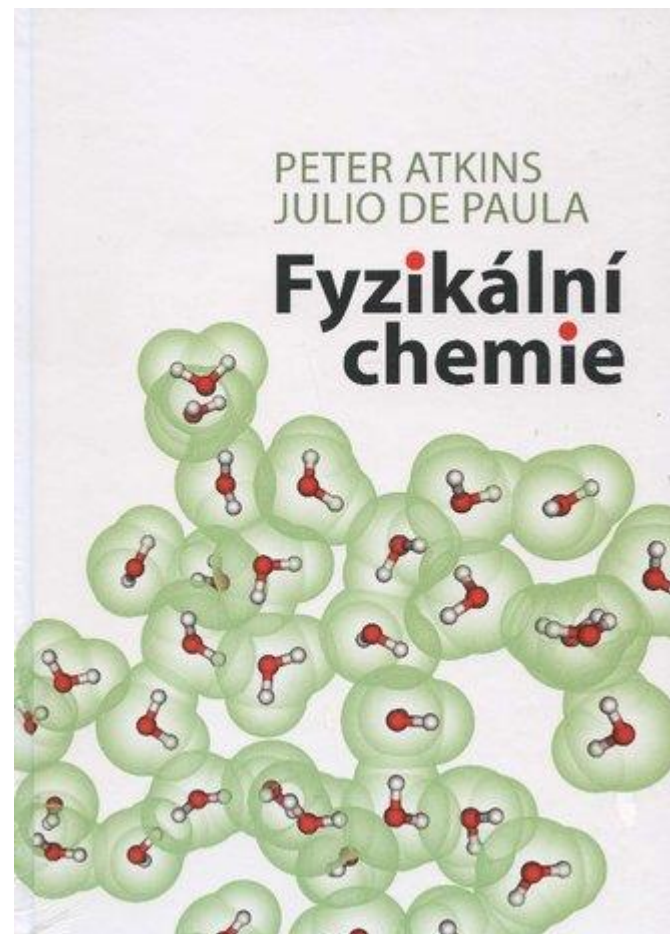
Požadavky ke splnění předmětu

- Zápočet
 - max. 1 (neomluvená) absence
 - aktivní přístup k semináři
 - 75 % zápočtový test
- Zkouška
 - krátký (online) test na rozřazení
 - 3 otázky vycházející z testu hodnocené A-F, z nichž se spočítá medián
(z libovolné otázky F = opakování termínu)

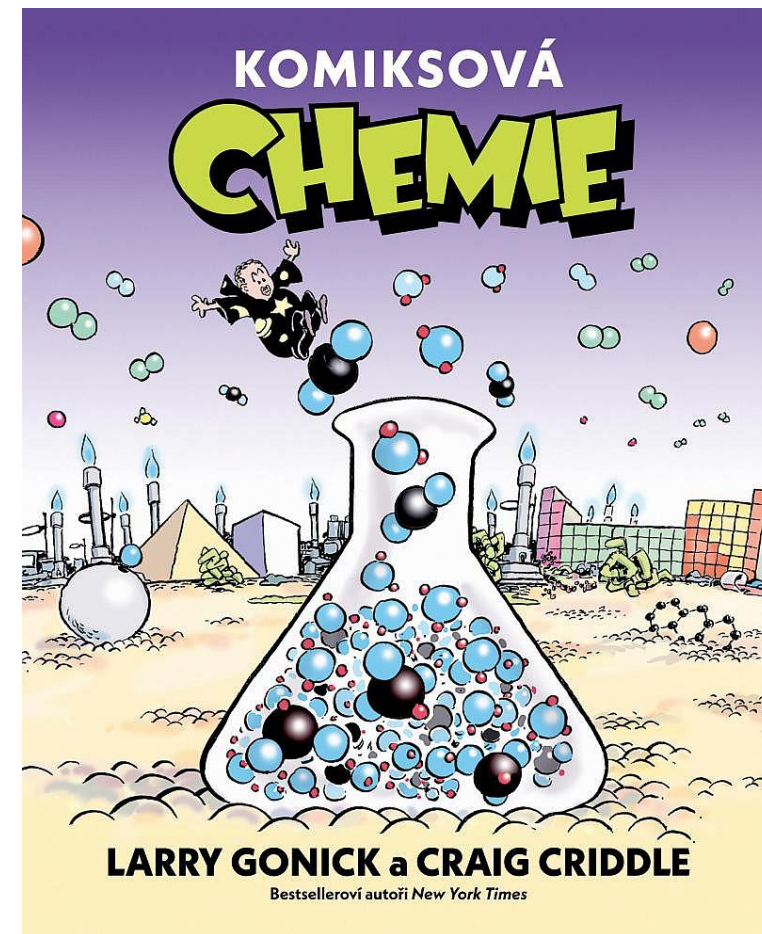
Doporučená literatura

Peter Atkins,
Julio de Paula
Fyzikální chemie
VŠCHT, Praha 2013
(překlad z EN)

- 10 ks v knihovně
- x ks v prodejně skript



Larry Gonick & Craig Criddle
Komiksová chemie
2023, Universum (ČR)



☒ Akad. rok / Semestr ☐ Od - Do		Rok 2022/2023 Semestr Letní semestr	☒ Kombinovaně ☐ Dny v týdnu ☐ Datum	☒ Grafické ☐ Tabulka	☒ Zobrazit obsazenost ☒ Jen akce v budoucnu ☒ Jen rozvrh. akce	Zobrazit													
		◀07:00 1. 07:45▶	◀08:00 2. 08:44▶	◀08:45 3. 09:30▶	◀09:45 4. 10:29▶	◀10:30 5. 11:15▶	◀11:30 6. 12:14▶	◀12:15 7. 13:00▶	◀13:15 8. 13:59▶	◀14:00 9. 14:45▶	◀15:00 10. 15:44▶	◀15:45 11. 16:30▶	◀16:45 12. 17:29▶	◀17:30 13. 18:15▶	◀18:30 14. 19:14▶	◀19:15 15. 20:00▶	◀20:15 16. 20:59▶	◀21:00 17. 21:45▶	
Út							◀11:30 12:14▶ LP-1036 RA   14.2.23 - 9.5.23 27/30 Pocklanová Bikbashev	◀12:15 13:00▶ LP-1127 RA   14.2.23 - 9.5.23 30/30 Pocklanová	◀13:15 14:45▶ LP-5007 RA   14.2.23 - 9.5.23 177/- Berka	◀15:00 15:45▶ LP-1035 RA   30/30 Zgarbová									
							◀12:15 13:00▶ LP-1036 RA   14.2.23 - 9.5.23 30/30 Berka												
St							◀11:30 12:14▶ LP-1034 RA   15.2.23 - 10.5.23 30/30 Zgarbová	◀12:15 13:00▶ LP-1034 RA   15.2.23 - 10.5.23 30/30 Zgarbová											

Legenda:

Přednáška

Seminář

RA

 Detail rozvrhové akce...

 Vyučující rozvrhové akce ...

 Kontakt ...

Dnes je Sudý týden

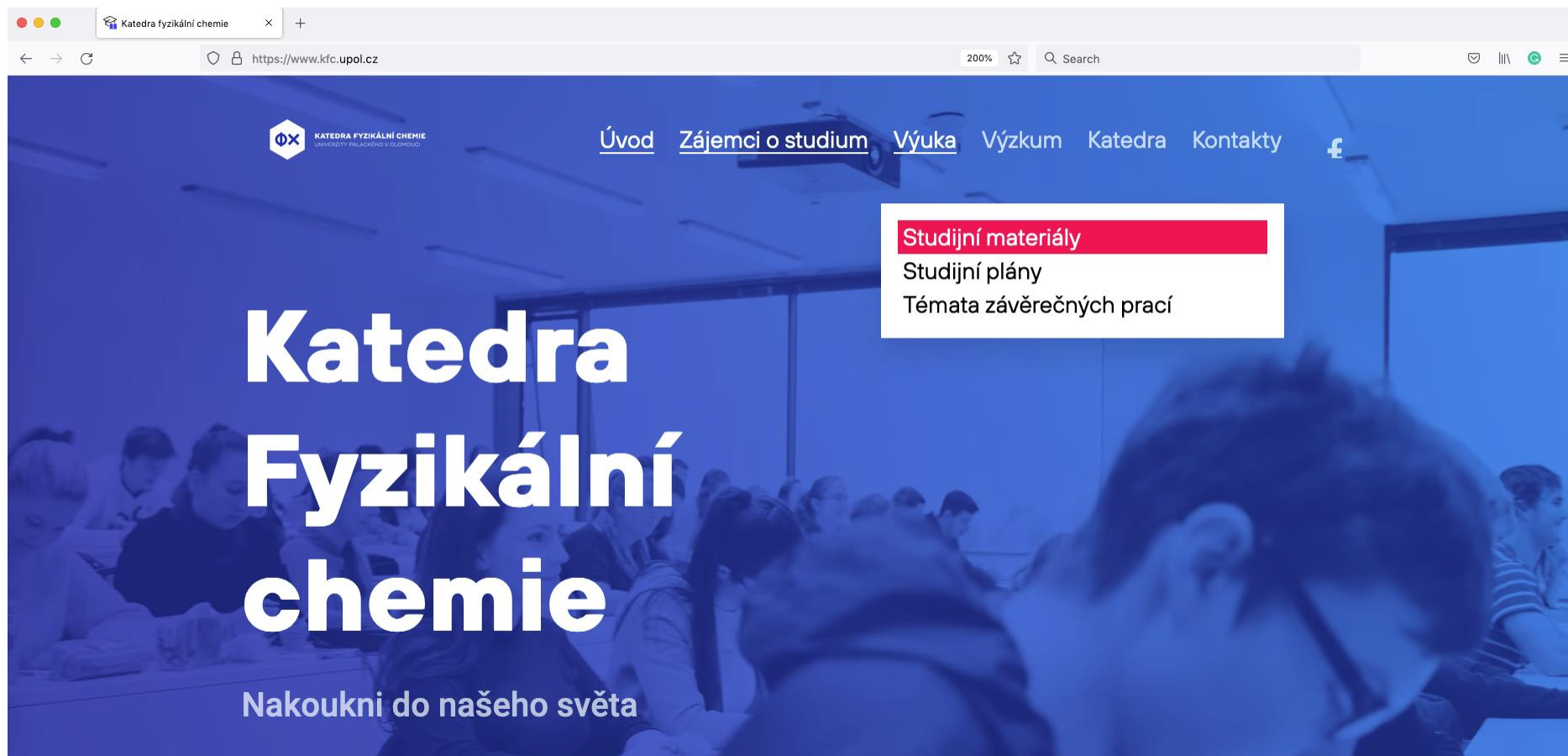
[YouTube playlist Katedry fyzikální chemie KFC/FC1 – Fyzikální chemie 1:](https://www.youtube.com/watch?v=DHQot6GzZjM&list=PLRGiGr8c-LILONFanYj3UwnTtzFhFpfqz)
<https://www.youtube.com/watch?v=DHQot6GzZjM&list=PLRGiGr8c-LILONFanYj3UwnTtzFhFpfqz>

Materiály:

<https://fch.upol.cz/vyuka/fyzikalni-chemie-1/>

web Katedry Fyzikální chemie: <https://www.kfc.upol.cz/>

Výuka -> Studijní materiály



Studijní materiály

- Angličtina
- Aplikace počítačů v měřicích systémech (APMS)
- Bioinformatika a výpočetní biologie (BIN)
- Bezpečnostní předpisy v chemii (BZP)
- Cvičení z fyzikální chemie (FCC)
- Drug design – Racionální návrh léčiv (DD)
- Elektrochemie (ELC)
- Fyzikální chemie 1 (FC1) ←
- Fyzikální chemie 2 (FC2)
- Heterogenní systémy (HS)



Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

O čem je fyzikální chemie

Physical chemistry

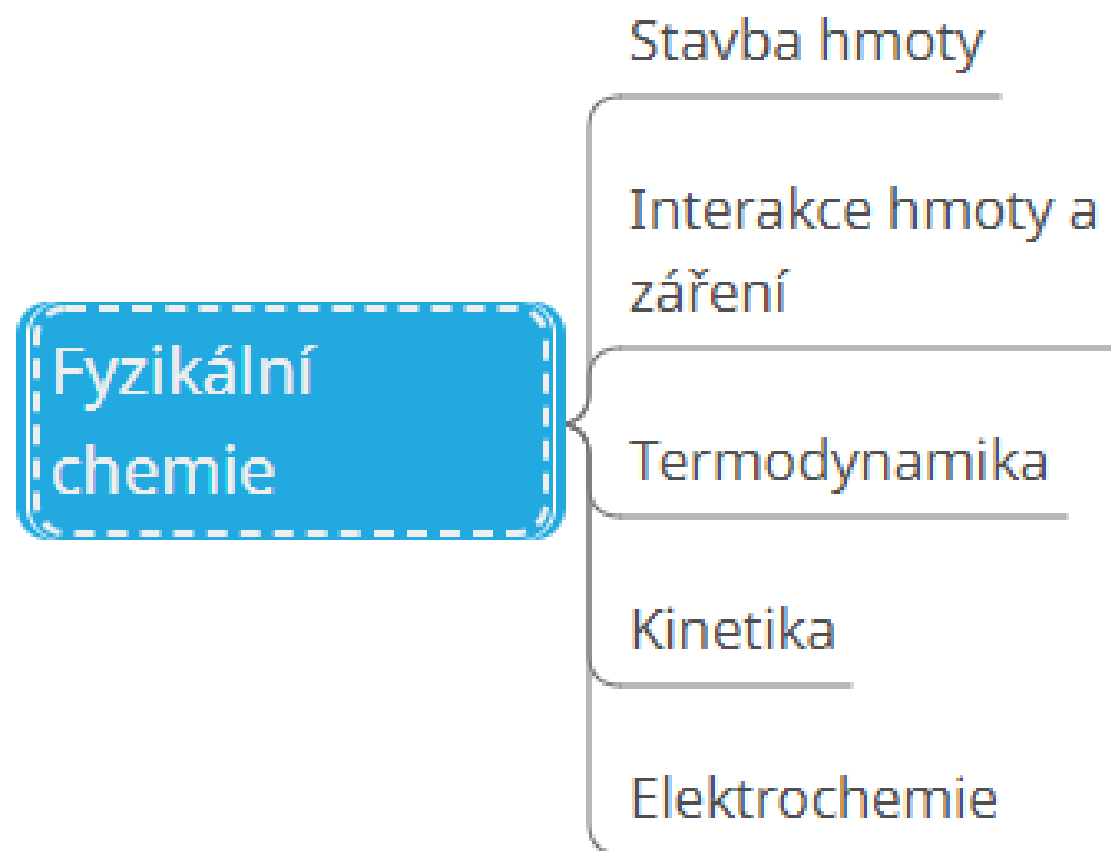
- the branch of chemistry concerned with the application of the techniques and theories of **physics** to the study of **chemical systems**.

Oxford Languages dictionary, Oxford University Press

- Physical chemistry deals with the principles of physics involved in chemical interactions. It examines:
 - How **matter behaves on a molecular and atomic level**
 - How **chemical reactions occur**
- Physical chemists are focused on **understanding the physical properties of atoms and molecules**, the way **chemical reactions** work, and what these properties reveal. Their discoveries are based on **understanding chemical properties** and describing their behavior using theories of physics and mathematical computations.
- Physical chemistry is a good area for chemists who have a strong curiosity about **how things work at the atomic level** and enjoy working with lab instrumentation and machines.

<https://www.acs.org/content/acs/en/careers/chemical-sciences/areas/physical-chemistry.html>

Oblasti zájmu fyzikální chemie





Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

Předměty o fyzikální chemii na KFC PřF UPOL

Bc. KFC/*

Základní kurzy

- FC1 – stavba hmoty, termodynamika, kinetika
- FC2 – fázové rovnováhy, elektrochemie
- FCC – cvičení z FyzChem

Obecné kurzy

- FCH3 – pokročilé kapitoly z FyzChem
- IPCH – (EN) intro to Phys Chem
- KFCHA - vybrané kapitoly z FyzChem
- UOFCH – přehled Obecné a FyzChem
- ZPCM – základy FyzChem metod

Struktura hmoty

- SAM – struktura atomů a molekul
- UPMC – úvod do pevných látek
- CHST – chemická struktura
- JC – jaderná chemie

Interakce hmoty

- FZP – fotochemie v životním prostředí

Fázové rovnováhy

- KOCH – koloidní chemie

Modelování

- MOMO – molekulové modelování

Kinetika

- MSRM – reakční mechanismy

NMgr. KFC/*

Popis hmoty

- NNM1/2 – nanomateriály
- MVM – mechanické vlastnosti materiálů
- KM – chemie krystalických materiálů

Interakce hmoty

- NEK – nekovalentní interakce
- ELC – elektrochemie
- SPM1/2 – spektroskopické metody
- FF – fotochemie a fotoelektrochemie
- BFCH – biofyzikální chemie

Fázové rovnováhy

- VVL – metody studia povrch. napětí
- SP – studium povrchů
- HS – heterogenní systémy

Termodynamika

- STD – statistická TMD

Modelování

- MOM – molekulové modelování
- MOMAT – modelování materiálů a nanomateriálů
- QCH – kvantová chemie

Kinetika

- RKPF – reakční kinetika v pevné fázi

Obecné kurzy

- PFCH – pokročilá FyzChem
- POK1/2 – pokročilé cvičení z FyzChem
- VKFC - opakování před státnicemi



Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

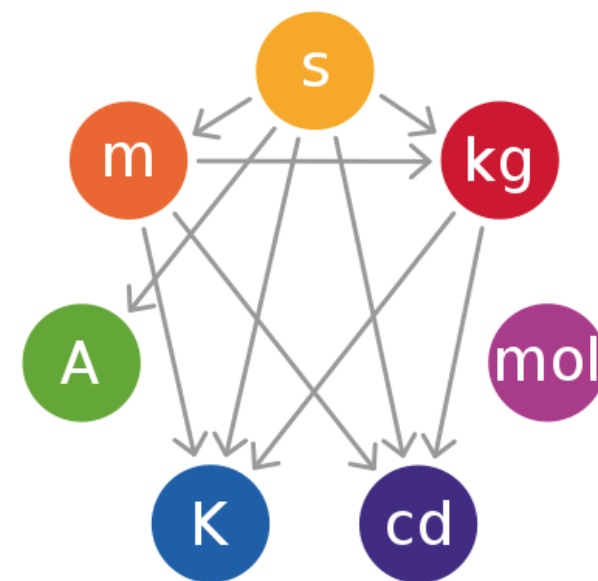
Fyzikálně chemický popis světa

Alias jednotky a vztahy

Popis vlastností látek – jednotky SI

- Kvalitativní vs. kvantitativní vlastnosti (popis pomocí standardů - jednotek)
- SI - Mezinárodní system jednotek

Veličina	název jednotky	značka
čas	sekunda	s
délka	metr	m
elektrický proud	ampér	A
hmotnost	kilogram	kg
látkové množství	mol	mol
svítivost	kandela	cd
teplota	kelvin	K



Přirozené jednotky

Voleny tak, aby vybrané základní konstanty měly číselnou hodnotu 1

Konstanta	Symbol	Rozměr	Hodnota v SI ^[1]
Rychlost světla ve vakuu	c	LT^{-1}	299 792 458 $m \cdot s^{-1}$ (přesně)
Redukovaná Planckova konstanta, nebo:	$\hbar = \frac{h}{2\pi}$	ML^2T^{-1}	1,054 571 800(13) $\times 10^{-34}$ J·s
- Planckova konstanta	h	ML^2T^{-1}	6,626 070 040(81) $\times 10^{-34}$ J·s
Gravitační konstanta, nebo:	G	$M^{-1}L^3T^{-2}$	6,674 08(31) $\times 10^{-11}$ N·m ² ·kg ⁻²
- racionalizovaná gravitační konstanta	$4\pi G$	$M^{-1}L^3T^{-2}$	8,386 90(39) $\times 10^{-10}$ N·m ² ·kg ⁻²
- 8π-násobek gravitační konstanty	$8\pi G$	$M^{-1}L^3T^{-2}$	1,677 379(79) $\times 10^{-9}$ N·m ² ·kg ⁻²
Boltzmannova konstanta, nebo:	k	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$	1,380 648 52(79) $\times 10^{-23}$ J·K ⁻¹
- dvojnásobek Boltzmannovy konstanty	$2k$	$ML^2T^{-2}\Theta^{-1}$	2,761 2970(16) $\times 10^{-23}$ J·K ⁻¹
Permitivita vakua, nebo	ϵ_0	$M^{-1}L^{-3}T^2Q^2$	8,854 187 817... $\times 10^{-12}$ F·m ⁻¹ (přesně) ^[pozn. 1]
- konstanta Coulombovy síly	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}$	$ML^3T^{-2}Q^{-2}$	8,987 551 787... $\times 10^9$ N·m ² ·C ⁻² (přesně) ^[pozn. 2]
Elementární náboj	e	Q	1,602 176 6208(98) $\times 10^{-19}$ C
Hmotnost elektronu	m_e	M	9,109 383 56(11) $\times 10^{-31}$ kg
Hmotnost protonu	m_p	M	1,672 621 898(21) $\times 10^{-27}$ kg

Bezrozměrné veličiny

Číselné hodnoty bez jednotek

- relativní tlak $p_r = p/p_0$

- relativní koncentrace látky X

$$[X] = \frac{c_X}{c_0} = \frac{\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}}{\frac{\text{mol}}{\text{dm}^3}} = 1$$

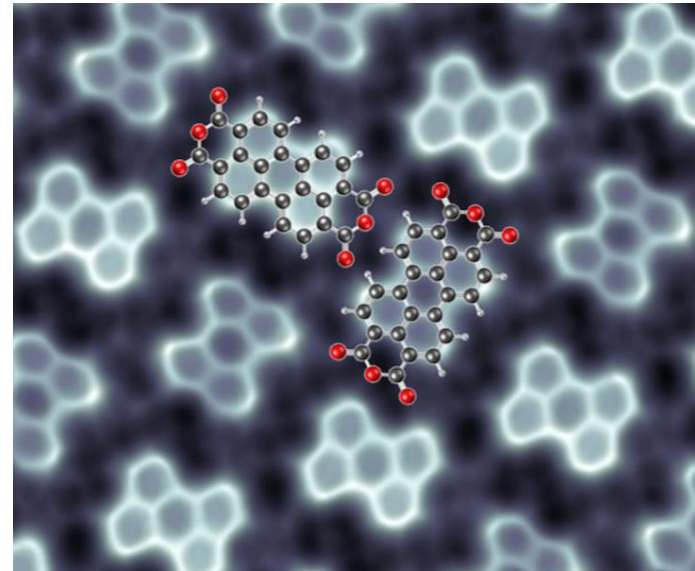
- zlomky – hmotnostní, objemový, molární

- transmittance $T(\Phi/\Phi_0)$

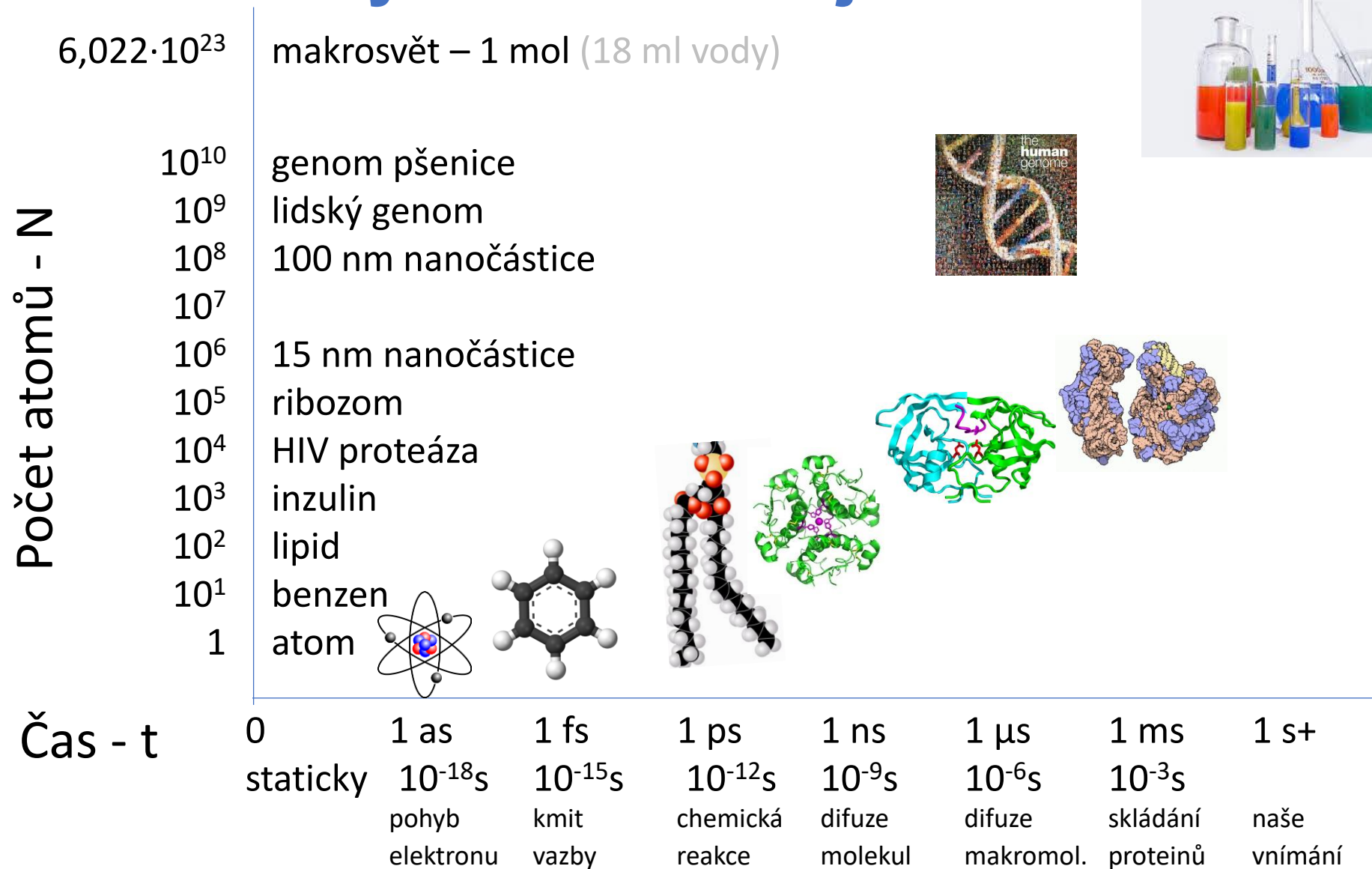
- absorbance $A = -\log T$

Mikrosvět vs. makrosvět

- makrosvět – poznatelný našimi smysly
- mikrosvět – elementární částice poznatelné pouze nepřímo (mikroskop, ...)



Škála chemických látek a dějů



Paradoxy mikrosvět

- diskrétní hladiny některých dynamických veličin
- dualismus vln a částic
- nekomutativnost aktu měření
- relace neurčitosti
- nedeterminismus kvantové teorie



Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

Matematický základ

CALCULUS MADE EASY

BY

SILVANUS P. THOMPSON

WHAT ONE FOOL CAN DO, ANOTHER CAN.

(Ancient Simian Proverb.)

<https://calculusmadeeasy.org/>

Logaritmy

- „Logaritmus je funkce, matematikáři odpustí, která z velmi velkých nebo velmi malých čísel umí udělat číslo mnohem hezčí a praktičtější.“

RNDr. Ing. Jiří Vozka, Ph.D, chemie.gjn.cz/druhroc/3_3_Teorie_pH.html

- Klasické typy:

- Dekadický: $\log_{10} x = \log(x) = \ln(x) / \ln(10)$
- Přirozený: $\log_e x = \ln(x) = \log_{10}(x) / \log_{10}(e)$
- Eulerovo číslo: $e = 2.718281828459045$

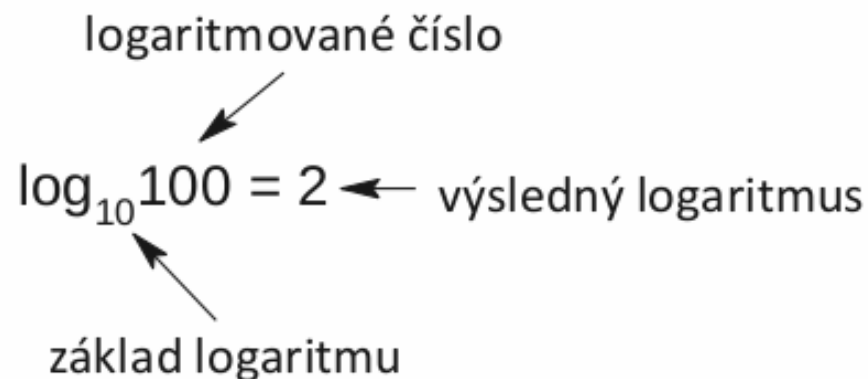
- $\log_{10} 1\,000\,000 = \log 10^6 = 6$

- $\log_{10} 0,001 = \log 10^{-3} = -3$

- $\log(10^6 + 10^4) \neq$

- $\log(10^6 \cdot 10^4) = \log 10^{10} = 6 + 4 = 10$

- $\log(10^6)^4 = \log(10^6 \cdot 10^6 \cdot 10^6 \cdot 10^6) = 4 \log(10^6) = 6 + 6 + 6 + 6 = 4 \cdot 6 = 24$
 $= \log(10^4 \cdot 10^4 \cdot 10^4 \cdot 10^4 \cdot 10^4 \cdot 10^4) = 6 \log(10^4) = 4 + 4 + 4 + 4 + 4 + 4 = 6 \cdot 4 = 24$



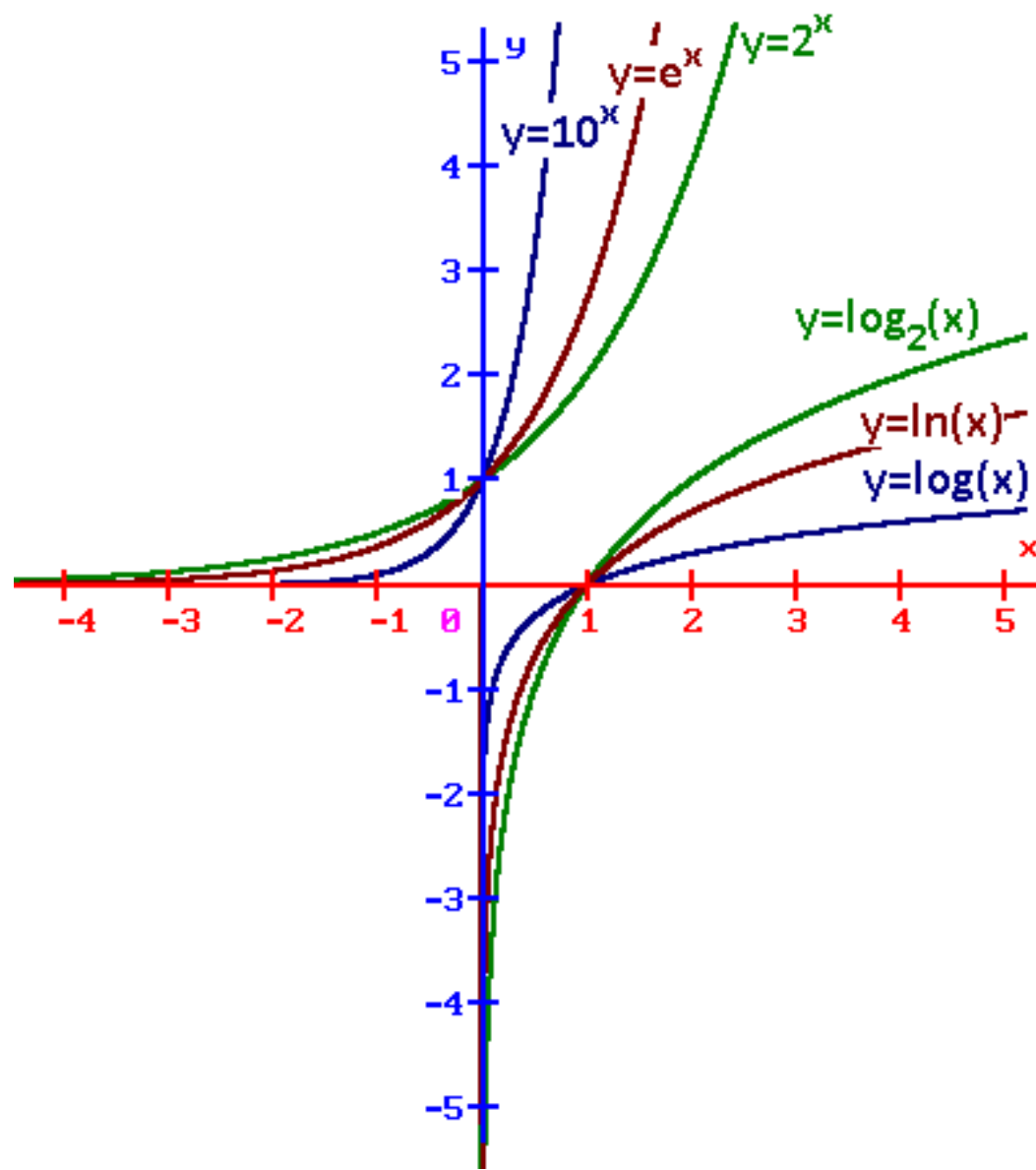
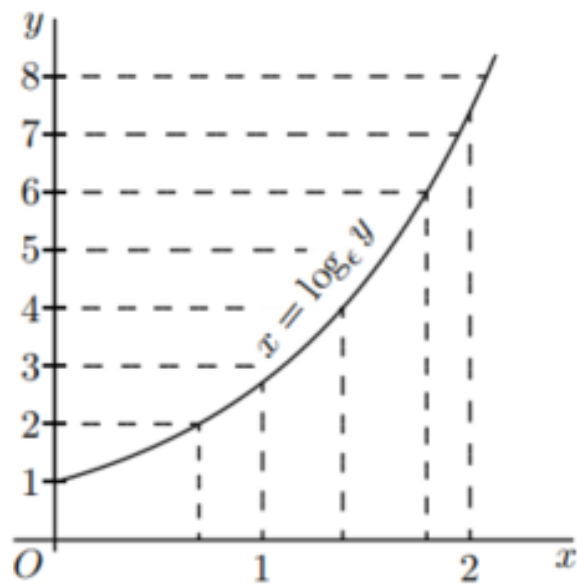
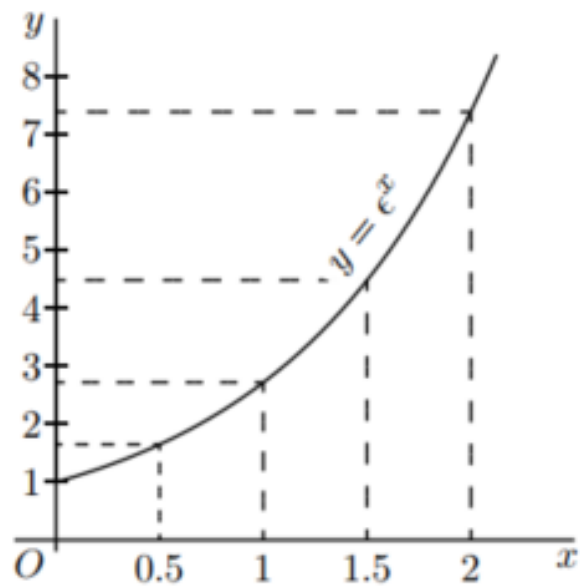
Exponenciální rovnice

logaritmická rovnice

$$\log_a b = x$$

exponenciální rovnice

$$a^x = b$$



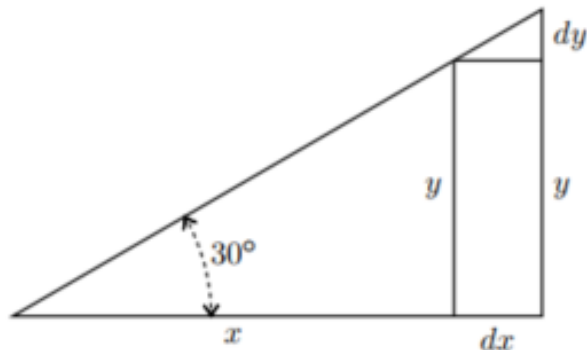
Derivace - dy/dx , $F'(x)$

- Derivace funkce je změna (růst či pokles) její hodnoty v poměru ke změně její proměnné, pro velmi malé změny proměnné $\frac{dy}{dx}$

(1) d which merely means “a little bit of.”

Thus dx means a little bit of x ; or du means a little bit of u . Ordinary mathematicians think it more polite to say “an element of,” instead of “a little bit of.” Just as you please. But you will find that these little bits (or elements) may be considered to be indefinitely small.

y	$\frac{dy}{dx}$
x^2	$2x$
x^3	$3x^2$
x^4	$4x^3$
x^n	$nx^{(n-1)}$
$\ln x$	$\frac{1}{x}$



Derivace funkce více proměnných

$$y = u \times v;$$

$$y + dy = (u + du) \times (v + dv)$$

$$= u \cdot v + u \cdot dv + v \cdot du + du \cdot dv.$$

Hodně malé * hodně malé = zanedbatelné

$$y + dy = u \cdot v + u \cdot dv + v \cdot du.$$

Po odečtení původní rovnice

$$dy = u \cdot dv + v \cdot du$$

Po podělení dx

$$\frac{dy}{dx} = u \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx}.$$

Integrální počet

$$\int dy = y + c$$

- Je vlastně sčítání (nekonečně) malých kousků

(2) $\int$ which is merely a long S , and may be called (if you like) “the sum of.”

Thus $\int dx$ means the sum of all the little bits of x ; or $\int dt$ means the sum of all the little bits of t . Ordinary mathematicians call this symbol “the integral of.” Now any fool can see that if x is considered as made up of a lot of little bits, each of which is called dx , if you add them all up together you get the sum of all the dx 's, (which is the same thing as the whole of x). The word “integral” simply means “the whole.” If you think of the duration of time for one hour, you may (if you like) think of it as cut up into 3600 little bits called seconds. The whole of the 3600 little bits added up together make one hour.

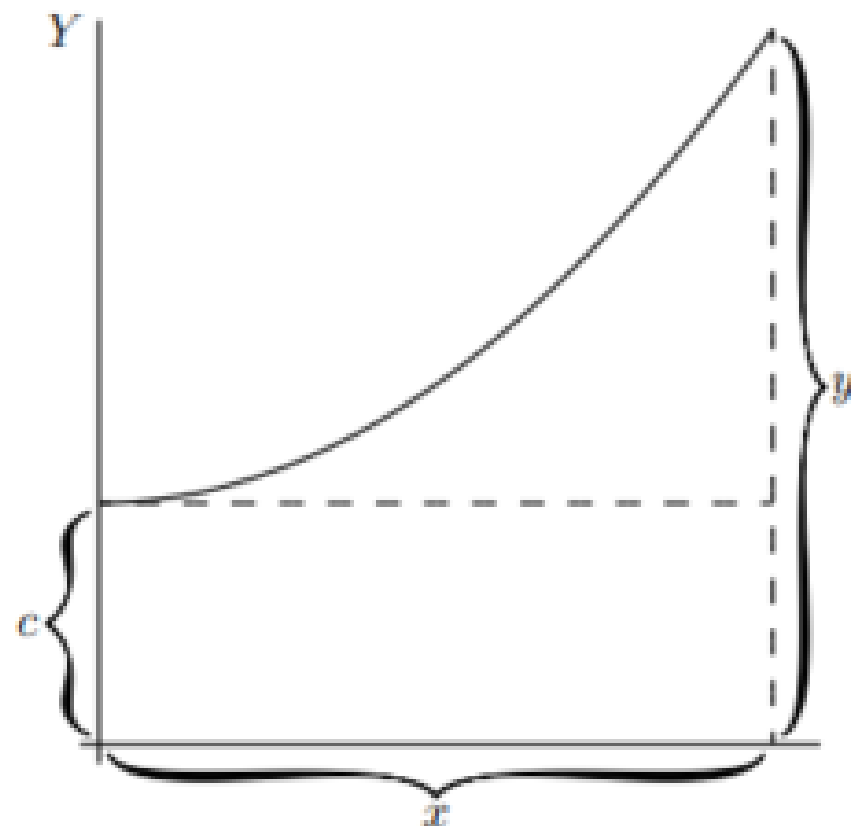


TABLE OF STANDARD FORMS.

$\frac{dy}{dx}$	$\longleftarrow y \longrightarrow$	$\int y \, dx$
Algebraic.		
1	x	$\frac{1}{2}x^2 + C$
0	a	$ax + C$
1	$x \pm a$	$\frac{1}{2}x^2 \pm ax + C$
a	ax	$\frac{1}{2}ax^2 + C$
$2x$	x^2	$\frac{1}{3}x^3 + C$
nx^{n-1}	x^n	$\frac{1}{n+1}x^{n+1} + C$
$-x^{-2}$	x^{-1}	$\log_e x + C$

$\frac{dy}{dx}$	$\longleftarrow y \longrightarrow$	$\int y \, dx$
Exponential and Logarithmic.		
e^x	e^x	$e^x + C$
x^{-1}	$\log_e x$	$x(\log_e x - 1) + C$
$0.4343 \times x^{-1}$	$\log_{10} x$	$0.4343x(\log_e x - 1) + C$
$a^x \log_e a$	a^x	$\frac{a^x}{\log_e a} + C$
$\frac{du}{dx} \pm \frac{dv}{dx} \pm \frac{dw}{dx}$	$u \pm v \pm w$	$\int u \, dx \pm \int v \, dx \pm \int w \, dx$
$u \frac{dv}{dx} + v \frac{du}{dx}$	uv	No general form known
$v \frac{du}{dx} - u \frac{dv}{dx}$	$\frac{u}{v}$	No general form known
$\frac{du}{dx}$	u	$ux - \int x \, du + C$

Diferenciální rovnice

- rovnice, kde jako neznámá vystupuje funkce a její derivace
- řád DR = řád nejvyšší derivace neznámé funkce v DR
- řešením DR – každá funkce na intervalu I, která na daném intervalu rovnici splňuje
tzv. separovatelné rovnice 1. řádu

$$y' = f(x)g(y)$$

$$\frac{dy}{dx} = f(x)g(y)$$

$$\frac{dy}{g(y)} = f(x)dx$$

separace proměnných

$$\int \frac{dy}{g(y)} = \int f(x)dx$$

integrace

Typická křivka ubývání $y = e^{-ax}$

(reakční kinetika, Lambert-Beerův zákon)

Oběcně všude, kde změna y (dy/dx) záleží na hodnotě y

$$\frac{dy}{dx} = -ay$$

$$\frac{1}{y} dy = -a \cdot dx$$

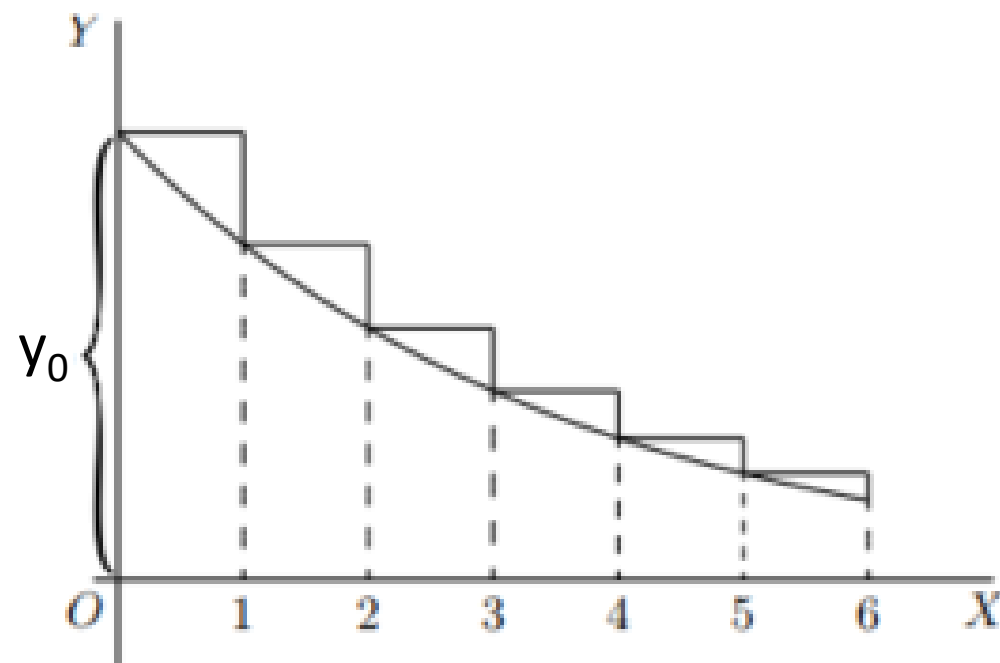
$$\int_{y_0}^y \frac{1}{y} dy = \int_{x_0}^x -a \cdot dx$$

$$[\ln y]_{y_0}^y = [-ax]_{x_0}^x$$

$$\ln \frac{y}{y_0} = -a(x - x_0)$$

$$\frac{y}{y_0} = e^{-a(x-x_0)}$$

$$y = y_0 \cdot e^{-ax}$$





Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

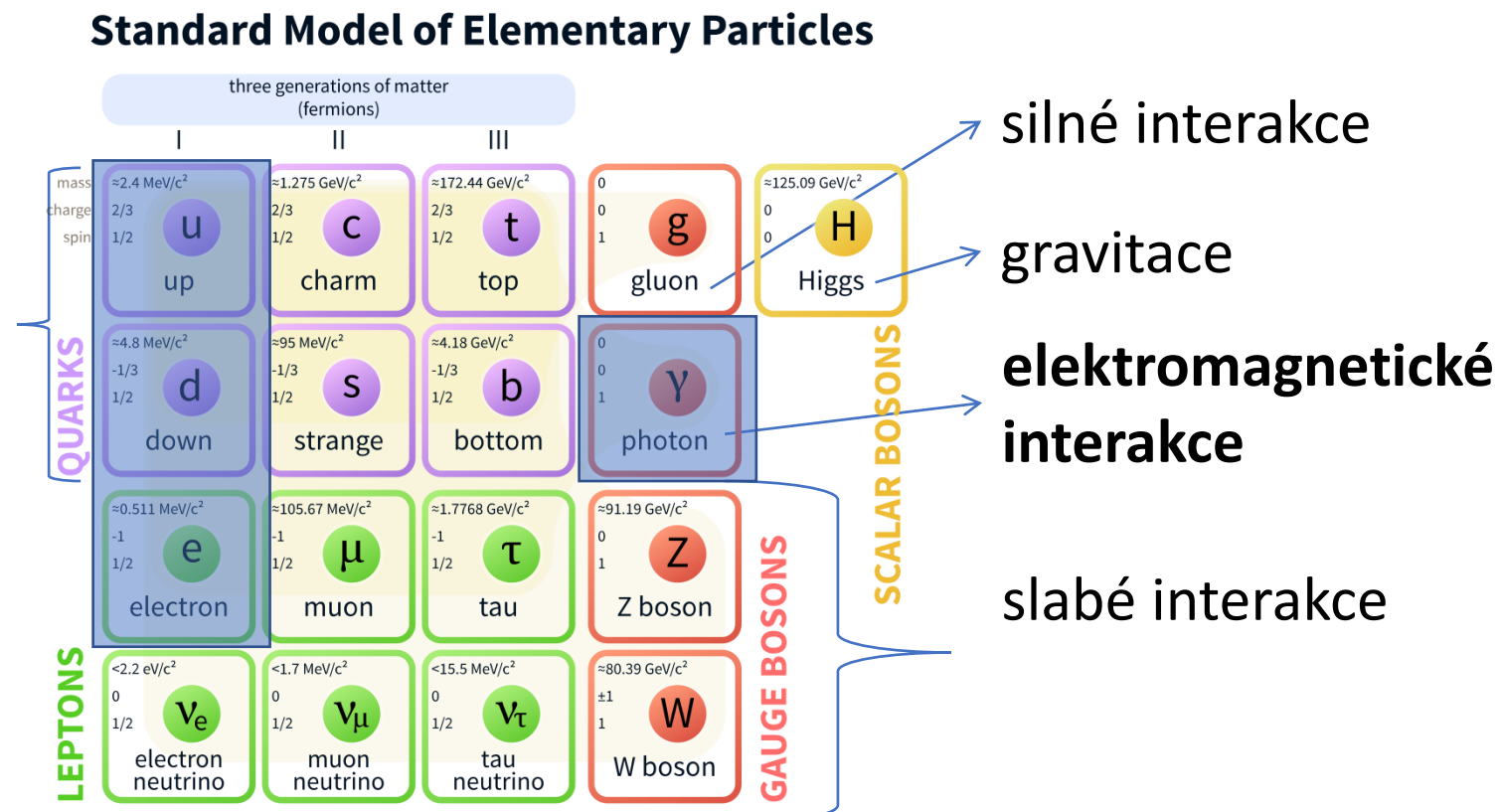
Stavba hmoty

Hmota

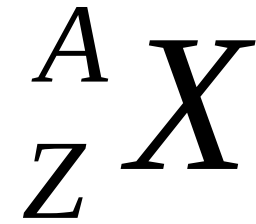
- Látka – vlastní materiální kostra hmoty
částice s nenulovou klidovou hmotností – hadrony a leptony (elektrony, protony a neutrony)
- Pole – zprostředkovává interakci mezi hmotnými částicemi.
částice s nulovou klidovou hmotností (fotony)

tvoří hadrony
protony, neutrony,
mesony, baryony

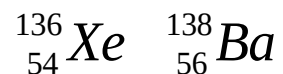
Realisticky zajímavé
pro většinu chemie



Atomy

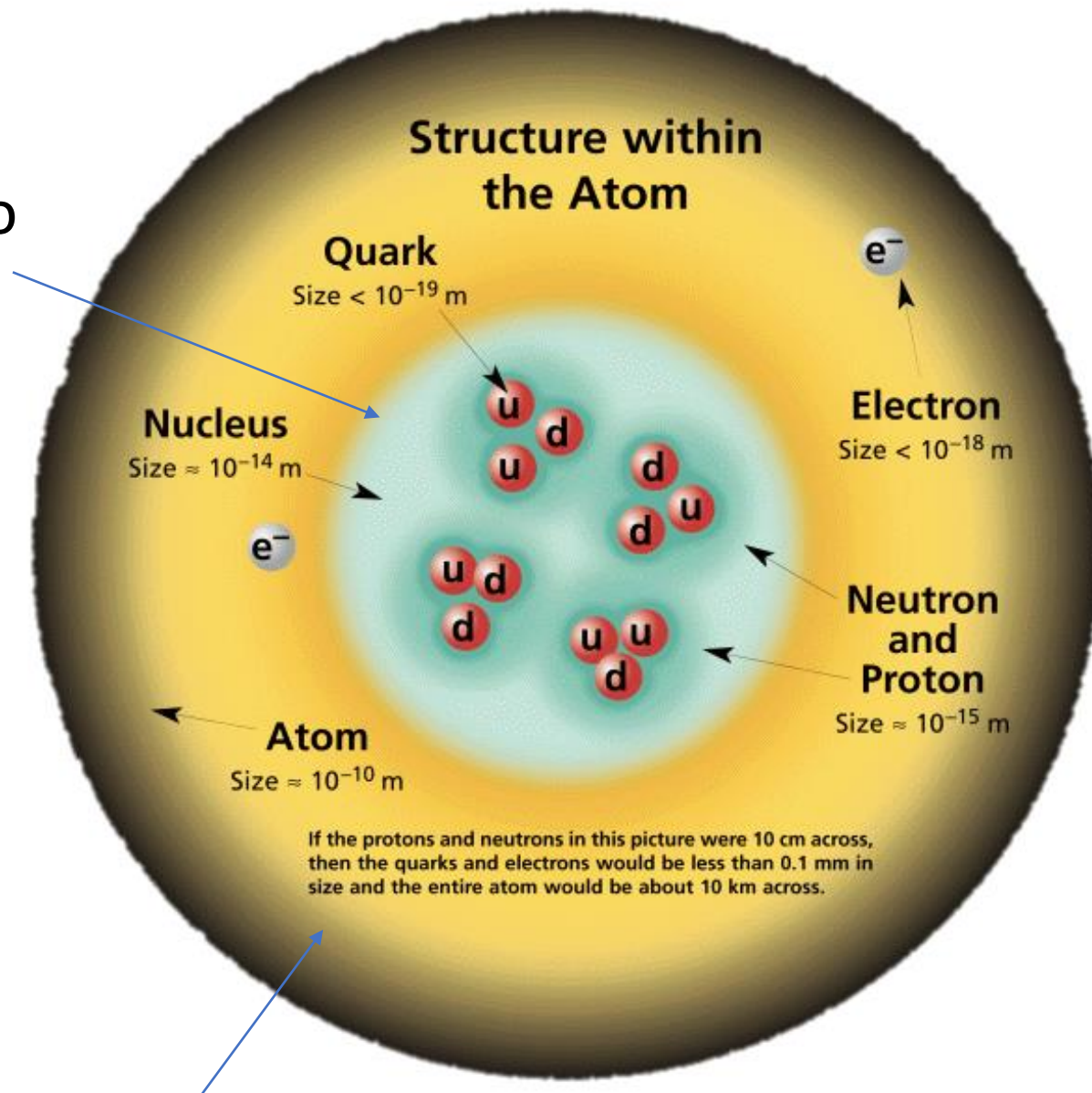


- **Atomové** (protonové) **číslo - Z** - udává počet protonů v jádře, počet elektronů v neutrálním stavu a pořadí v periodickém systému
- **Nukleonové** (hmotnostní) **číslo - A** - udává celkový počet nukleonů v jádře (celkový počet protonů a neutronů)
- Izotop (nuklid) – liší se nukleonovým číslem
- Izobar – liší se protonovým číslem (různé prvky)
- Izoton – liší se protonovým i nukleonovým číslem při stejném počtu neutronu



Stavba atomu

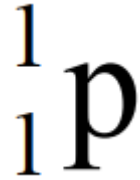
Atomové jádro



Elektronový obal

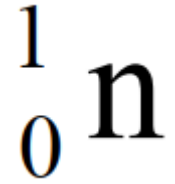
Detaily viz KFC/SAM, či KFC/UOFCH

Proton - p^+



- náboj
 - $+1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- hmotnost
 - $m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \Rightarrow \text{baryon, hadron}$
 - $m_p = 1836 m_e$
- spinové kvantové číslo
 - „spin“ $\frac{1}{2} \Rightarrow \text{fermion}$
- tvoří jej tři kvarky – up, up, down

Neutron - n

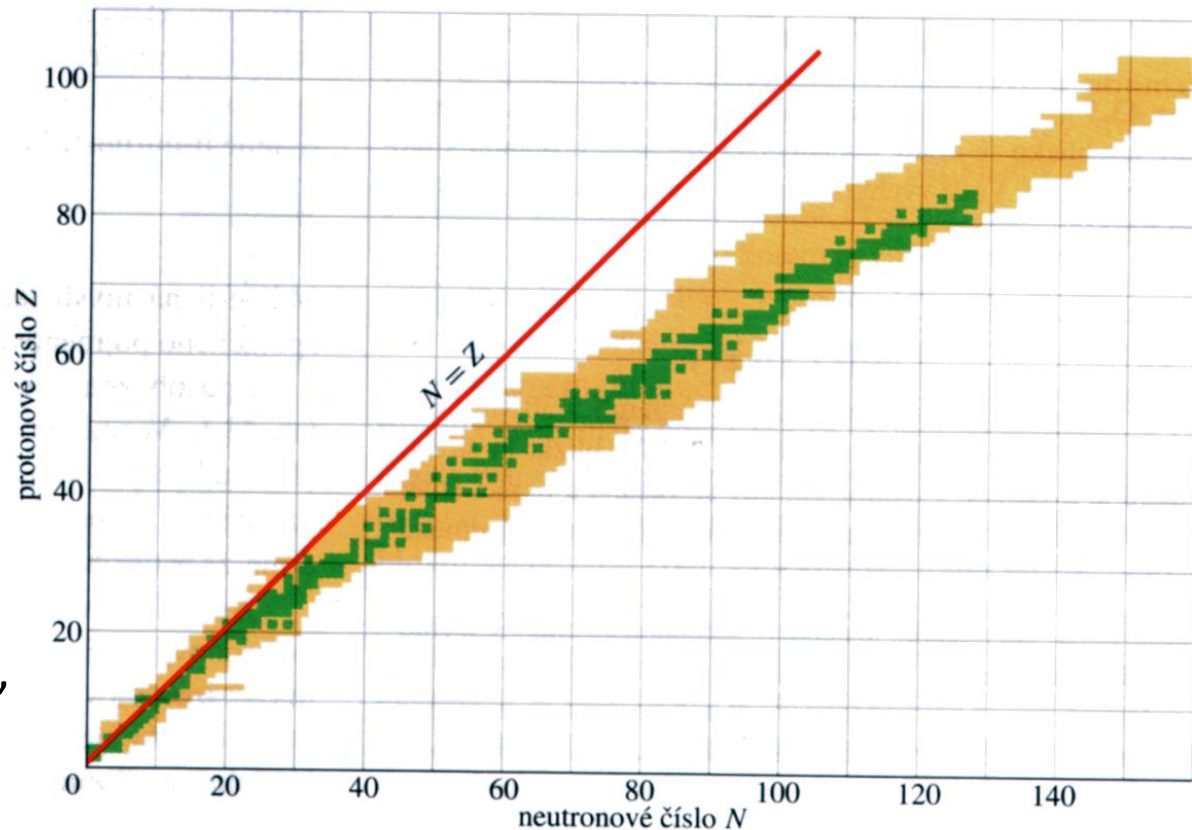


- náboj
 - 0 C
- hmotnost
 - $m_n = 1.67493 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \Rightarrow \text{baryon, hadron}$
 - $m_n = 1839 m_e$
- spinové kvantové číslo
 - „spin“ $\frac{1}{2} \Rightarrow \text{fermion}$
- tvoří jej tři kvarky – up, down, down
- volný neutron se rozpadá
 - na proton, elektron a elektronové neutrino
 - (poločas 15.2 min)

Atomové jádra a jejich (ne)stabilita

- Radioaktivita – spontánní jaderný rozpad
- Emise záření
 - α – jádra ${}^4\text{He}$
 - β – e^-
 - γ – fotony (high E)

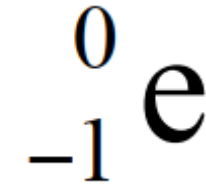
graf známých nuklidů,
zelené – stabilní,
béžové radioaktivní



Atomové jádra v chemii

- Jaderná energetika (štěpení, fúze)
- Jaderná chemie
 - Například příprava radiofarmak pro léčbu rakoviny
- Izotopické značení
 - Sledování
- Analýza struktur molekul
 - Nukleární magnetická rezonance (NMR)
 - Magnetic resonance imaging (MRI)

Elektron - e^-



- náboj
 - $-1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 - považuje se za elementární náboj, značí se **e**
- hmotnost
 - $m_e = 9.10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \Rightarrow \text{lepton}$
- spinové kvantové číslo
 - „spin“ $\frac{1}{2} \Rightarrow \text{fermion}$
 - vnitřní moment hybnosti $+\frac{1}{2}$ a $-\frac{1}{2}$
- tvoří Elektronový obal



Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

Výstavba elektronového obalu

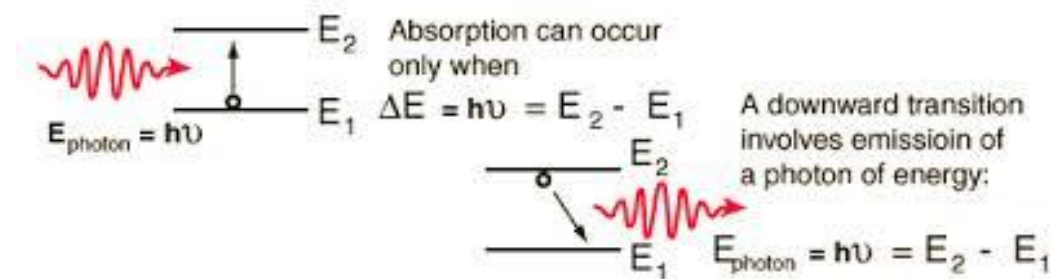
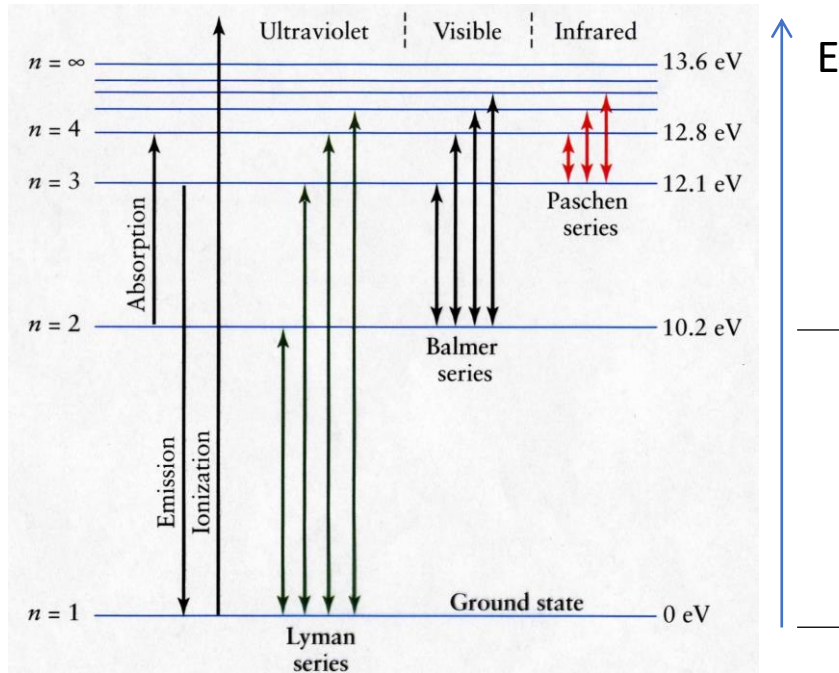
Elektronový obal

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

V mikrosvětě dochází k tzv. **kvantování energie dle Schrödingerovy rovnice**
 Přípustné energie vytvářejí soubor oddělených (diskrétních) **energetických hladin**.

- atomové orbitaly popsány vlnovou funkcí $\Psi_{nlm}(r, \varphi, \theta) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\varphi, \theta)$

Přechod mezi hladinami je spojen s přijetím nebo odevzdáním energie E , která odpovídá energetické vzdálenosti hladin.

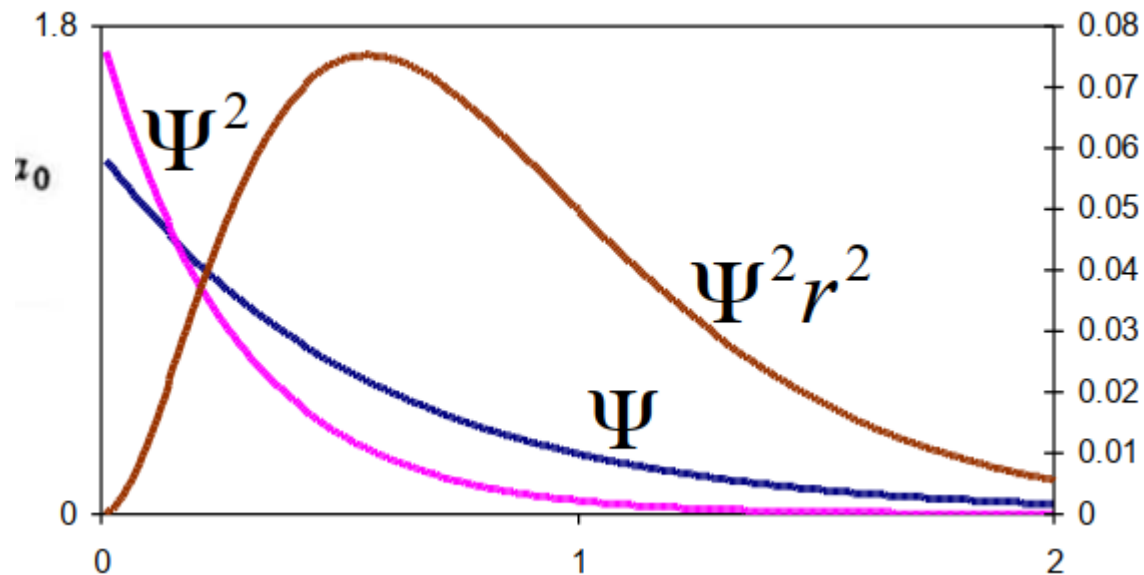


$$h\nu$$

Přechody hladin u vodíkového atomu

Atomové orbitaly

- Stavy elektronů v atomu
- Vlnová funkce Ψ nemá fyzikální interpretaci – ale Ψ^2 odpovídá hustotě pravděpodobnosti
- Závisí na jednotlivých tzv. kvantových číslech – n, l, m, s



n – hlavní kvantové číslo $\rightarrow$ energie
 l – vedlejší kv. č. $\rightarrow$ tvar orbitalu
 m – magnetické kv. č. $\rightarrow$ orientace orbitalu
 s – spinové kv. č. $\rightarrow$ točivý moment

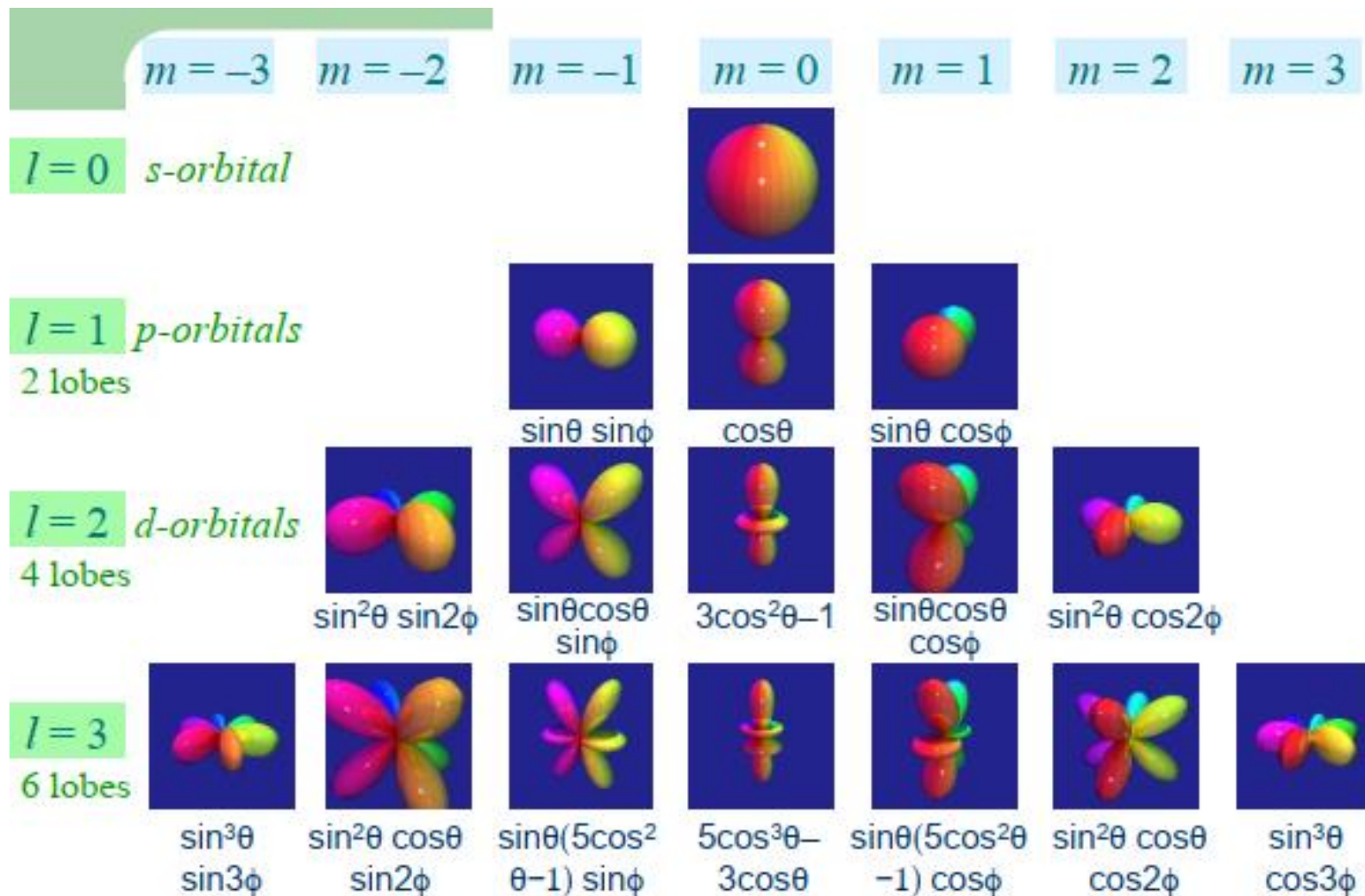
Vlnové funkce

n – hlavní kvantové číslo $\rightarrow$ energie

l – vedlejší kv. č. $\rightarrow$ tvar orbitalu

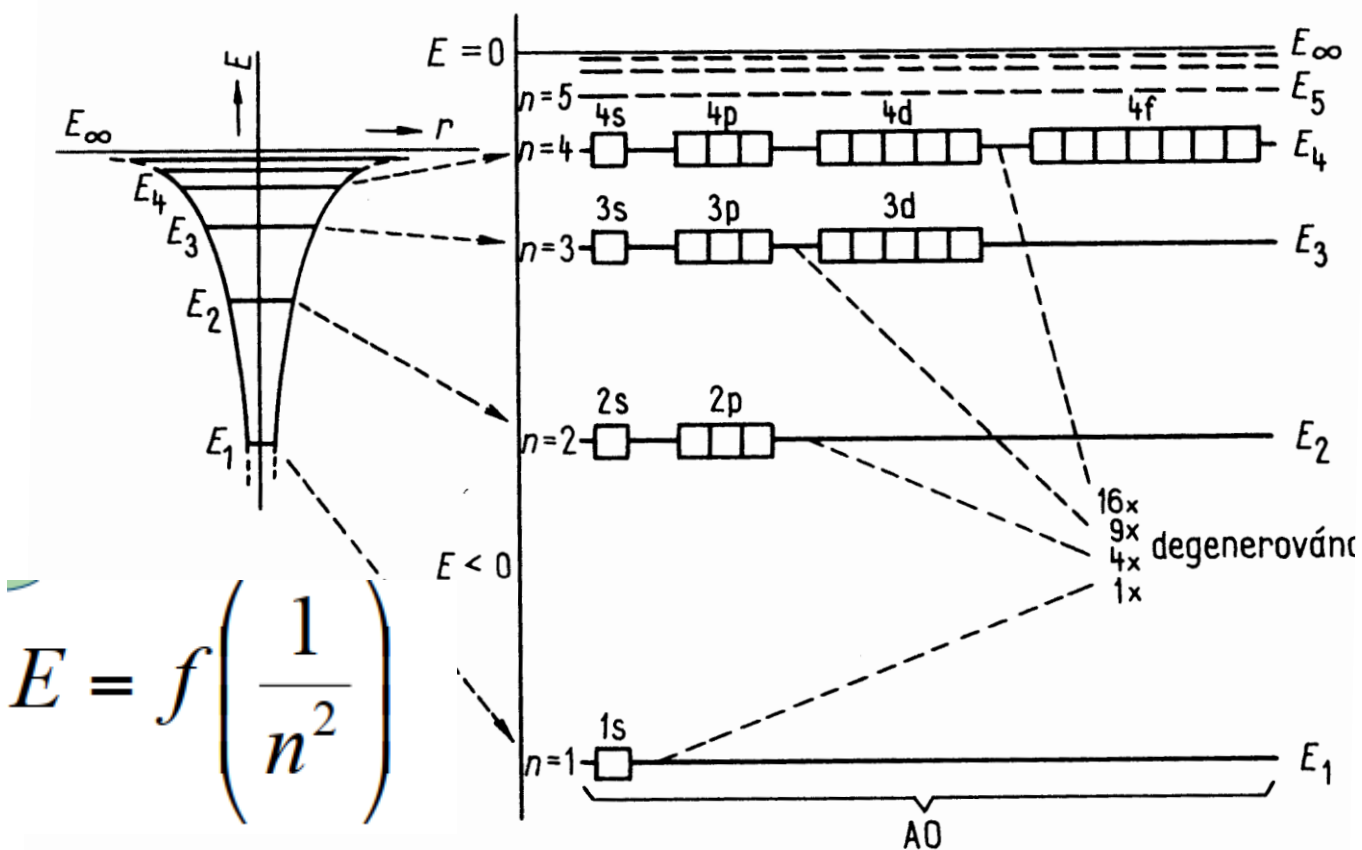
m – magnetické kv. č. $\rightarrow$ orientace orbitalu

s – spinové kv. č. $\rightarrow$ točivý moment

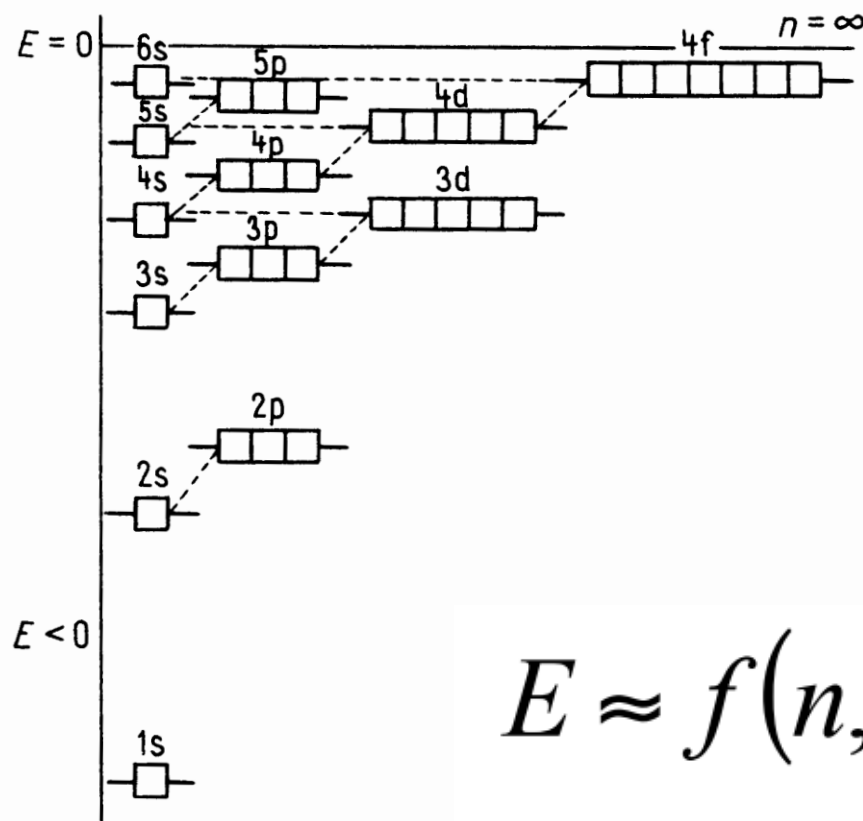


Energetické hladiny atomů

- Jedno elektronové atomy
Vodík, He^+ , Li^{2+}



- více elektronové atomy
komplexnější kvůli e-e interakcím



$$E \approx f(n, l)$$

Elektronový obal

- elektrony v atomu NESMÍ mít všechna 4 kvantová čísla shodná (**Pauliho vylučovací princip**)
- degenerované stavy
 - 1s, 2s, **2p** (2px, 2py, 2pz) ...
- **výstavbový princip** („Aufbau principle“)
 - $1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s \sim 3d < 4p < 5s \sim 4d \dots$
- elektronová slupka – elektrony se stejným n
 - $2n^2$, 2 (K), 8 (L), 18 (M) ...
 - uzavřená slupka – úplné obsazení hladiny l , např. s^2 , p^6
- **maximální multiplicita (Hund)**
 - Tj.

↑↓	↑	↑
----	---	---

 a ne

↑↓	↑↓	
----	----	--

Elektronová konfigurace

Periodická tabulka prvků řazená dle elektronové konfigurace

Perioda/Energie	Hlavní kvantové číslo	Periodická tabulka prvků řazená dle elektronové konfigurace																																
		s (sharp)		p (principal)						d (diffuse)										f (fundamental)														
		1	2	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	
7	Q	Fr	Ra	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuq	Ac	Th	Db	Sg	Bh	Hs	Mt			Rg		Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk		Cf	Es	Fm	Md	No	
n = 7		87	88	113	114	115	116	117	118	89	90	105	106	107	108	109			110	111	91	92	93	94	95	96	97		98	99	100	101	102	
6	P	Cs	Ba	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	La									Au		Ce		Pr	Nd	Pm	Sm	Eu		Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
n = 6		55	56	81	82	83	84	85	86	57	72	73	74	75	76	77			78	79	58		59	60	61	62	63		65	66	67	68	69	70
5	O	Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	Y	Zr								Cd															
n = 5		37	38	49	50	51	52	53	54	39	40								46															
4	N	K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	Sc	Ti	V							Cu															
n = 4		19	20	31	32	33	34	35	36	21	22	23							29															
3	M	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar																									
n = 3		11	12	13	14	15	16	17	18																									
2	L	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne																									
n = 2		3	4	5	6	7	8	9	10																									
1	K	H	He																															
n = 1		1	2																															

● Jeden elektron chybí v orbitálu s
● Dva elektrony zaplnily orbital 4d namísto orbitalu 5s (Pd)
● Jeden orbital přebývá v orbitálu d
● Dva elektrony zaplnily orbital 6d namísto orbitalu 5f (Th)

XX - Alkalické kovy
XX - Kovy alkalických zemin
XX - Lanthanoidy
XX - Aktinoidy

XX - Přechodné kovy
XX - Kovy
XX - Polokovy
XX - Nekovy

XX - Halogeny
XX - Vzácné plyny

© Sodomka - Ženíšek, 2013

Br: [Ar] 4s² 3d¹⁰ 4p⁵

výjimky

Cr: ne [Ar] 4s² 3d⁴ ale [Ar] 4s¹ 3d⁵

Ag: ne [Kr]5s² 4d⁹ ale [Kr]5s¹ 4d¹⁰

Cu: ne [Ar]4s² 3d⁹ ale [Ar]4s¹ 3d¹⁰

- **Vnitřní elektrony** popisovány pomocí posledního halogenu a jsou většinou netečné (ale charakteristické pro atom)
- **Valenční elektrony** vypsány účastní se chemických reakcí a mají menší energie



Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

Periodické trendy

Periodická tabulka

Stav k 16. 2. 2022

Periodické trendy

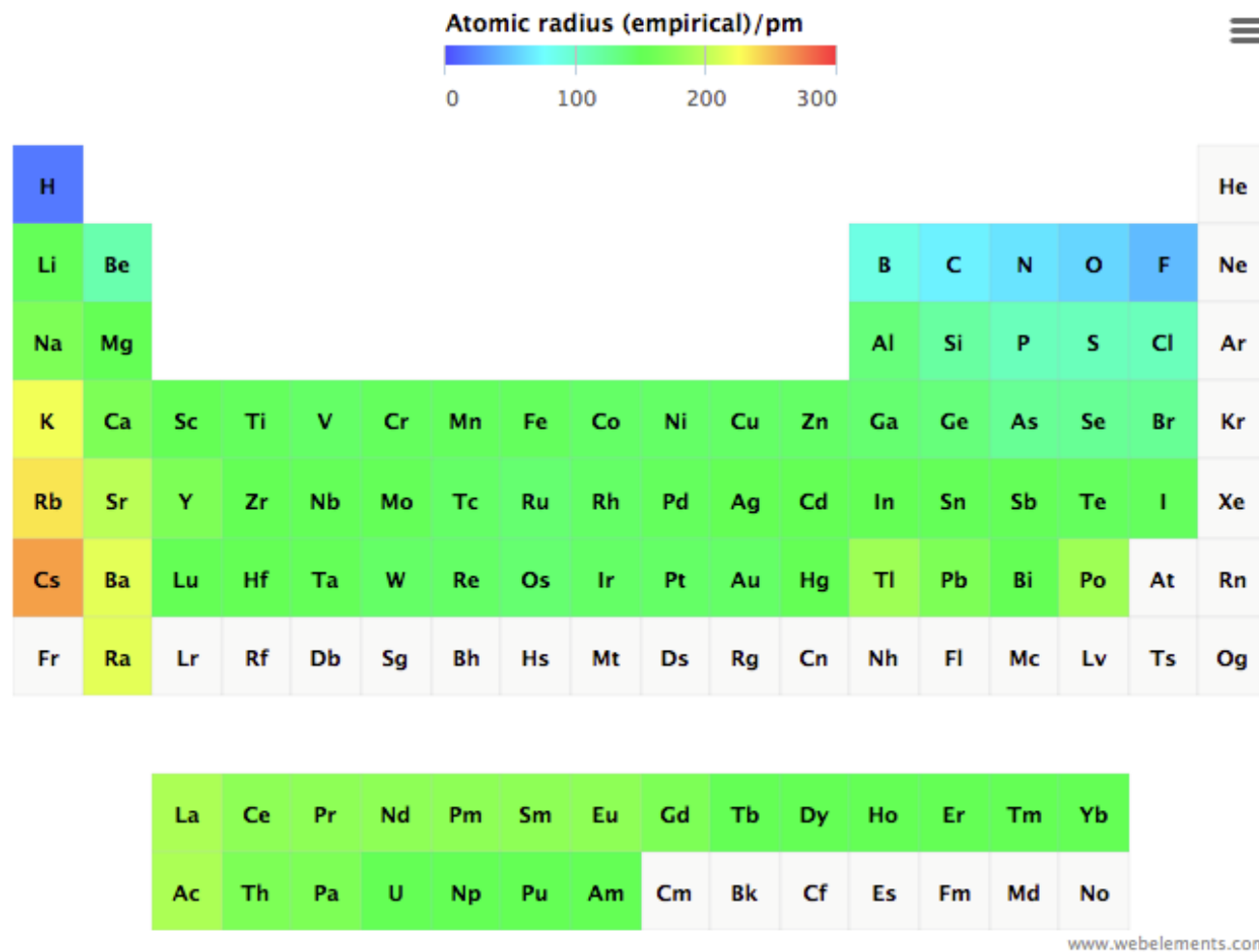
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
															Pniktogeny	Chalkogeny	Halogeny		
1	1 H Vodík 1,008	Atomic Značka Název Hmotnost																2 He Helium 4,0026	
2	3 Li Lithium 6,94	4 Be Beryllium 9,0122																	10 Ne Neon 20,180
3	11 Na Sodík 22,990	12 Mg Hořčík 24,305																	18 Ar Argon 39,948
4	19 K Draslík 39,098	20 Ca Vápník 40,078	21 Sc Skandium 44,956	22 Ti Titan 47,867	23 V Vanad 50,942	24 Cr Chrom 51,996	25 Mn Mangan 54,938	26 Fe Železo 55,845	27 Co Kobalt 58,933	28 Ni Nikl 58,693	29 Cu Měď 63,546	30 Zn Zinek 65,38	31 Ga Gallium 69,723	32 Ge Germanium 72,630	33 As Arsen 74,922	34 Se Selen 78,971	35 Br Brom 79,904	36 Kr Krypton 83,798	
5	37 Rb Rubidium 85,468	38 Sr Stroncium 87,62	39 Y Yttrium 88,906	40 Zr Zirkonium 91,224	41 Nb Niob 92,906	42 Mo Molybden 95,95	43 Tc Technecium (98)	44 Ru Ruthenium 101,07	45 Rh Rhodium 102,91	46 Pd Palladium 106,42	47 Ag Stříbro 107,87	48 Cd Kadmium 112,41	49 In Indium 114,82	50 Sn Cín 118,71	51 Sb Antimon 121,76	52 Te Tellur 127,60	53 I Jod 126,90	54 Xe Xenon 131,29	
6	55 Cs Cesium 132,91	56 Ba Baryum 137,33	57–71 89–103	72 Hf Hafnium 178,49	73 Ta Tantal 180,95	74 W Wolfram 183,84	75 Re Rhenium 186,21	76 Os Osmium 190,23	77 Ir Iridium 192,22	78 Pt Platina 195,08	79 Au Zlato 196,97	80 Hg Rtut 200,59	81 Tl Thallium 204,38	82 Pb Olovo 207,2	83 Bi Bismut 208,98	84 Po Polonium (209)	85 At Astat (210)	86 Rn Radon (222)	
7	87 Fr Francium (223)	88 Ra Radium (226)		104 Rf Rutherfordium (267)	105 Db Dubnium (268)	106 Sg Seaborgium (269)	107 Bh Bohrium (270)	108 Hs Hassium (277)	109 Mt Meitnerium (278)	110 Ds Darmstadtium (281)	111 Rg Roentgenium (282)	112 Cn Kopernicium (285)	113 Nh Nihonium (286)	114 Fl Flerovium (289)	115 Mc Moscovium (290)	116 Lv Livermorium (293)	117 Ts Tennessin (294)	118 Og Oganesson (294)	
Pro prvky s nestabilními izotopy, je hmotnostní číslo izotopu s nejdelším polčasem rozpadu v závorce.																			
	57 La Lanthan 138,91	58 Ce Cer 140,12	59 Pr Praseodym 140,91	60 Nd Neodym 144,24	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150,36	63 Eu Europium 151,96	64 Gd Gadolinium 157,25	65 Tb Terbium 158,93	66 Dy Dysprosium 162,50	67 Ho Holmium 164,93	68 Er Erbium 167,26	69 Tm Thulium 168,93	70 Yb Ytterbium 173,05	71 Lu Lutecium 174,97				
	89 Ac Aktinium (227)	90 Th Thorium 232,04	91 Pa Protaktinium 231,04	92 U Uran 238,03	93 Np Neptunium (237)	94 Pu Plutonium (244)	95 Am Americium (243)	96 Cm Curium (247)	97 Bk Berkelium (247)	98 Cf Kalifornium (251)	99 Es Einsteinium (252)	100 Fm Fermium (257)	101 Md Mendelevium (258)	102 No Nobelium (259)	103 Lr Lawrencium (266)				

Velikost atomu

- atomový poloměr není přesně definován
 - jak blízko se dva atomy mohou přiblížit v různých vazebných interakcích
 - podle vyhasínání pravděpodobnosti nalezení elektronů
 - na základě vazebných vzdáleností
 - kovalentní, iontový, vdW poloměr, atomový poloměr (mřížka krystalu atomu)

Empirický kovalentní atomový poloměr

zmenšuje se v rámci periody směrem zleva doprava a roste shora dolů



Ionizační energie, elektronová afinita

- **ionizační energie IE** – potřebná na odtržení elektronu z atomu



- **druhá ionizační energie** – potřebná na odtržení elektronu z kationtu



- **elektronová afinita EA** – energie, která se uvolní při vzniku aniontu

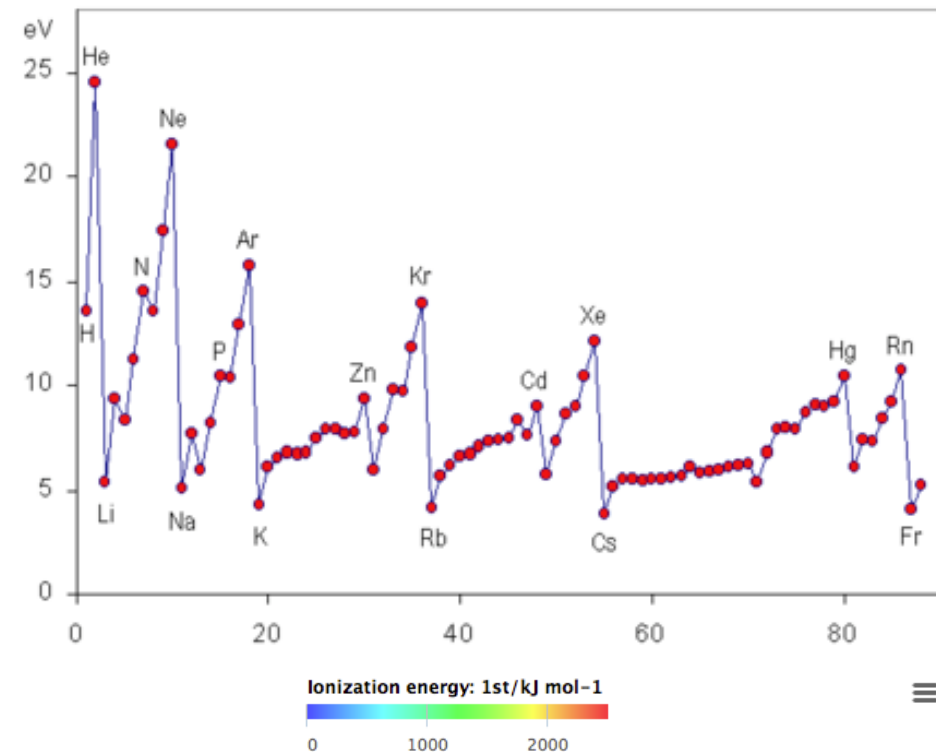


- ionizační energie IE – pro vodík = 13.6 eV
- ionizační energie lithia
 1. 5.4 eV
 2. 75.63 eV
 3. 122.30 eV

Ionizační potenciál (IE)

Po pohlcení fotonu atomem, dojde k přesunu elektronu z hladiny **v základním stavu** do **vyšší energetické hladiny** až k vyražení el. z atomu.

Kationt	Energie (kJ/mol)
Mg ⁺	738
Mg ²⁺	1450
Mg ³⁺	7730

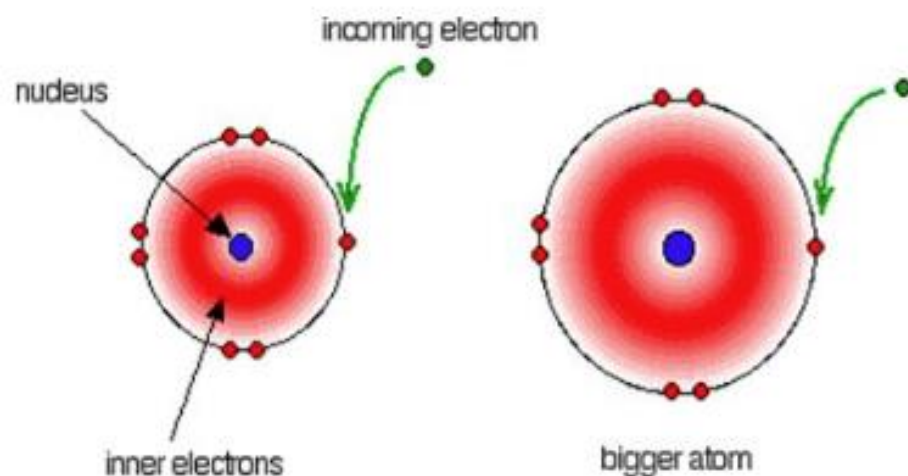


H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

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

Elektronová afinita (EA)

Energie, která se uvolní při vzniku aniontu ze základního stavu



<http://www.chemguide.co.uk/inorganic/group7/eadia.gif>

Electron affinity/kJ mol⁻¹



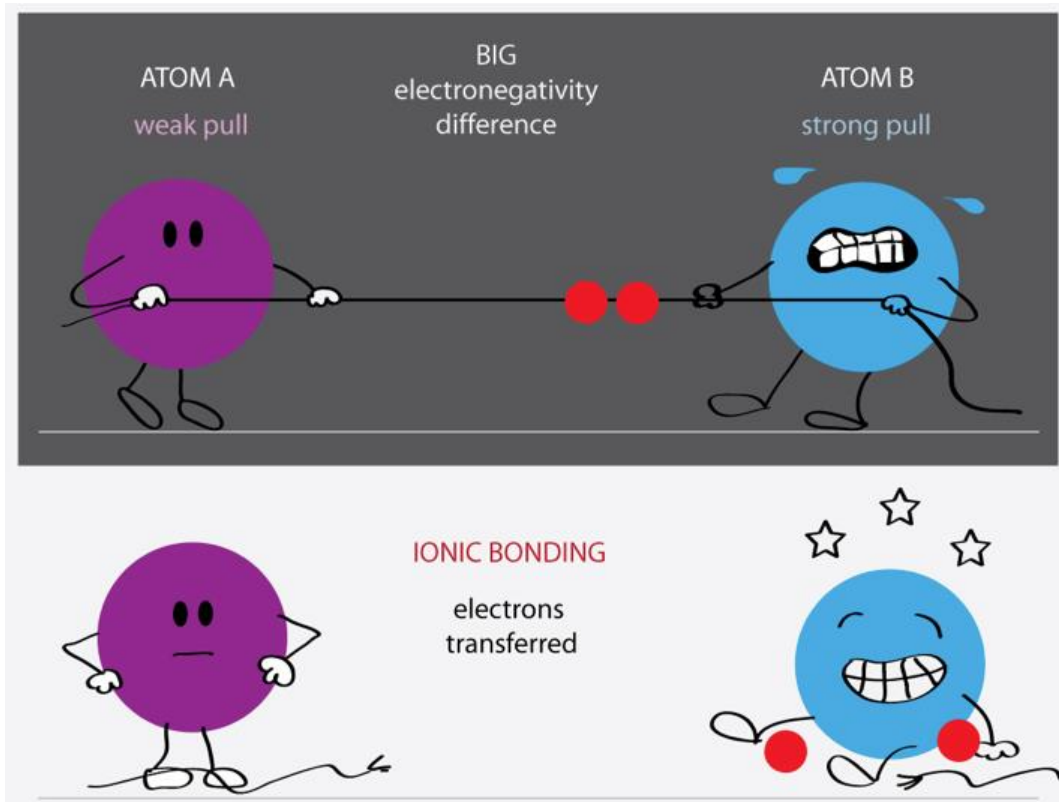
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

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

Elektronegativita

schopnost atomu přitahovat elektrony společné chemické vazby
(polarita vazby)

Electronegativity (Allred-Rochow)/Pauling scale



<http://surfguppy.com/ionic-and-covalent-bonding/electronegativity-bond-scale/>

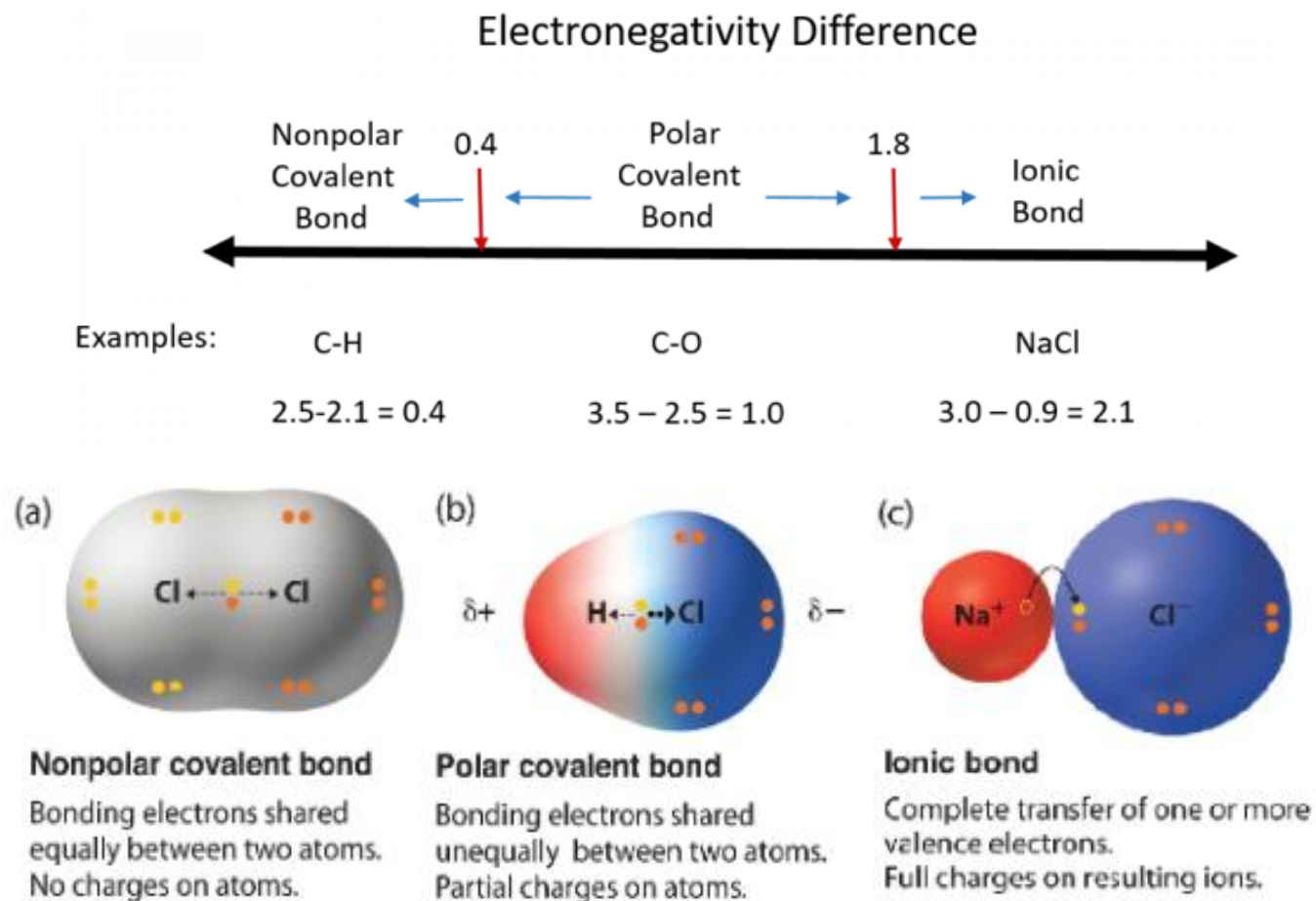
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og

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

www.webelements.com

Polarita vazby

- různé prvky mají různou **elektronegativitu** - ΔX (míru schopnosti poutat valenční elektrony)





Univerzita Palackého
v Olomouci



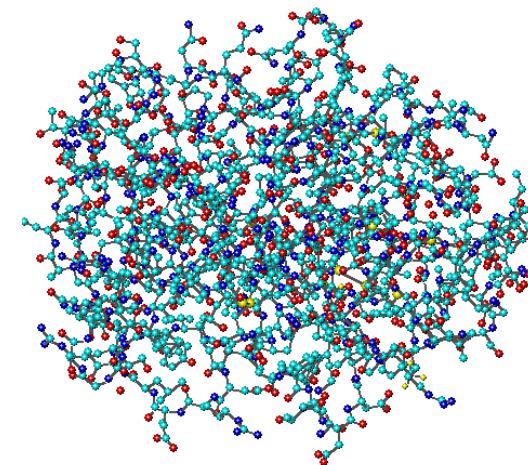
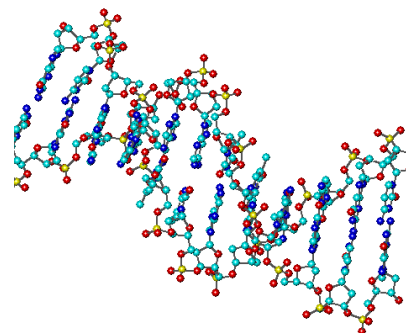
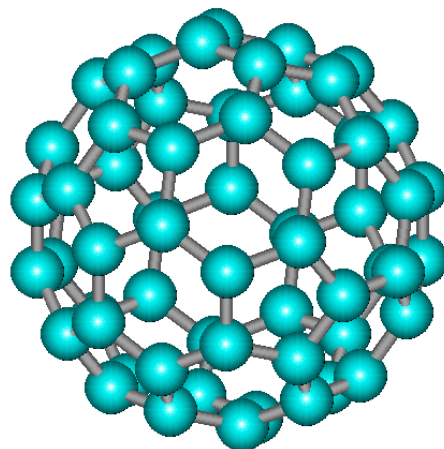
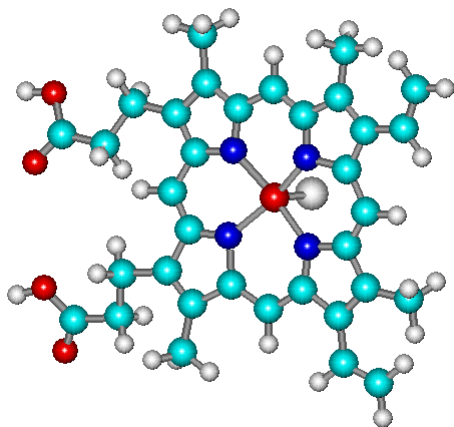
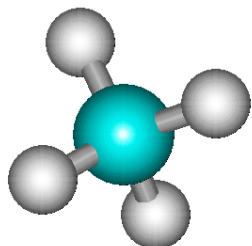
KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

Molekuly

Chemická vazba

Molekula – definice IUPAC

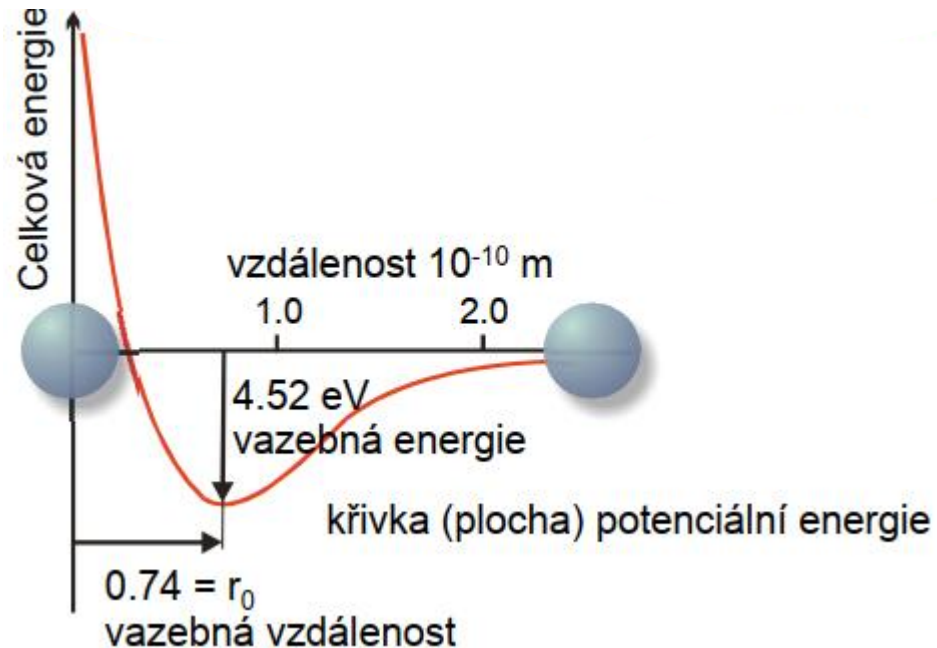
- elektricky neutrální entita sestávající z více nežli jednoho atomu. Přesně, molekula, v níž je počet atomů větší nežli jedna, musí odpovídat snížení na ploše potenciální energie, které je dostatečně hluboké, aby udrželo alespoň vibrační stav.
- nejmenší částice látky schopná samostatné existence a zachovávající základní chemické vlastnosti dané látky



Proč existují molekuly?

- celková energie atomů v molekule je nižší než celková energie izolovaných atomů =>

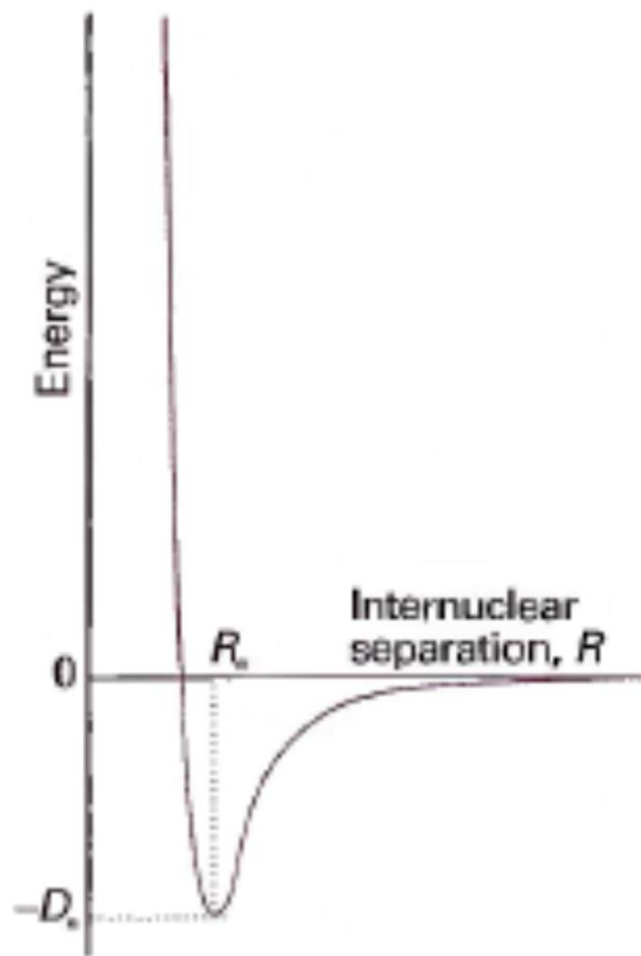
Vzniká **chemická vazba**



Interakce v našem mikrosvětě

Interakce	protony	at.jádra	atomy	molekuly
	+	+	+	+
	neutrony	elektrony	atomy	molekuly
Vzniká	at. jádra	atomy	molekuly	jiné molekuly a mol. klastry
T (K)	10^8	10^3 - 10^4	10^2 - 10^3	10-400
	Fyzika			
		Chemie		
			Biologie	

Kovalentní a nekovalentní interakce



- odlišný původ

Kov I – překryv částečně obsazených orbitalů

Nekov I – elektrické vlastnosti molekul

- rozdílné vlastnosti ($\Delta G = \Delta H - T\Delta S$)

ΔE (kcal/mol) R (Å)

entropie

KI - ~ 100

1.2 - 1.6

nedůležitá

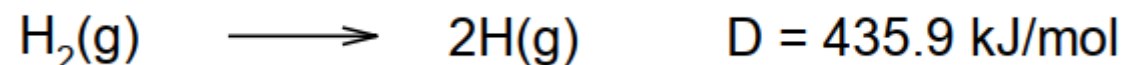
NI - ~ 1 – 5

2.0 - 5.0

klíčová

Vazebná/Disociační energie

- pro oddělení dvou atomů spojených vazbou je třeba dodat energii – **disociační energii vazby**

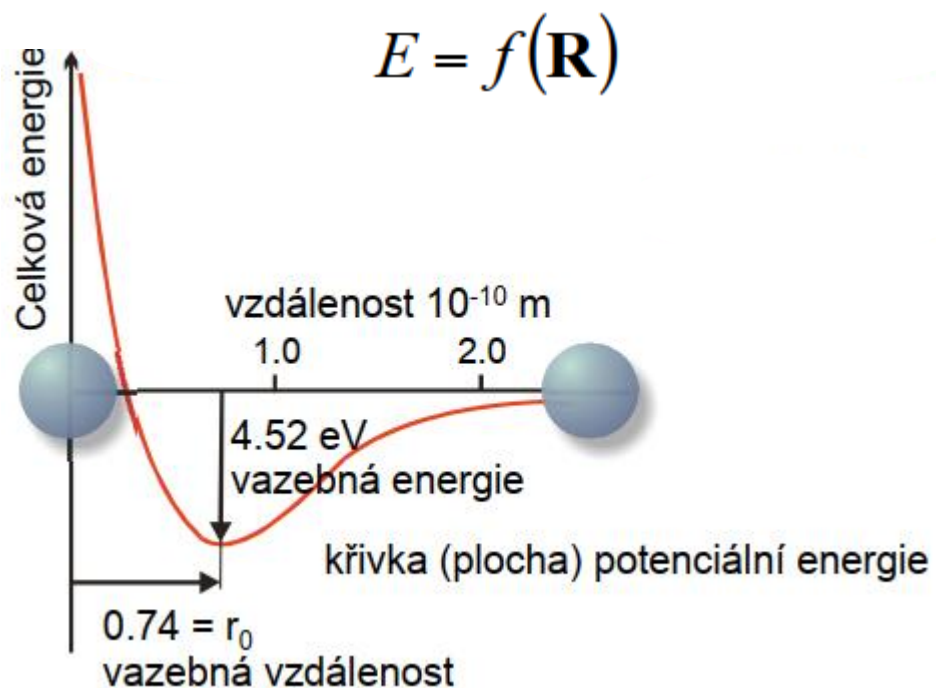


- disociační energie je rovna energii, která se uvolní při tvorbě vazby (má jen opačné znaménko, důsledek zákona zachování energie)

Plocha potenciální energie (PES)

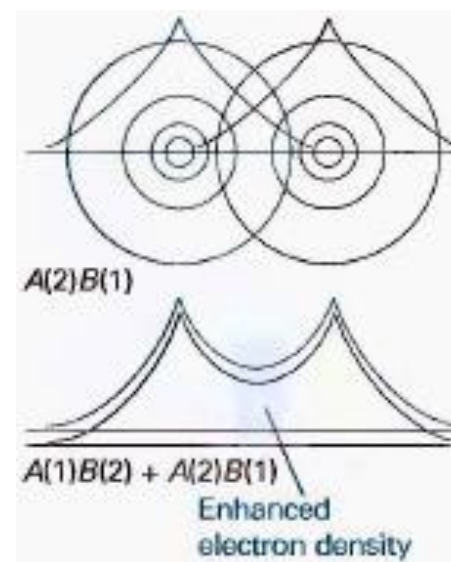
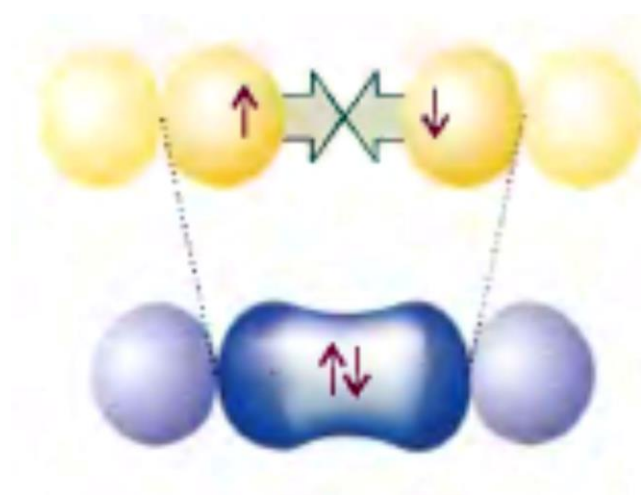
- energie tvoří plochu nad souřadnicemi jader – energetická (hyper)plocha - PES

- Ion H_2^+



Kovalentní vazba

- slučování atomů spočívá v přechodu el. z jednoho na druhý atom. (J.J. Thomson)
- uspořádání vnějších elektronů s větší stabilitou než v izolovaných atomech
=> **MO-LCAO** – molekulové orbitály jsou lineární kombinací atomových orbitalů

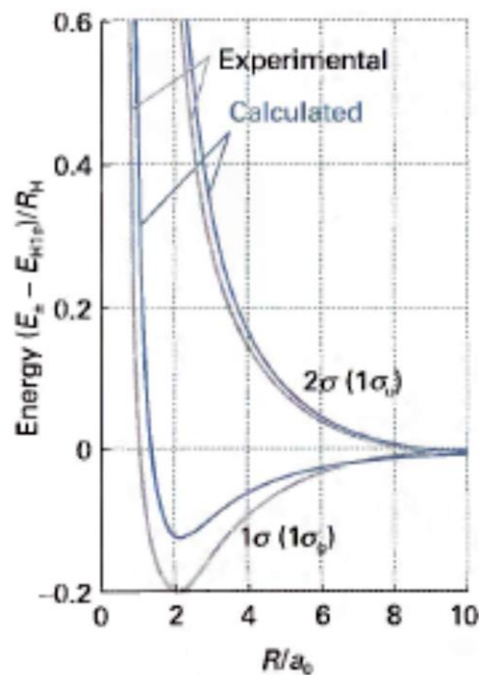


- **vnitřní elektrony** jsou tvorbou KV **nedotčeny**

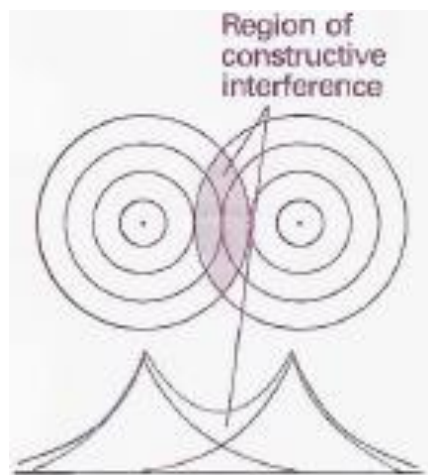
Kovalentní vazba

- účinný a neúčinný překryv valenčních AO

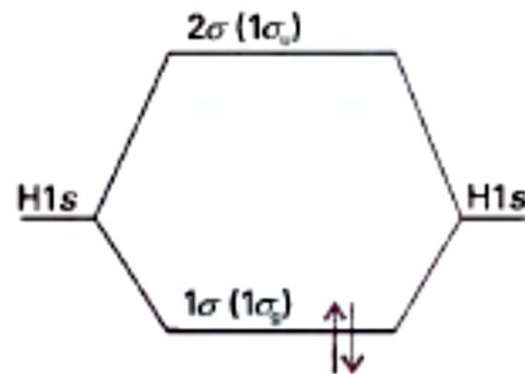
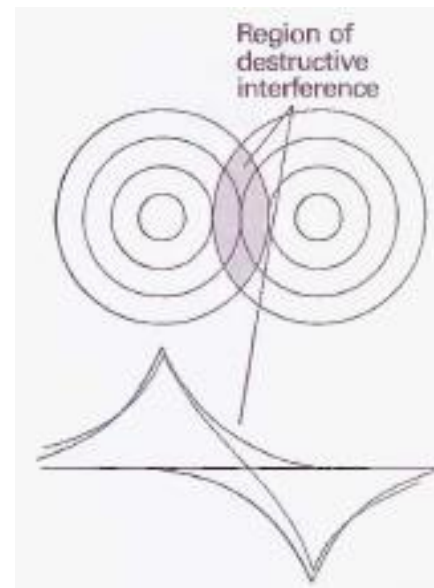
H_2



vazebný MO



antivazebný MO



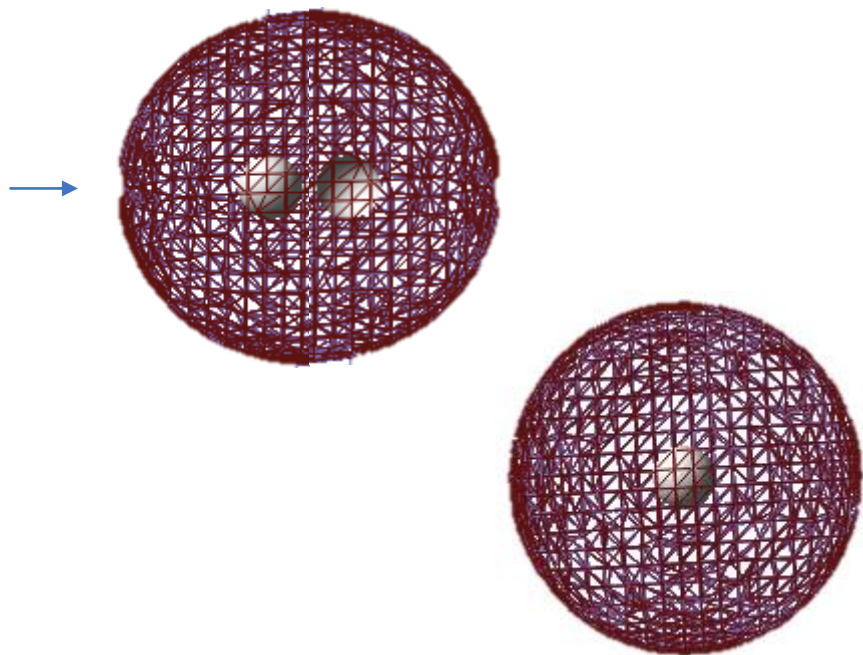
Vazebný řád (Bond order):

$$BO = \frac{n_{\text{bonding}} - n_{\text{antibonding}}}{2}$$

Typy MO orbitalů

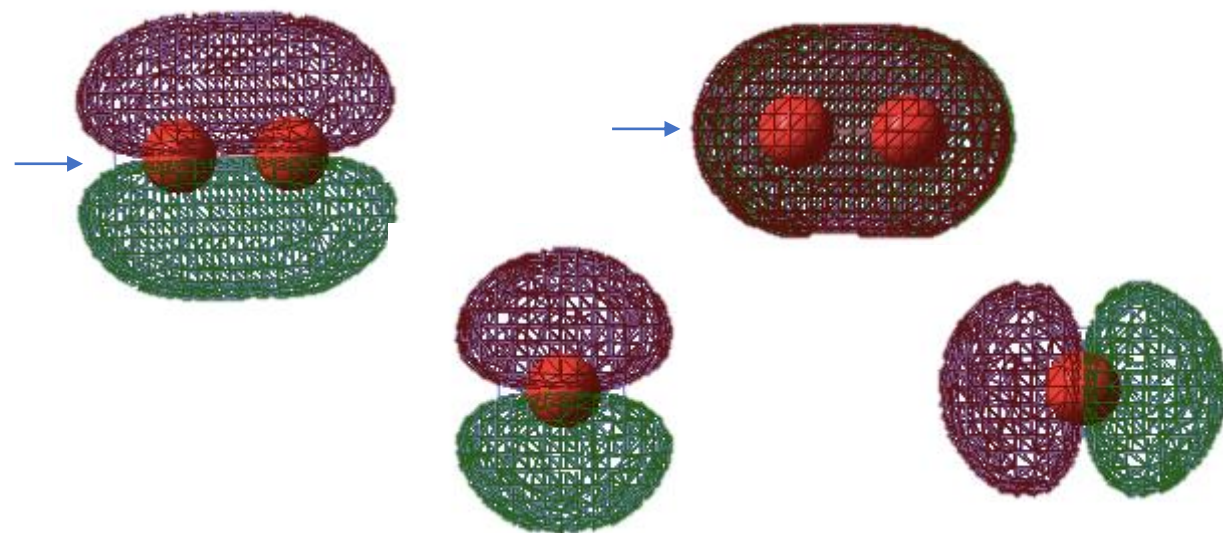
σ - sigma

- $\nearrow$ el. hustota na spojnici jader
- Nahrazuje s-orbital



π - pí

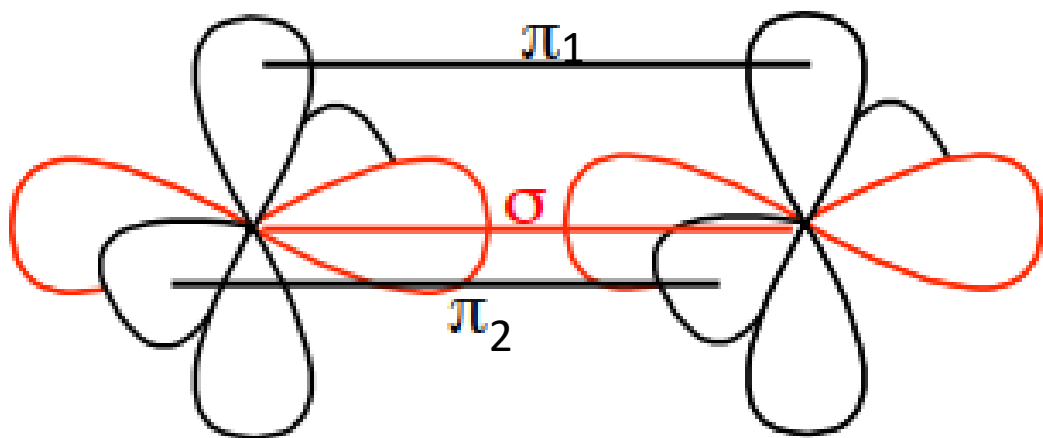
- $\nearrow$ el. hustota nad/pod spojnici jader, na spojnici je el. hustota 0
- Nahrazuje p-orbitaly, degenerace



Síla vazby

Násobné vazby

- jednoduchá vazba (obvykle σ)
- dvojná (obvykle σ a π)
- trojná (obvykle σ a 2 π)

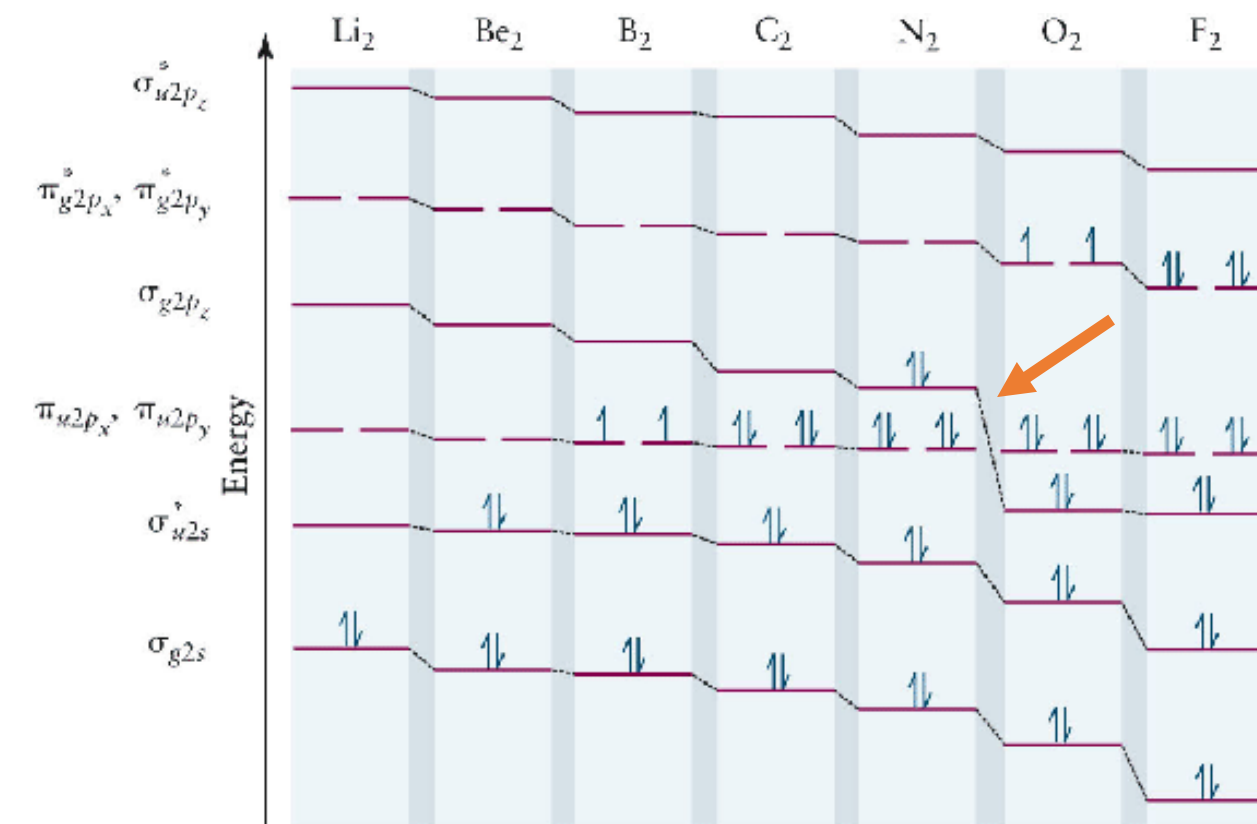


- Délka vazby: 0,1-0,2 nm,
- $E \sim 400$ kJ/mol

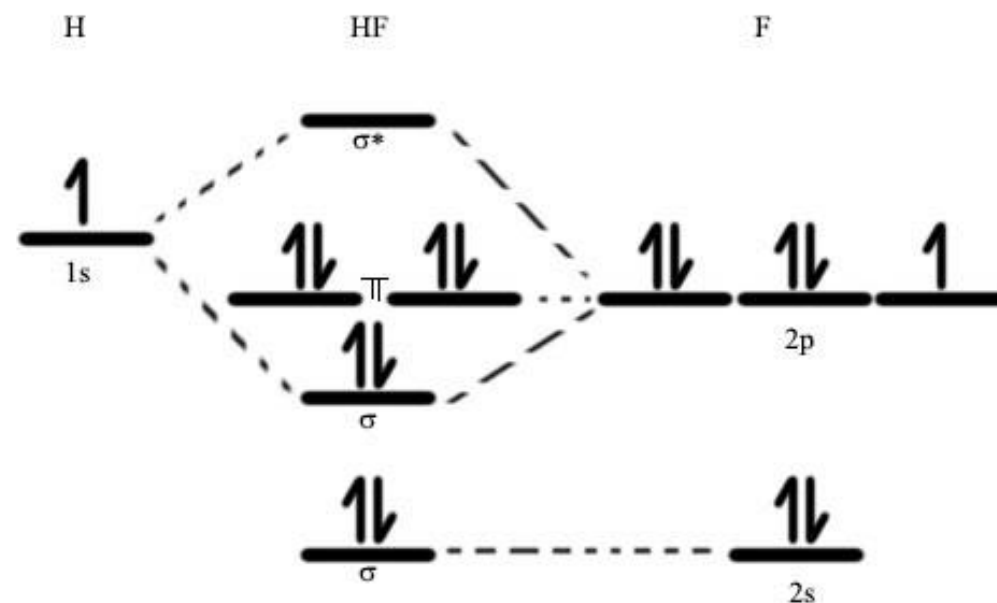
	d [10^{-10} m]	E [kJ.mol $^{-1}$]		d [10^{-10} m]	E [kJ.mol $^{-1}$]
C-H	1.10	373	N-H	1.01	390
C-C	1.54	348	N-N	1.48	159
C=C	1.34	620	N=N	1.26	419
C#C	1.20	814	P-H	1.40	319
C-F	1.40	473	O-H	0.96	466
C-Cl	1.76	331	S-H	1.30	348
C-Br	1.94	277	Si-H	1.50	318
C-I	2.13	239	Si-F	1.80	542
C-N	1.47	293	Si-Cl	2.10	361
C=N	1.27	616	Si-Br	2.30	289
C-O	1.43	344	Si-I	2.50	214
C=O	1.21	708	C-Hg	2.10	218

Typy kovalentních vazeb

homonukleární

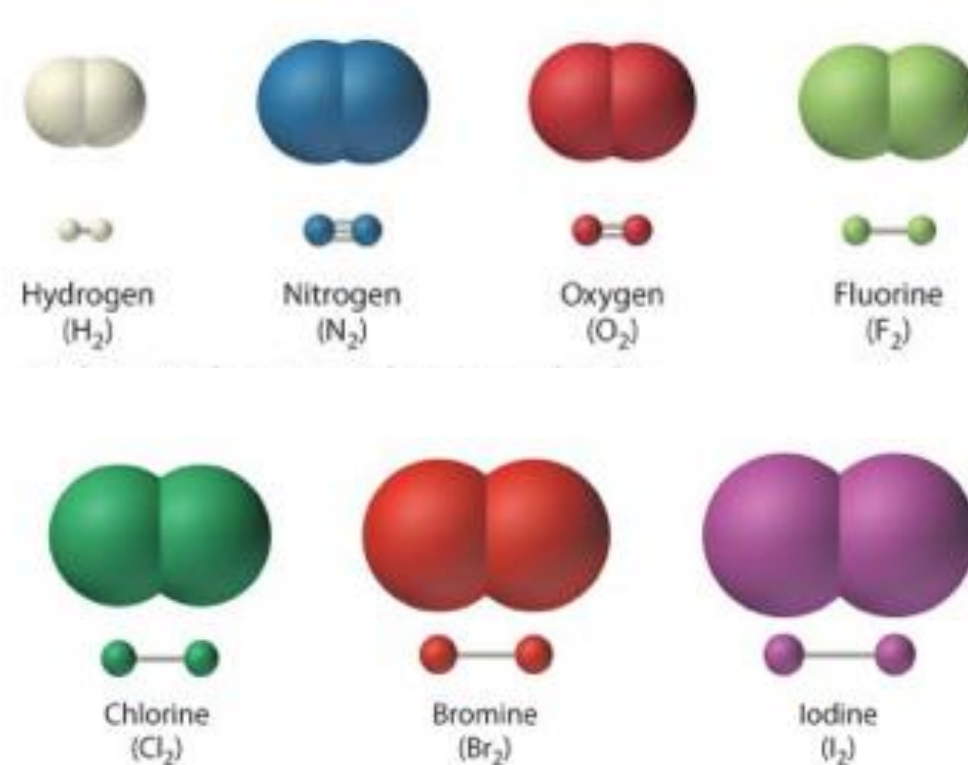


heteronukleární



Další typy vazeb

- nepolární kovalentní ($\Delta X = 0.0 - 0.4$)
- polární kovalentní ($\Delta X = 0.4 - 1.8$)
- koordinačně kovalentní
- iontová
- vodíková
- halogenová, chalkogenová, pniktogenová
- ...





Univerzita Palackého
v Olomouci



KATEDRA FYZIKÁLNÍ CHEMIE
UNIVERZITY PALACKÉHO V OLOMOUCI

Shrnutí

Shrnutí

- Hmota a záření jsou sestaveny z elementárních částic a interagují spolu silovými interakcemi prostřednictvím polí
- Atom je tvořen atomovým jádrem a elektronovým obalem
- Elektronový obal je tvořen atomovými orbitaly
- Atomy v rámci periodické tabulky se od sebe vzájemně liší
 - složením jádra, počtem elektronů
- Rozdíly mezi vlastnostmi prvků vyplývají ze stavby elektronového obalu
- Atomy do molekul spojují chemické vazby

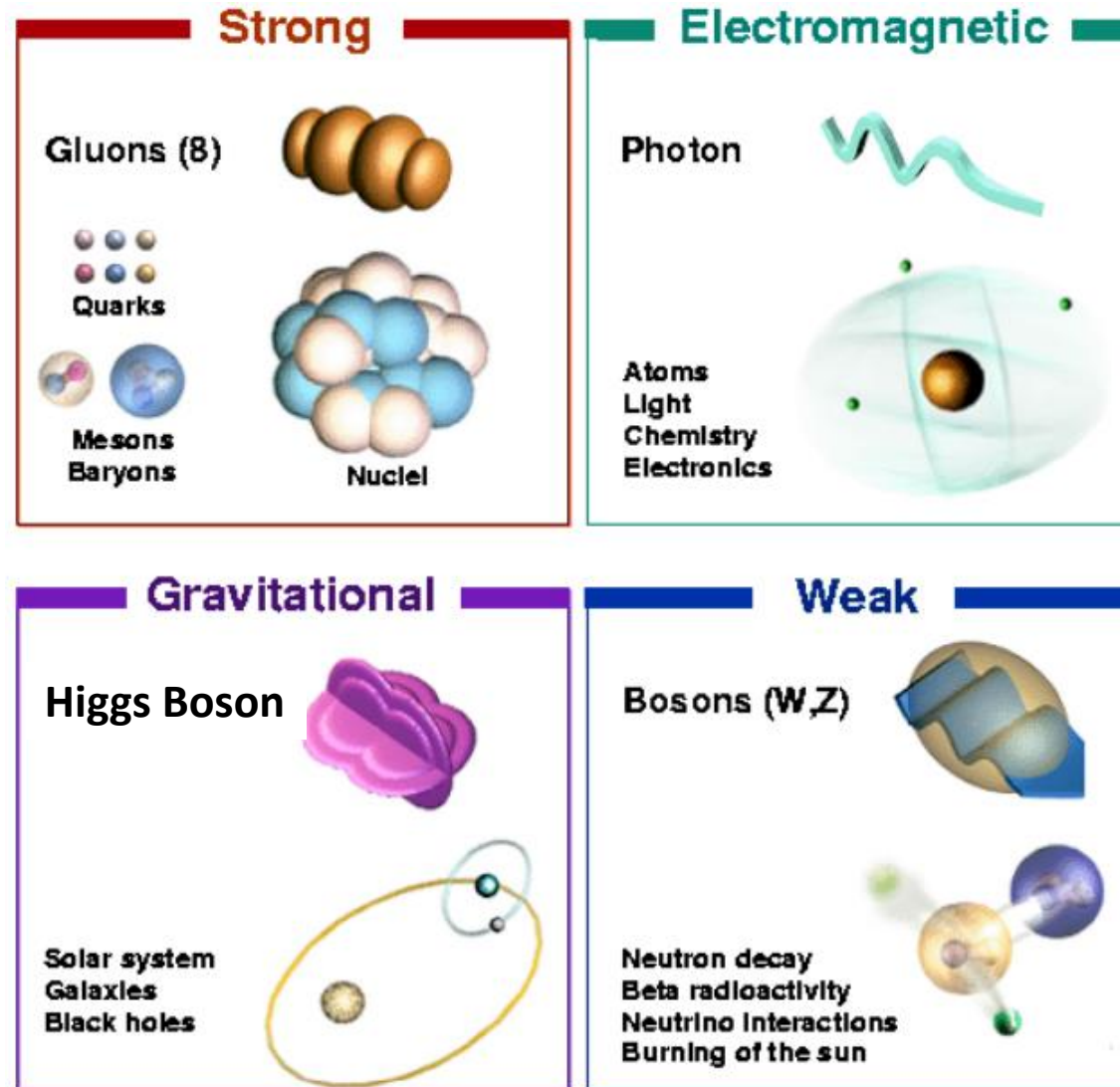
Příště

- Interakce hmoty a záření

Relativní velikost částic



Silové interakce



Základní zákony 1

- Zákon zachování hmotnosti (M. V. Lomonosov - 1784 a A. L. Lavoisier - 1774)

“V uzavřené soustavě se hmotnost látek do reakce vstupujících rovná hmotnosti látek z reakce vystupujících.”

- Zákon zachování energie (M. V. Lomonosov – 1748)

“Energii nelze vytvořit a ani zničit.”

Einsteinův vztah $E = mc^2$ sjednocuje oba zákony v zákon jediný:

“Celková hmotnost a energie izolované soustavy se nemění.”

Základní zákony 2

- Zákon stálých poměrů slučovacích (Proust a Dalton - 1799)

“Hmotnostní poměr prvků či součástí dané sloučeniny je vždy stejný a nezávislý na způsobu přípravy sloučeniny.”

Poměr kyslíku a vodíku je ve vodě přibližně 8:1

- Zákon násobných poměrů slučovacích (Richter – 1791 a Dalton -1802)

“Tvoří-li dva prvky více podvojných sloučenin, pak hmotnosti jednoho prvku slučujícího se vždy se stejným množstvím prvku druhého jsou pro tyto sloučeniny v poměrech, které lze vyjádřit přibližně podílem malých čísel.”

Kyslík, který se sloučí beze zbytku s 1 g vodíku na vodu, má hmotnost asi 8 g. Kyslík, který se sloučí beze zbytku s 1 g vodíku na peroxid vodíku, má hmotnost asi 16 g. Poměr hmotností kyslíku ve vodě ku je tedy 1:2.