



Univerzita Palackého
v Olomouci

**Úvod do obecné a fyzikální chemie
KFC/UOFCH
Struktura atomů a molekul
KFC/SAM**

**1. Úvod
částice**

Karel Berka

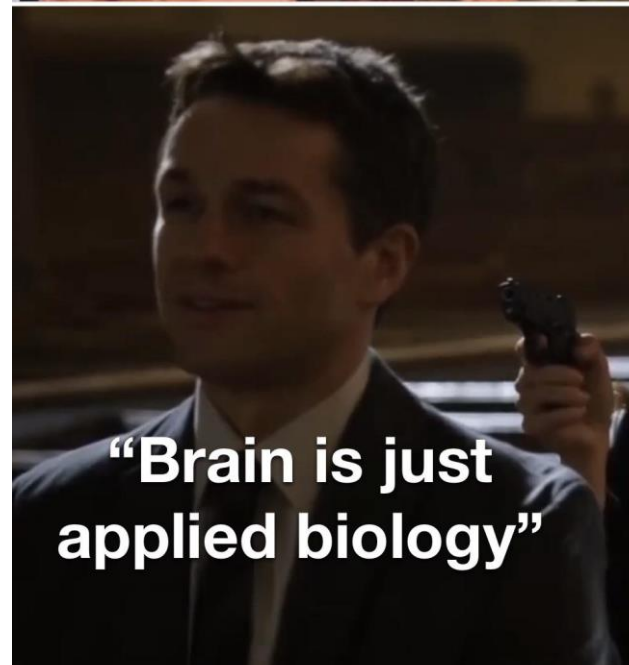
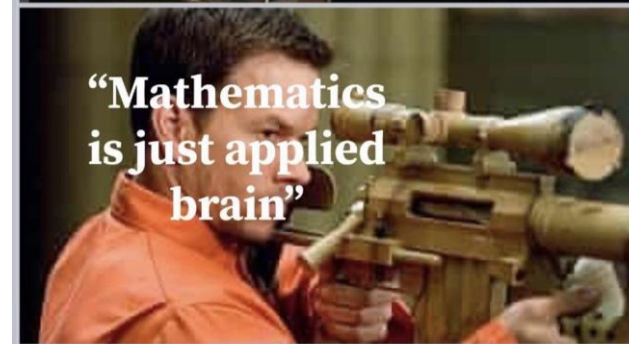
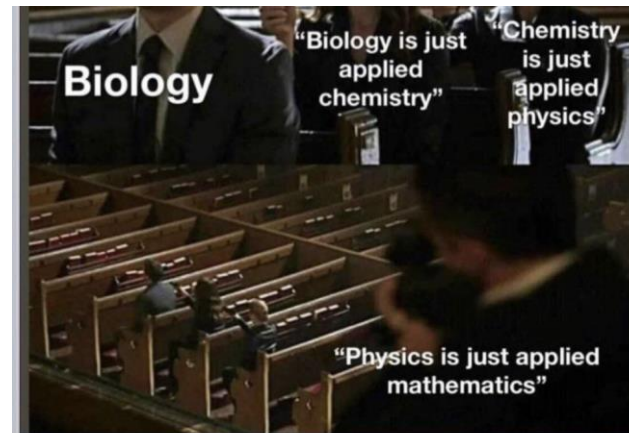
Osnova kurzu

Motto:

„Konečný výklad všech chemických jevů musí být založen na struktuře atomů.“

Cotton A., Wilkinson G

- Úvod – půjdeme „odspodu“
- Stavba hmoty
 - Elementární částice
 - Atomy
 - Molekuly
 - Makromolekuly
- Pohyby molekul
- Interakce
 - V rámci molekul
 - Mezi molekulami
 - Se zářením (světlo)



Požadavky na splnění

- Zkouška
 - online test (>50%)
 - ústní zkoušení (3 průřezové otázky)

Doporučená literatura

- Otyepka M., Struktura atomů a molekul, 2. opravené a rozšířené vydání, VUP Olomouc, 2010
- YouTube kanál přednášky
- Studijní materiály na stránkách KFC

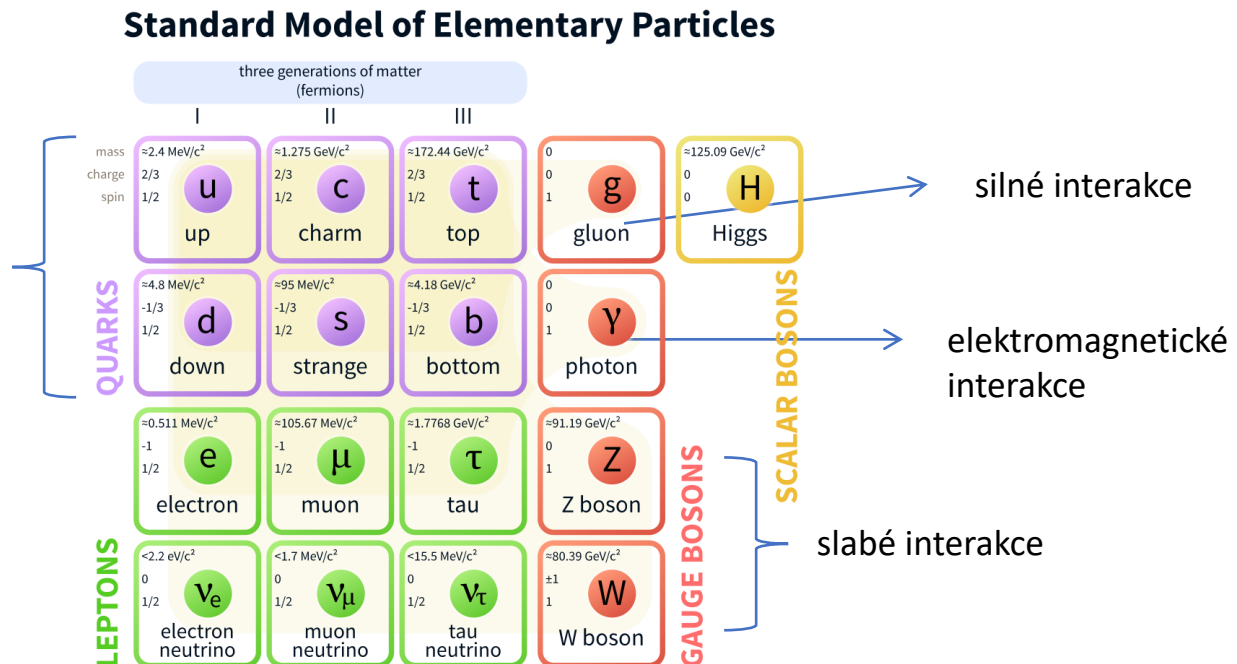
Otázky na rozehrání

- Co si představujete pod fyzikální chemií?
- Z čeho je hmota?
- Čeho je v prvcích víc?
 - Protonů, elektronů, neutronů?
- Co je rychlejší?
 - Formule 1, foton, elektron?
- Jakou největší molekulu si vybavíte? Jak byla velká?
- Jaké pohyby mohou molekuly vykonávat?

Hmota

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

tvoří hadrony
protony, neutrony,
mesony, baryony

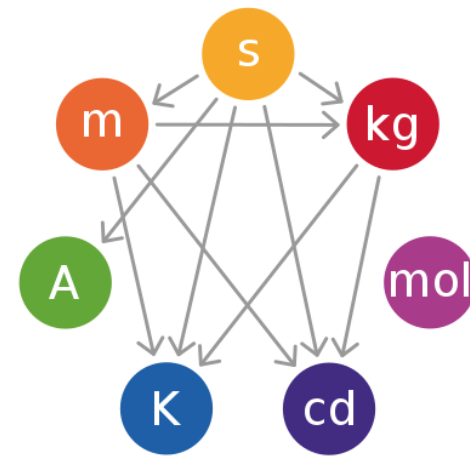


Popis látek – jednotky SI

- 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

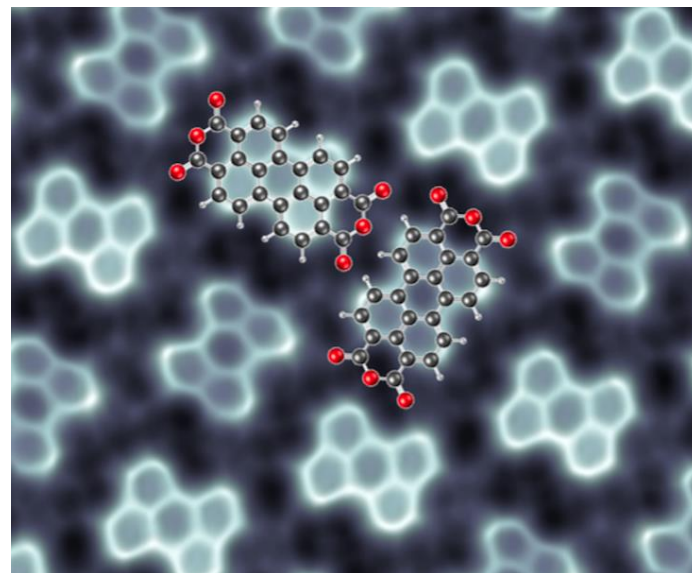
Bezrozměrné veličiny

Číselné hodnoty bez jednotek

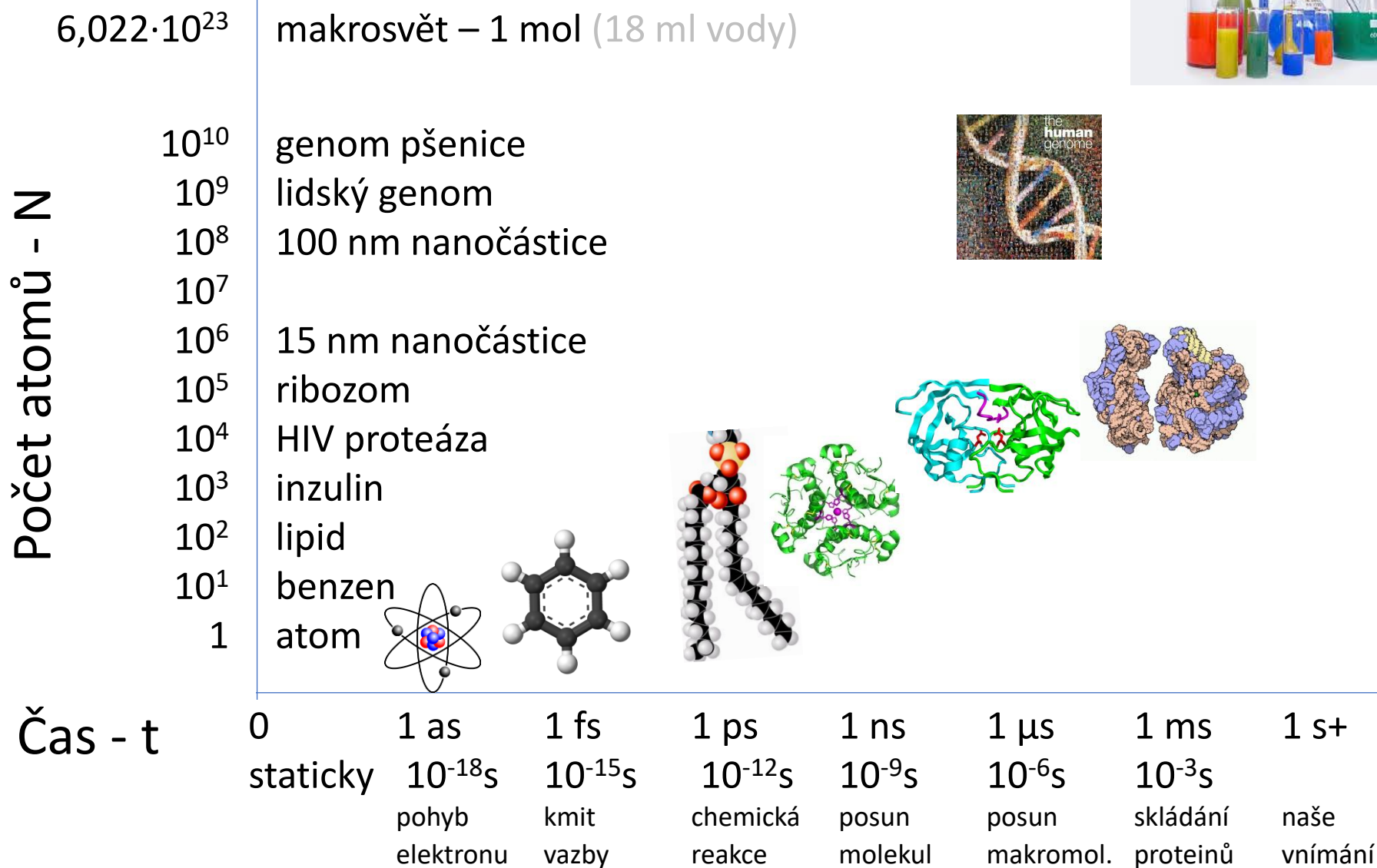
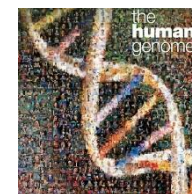
- relativní tlak $p_r = p/p_0$
- relativní koncentrace látky X $[X] = c(x)/c_0$
- zlomky – hmotnostní, objemový, molární
- transmittance $T(\Phi/\Phi_0)$
- absorbance $A = -\log T$

Mikrosvět vs. makrosvět

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



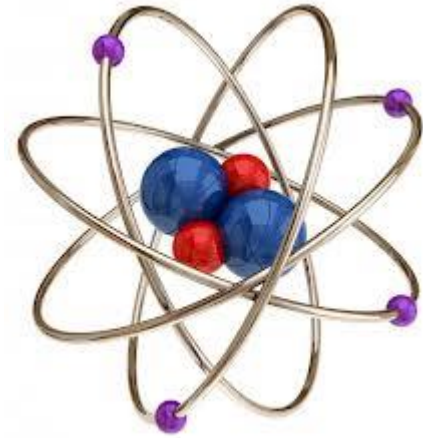
Škála chemických dějů



Paradoxy mikrosvětá

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

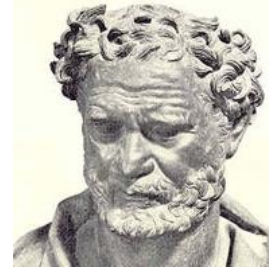
Stavba atomu



Antika – svět se skládá z jediné pralátky

- Demokritos a Leukippos - Atomistická teorie

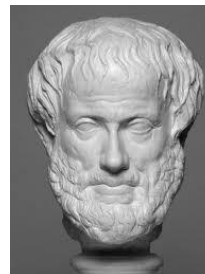
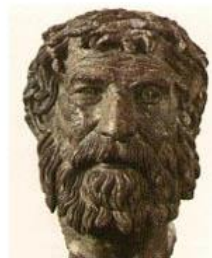
Veškerá hmota se skládá z drobných nepatrných dále již nedělitelných částic – *atomů*.



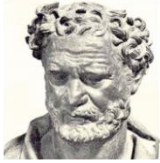
- Aristoteles a Empedokles

Pralátka je tvořená kombinací čtyř základních elementů (oheň, voda, vzduch a země)

Uznávána až do 17. století



Demokritos



460 př.n.l.

Dalton



1803

Thomson



1909

Rutherford



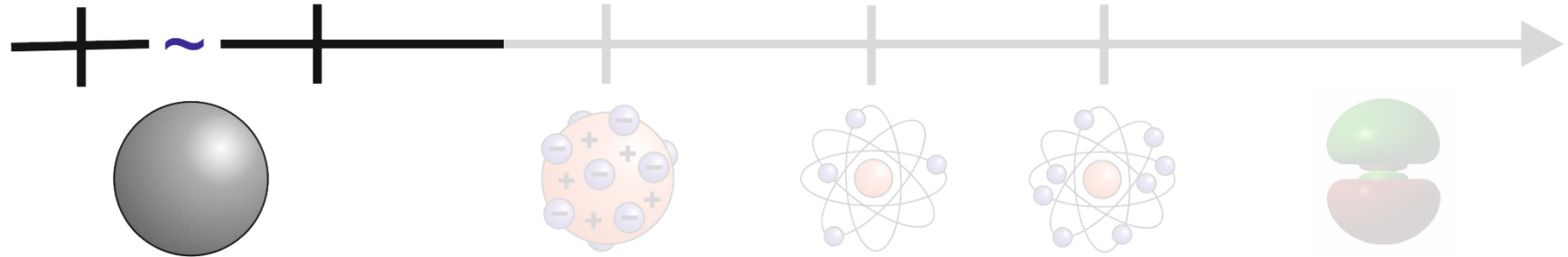
1911

Bohr

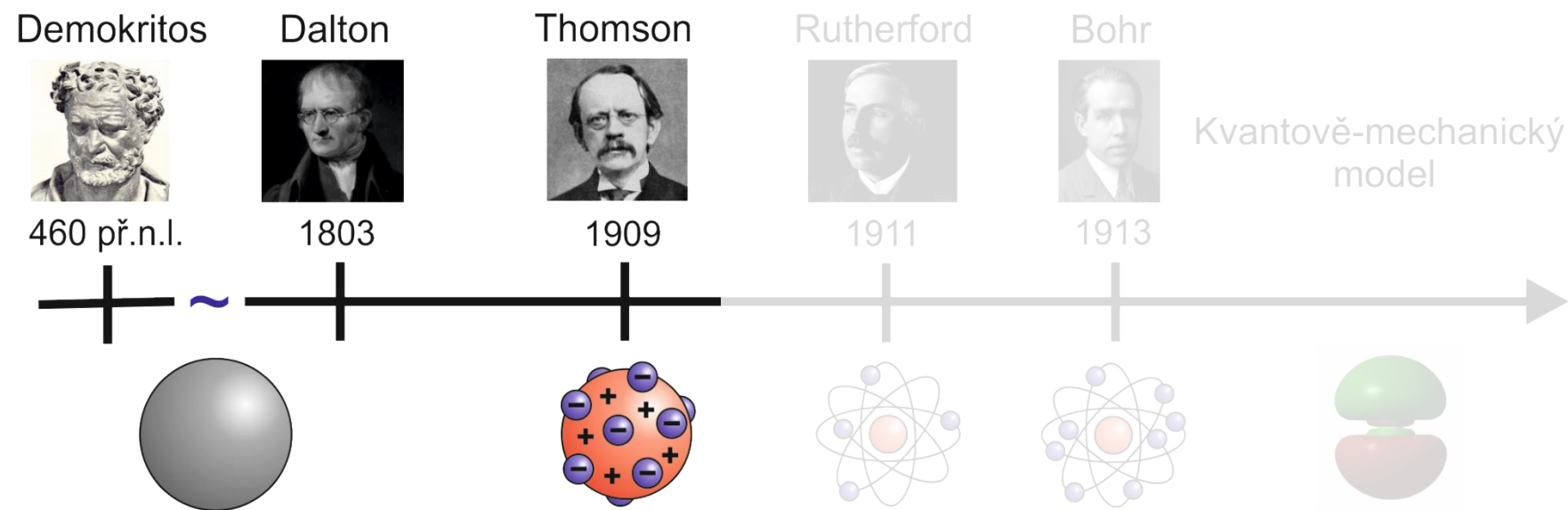


1913

Kvantově-mechanický
model

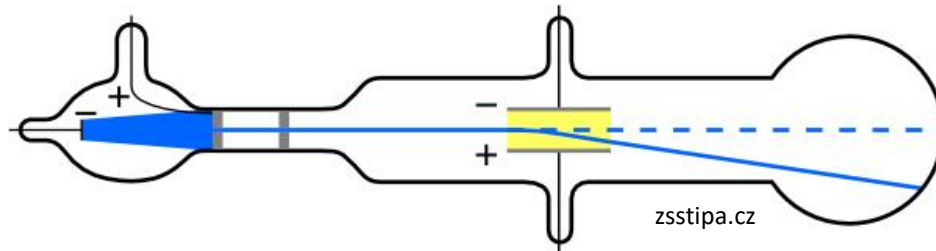


- Demokritova Atomistická teorie rozšířena J. Daltonem
 - (i) Atomy nelze dále dělit ani chemicky ani fyzikálně
 - (ii) Atomy různých prvků se od sebe liší
 - (iii) Při slučování dochází ke sdružování celistvého počtu atomů
- Zpochybnění nedělitelnosti atomu



- Objev elektronu - J. J. Thomson (1897)

- Katodové záření



katoda je el. vytápěna → dojde k emisi záření → toto záření je urychleno anodou → malá frakce projde skrz perforovanou anodu → paprsek dopadne na fluorescenční destičku a záření se stane viditelným (paprsek se ohýbá od záporně nabitě destičky)

- „pudinkový model“ atomu – elektrony „rozinky“ v pudinku

Demokritos

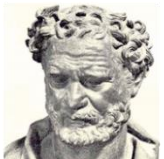
Dalton

Thomson

Rutherford

Bohr

Kvantově-mechanický model



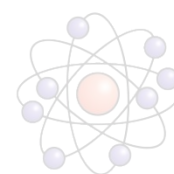
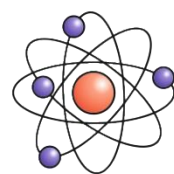
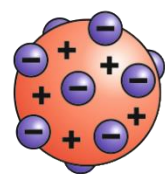
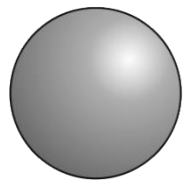
460 př.n.l.

1803

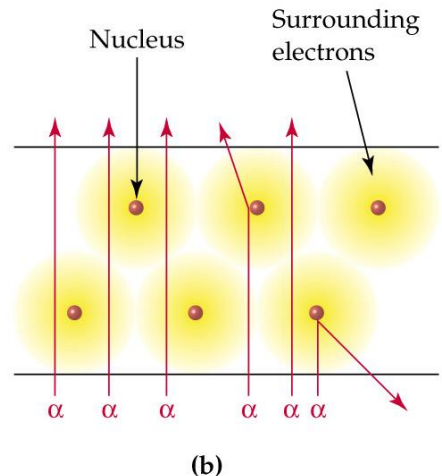
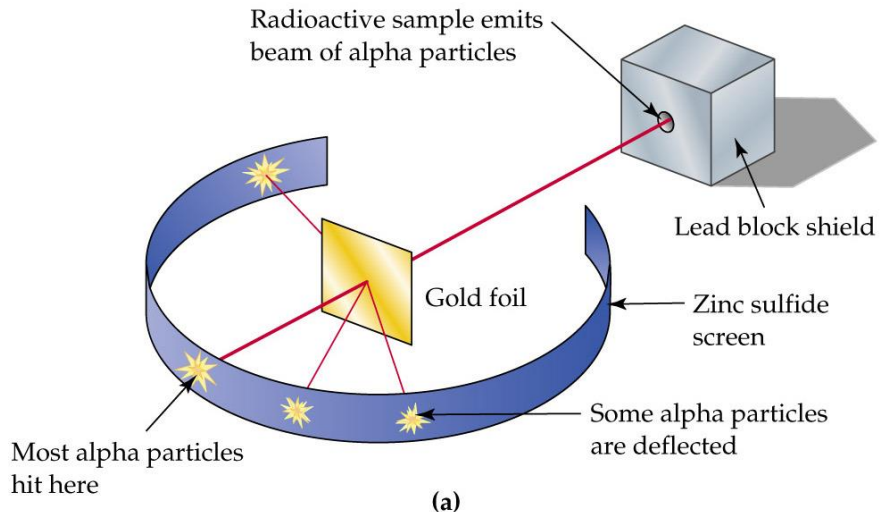
1909

1911

1913



• Objev atomového jádra



• „planetární model atomu“ - E. Rutherford

Elektrony se pohybují podle zákonů klasické fyziky

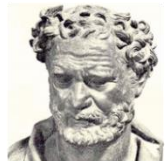
Demokritos

Dalton

Thomson

Rutherford

Bohr



460 př.n.l.

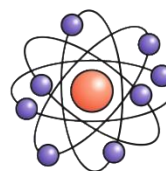
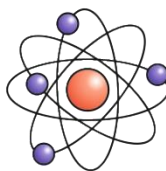
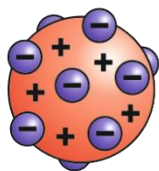
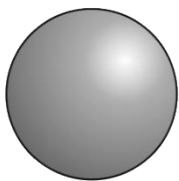
1803

1909

1911

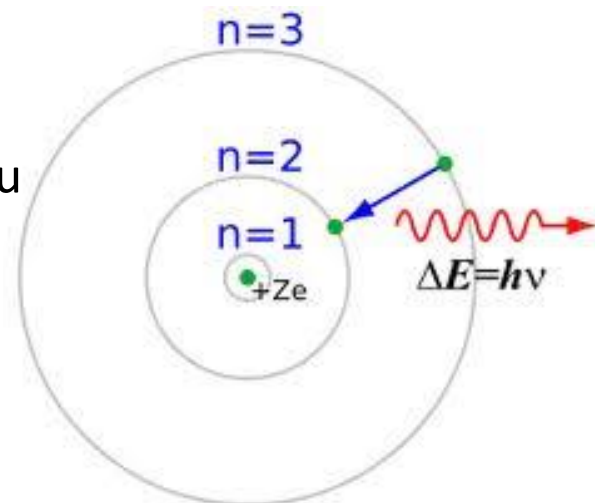
1913

Kvantově-mechanický model

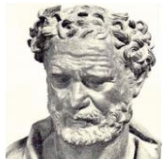


• N. Bohr a počátky kvantové chemie

- (i) Elektron se může bez vyzařování E pohybovat kolem jádra jen po určitých drahách (**orbitalech**)
- (ii) Elektron přijímá nebo vyzařuje E pouze při přeskoku z jedné energetické hladiny na druhou (**kvantování energie**)



Demokritos



Dalton



Thomson



Rutherford



Bohr



Kvantově-mechanický model

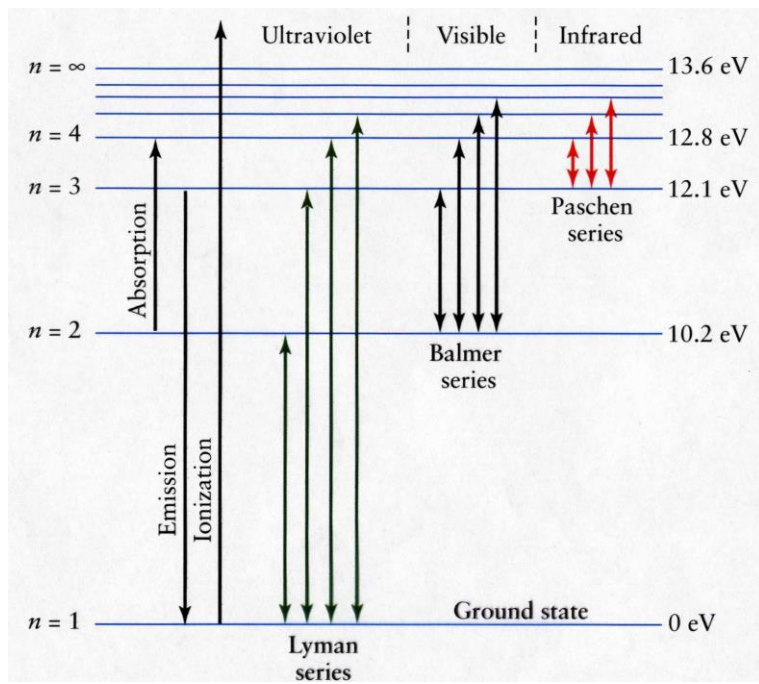
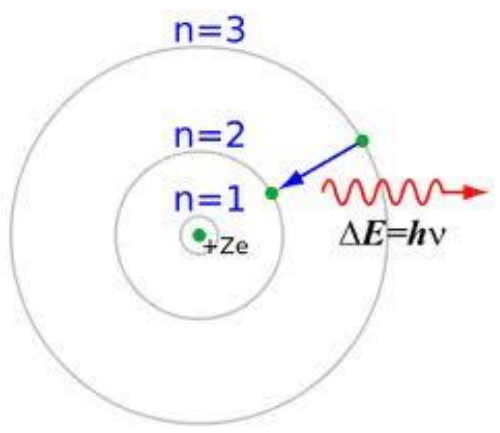
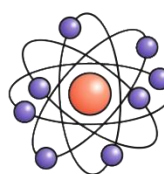
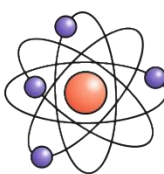
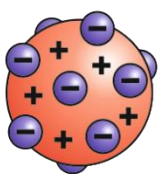
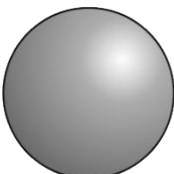
460 př.n.l.

1803

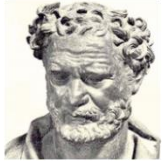
1909

1911

1913



Demokritos



460 př.n.l.

Dalton



1803

Thomson



1909

Rutherford



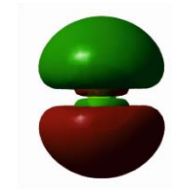
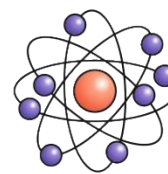
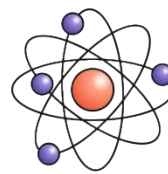
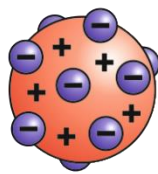
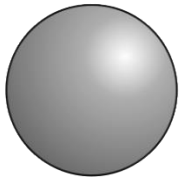
1911

Bohr



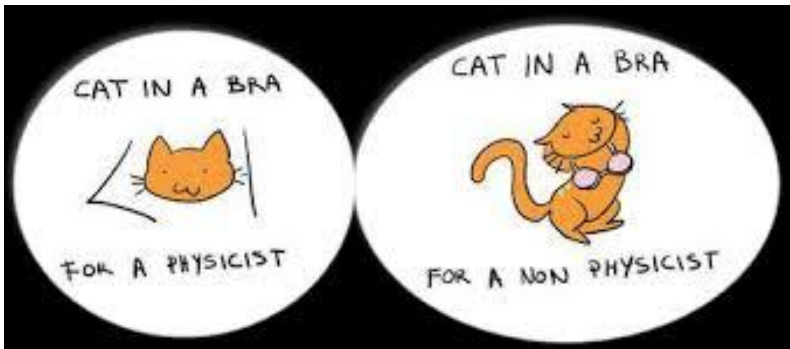
1913

Kvantově-mechanický model



• Kvantová teorie

W. Heisenberg a E. Schrödinger (1925, 1926) → **vlnová funkce**

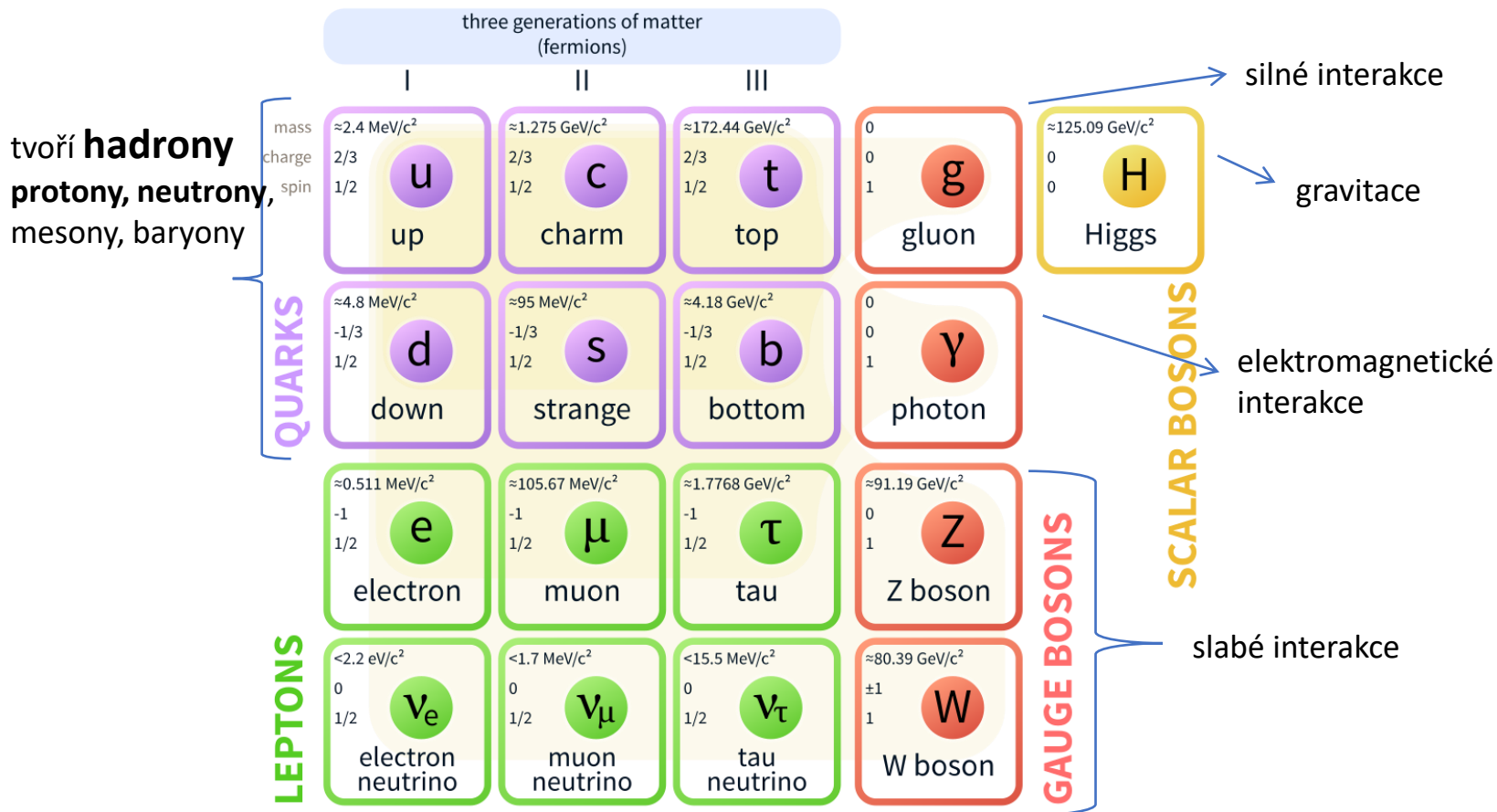


Vlnová funkce popisuje pravděpodobnost výskytu elektronu v elektronovém obalu atomu. Vlnovou funkci lze získat řešením Schrödingerovy rovnice.

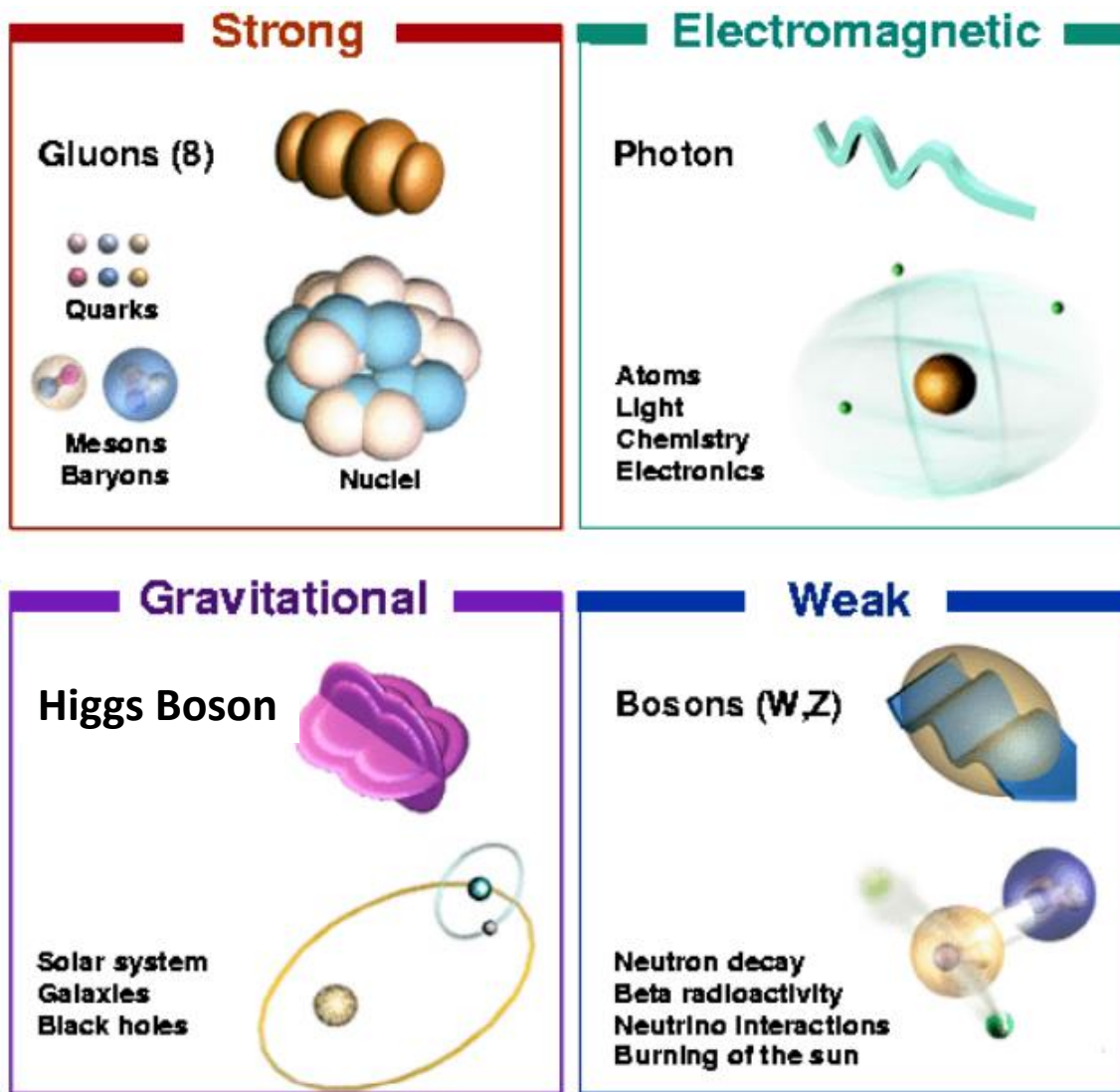
- Kvantově-mechanický model atomu využívající dualistický princip a vlnovou funkci

Elementární částice a silové interakce

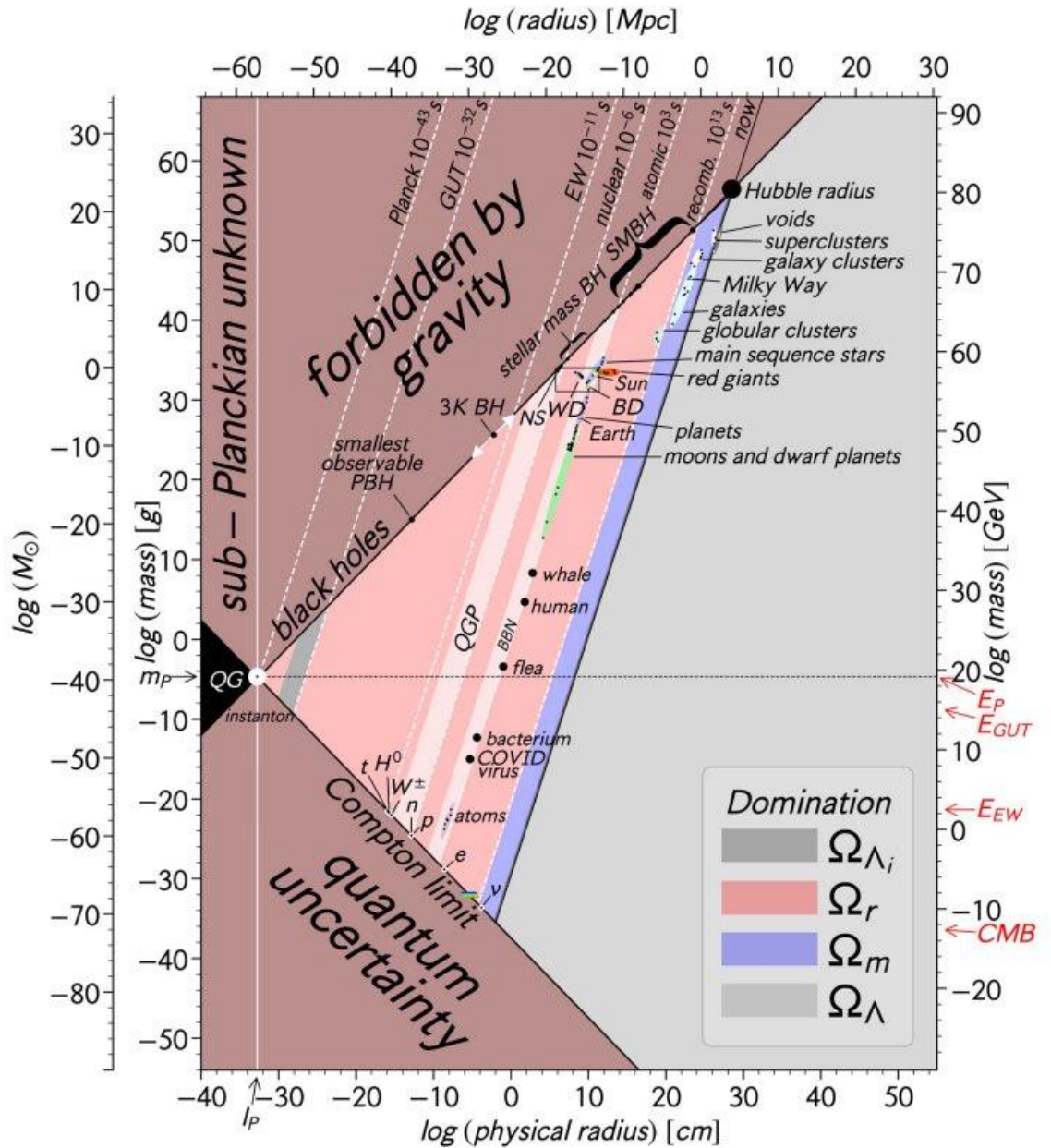
Standard Model of Elementary Particles



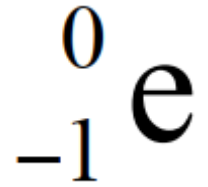
Silové interakce



Graph of everything

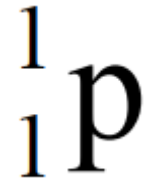


Elektron - e^-



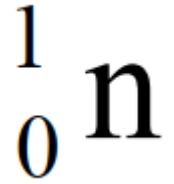
- náboj
 - $-1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
 - považuje se za elementární náboj, značí se e
- hmotnost
 - $m_e = 9.10939 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \Rightarrow$ lepton
- spinové kvantové číslo
 - „spin“ $\frac{1}{2} \Rightarrow$ fermion
 - vnitřní moment hybnosti $+\frac{1}{2}$ a $-\frac{1}{2}$

Proton - p^+



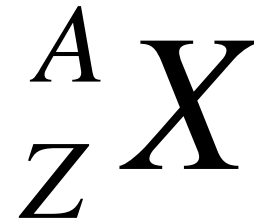
- náboj
 - $+1.602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- hmotnost
 - $m_p = 1.67262 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \Rightarrow$ baryon, hadron
 - $m_p = 1836 m_e$
- spinové kvantové číslo
 - „spin“ $\frac{1}{2} \Rightarrow$ fermion
- tvoří jej tři kvarky – up, up, down

Neutron - n



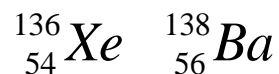
- náboj
 - 0 C
- hmotnost
 - $m_n = 1.67493 \cdot 10^{-27}$ kg => baryon, hadron
 - $m_n = 1839 m_e$
- spinové kvantové číslo
 - „spin“ $\frac{1}{2}$ => fermion
- tvoří jej tři kvarky – up, down, down
- volný neutron se rozpadá
 - (poločas 15.2 min)
 - na proton, elektron a elektronové neutrino

Atomy



Každý atom je charakterizován:

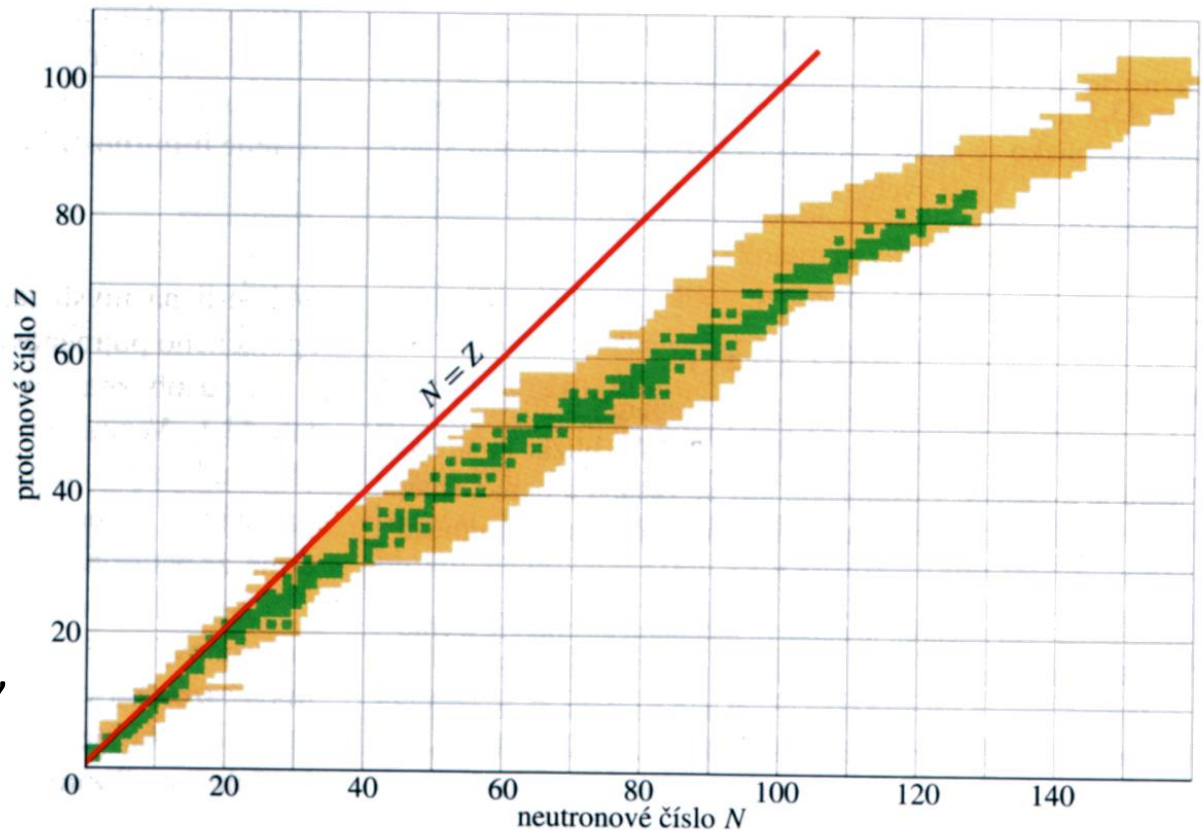
- Atomovým (protonovým) číslem **Z** (udává počet protonů v jádře, počet elektronů v neutrálním stavu a pořadí v periodickém systému)
- Nukleonové (hmotnostní) číslo **A** udává celkový počet nukleonů v jádře (celkový počet protonů a neutronů)
- Izotop (nuklid) – liší se nukleonovým číslem
- Izobar –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



Atomy a jejich (ne)stabilita

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

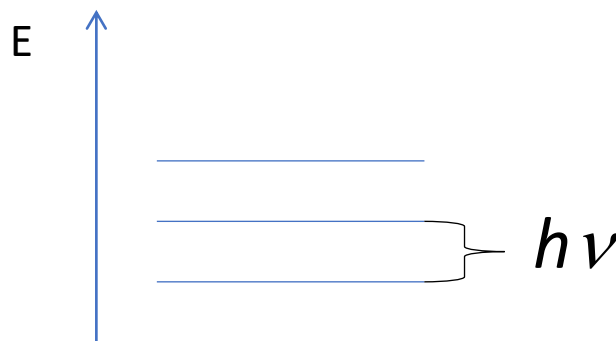
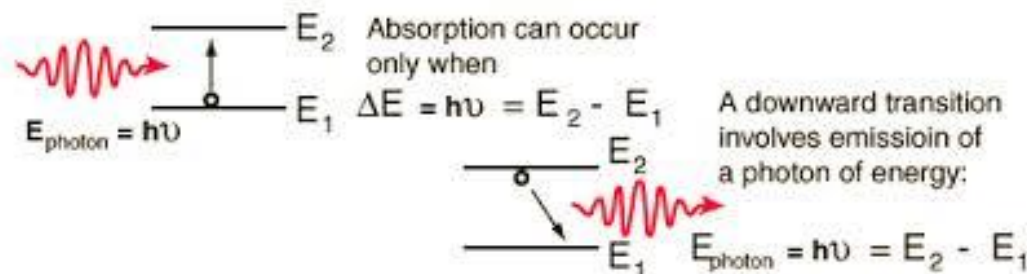
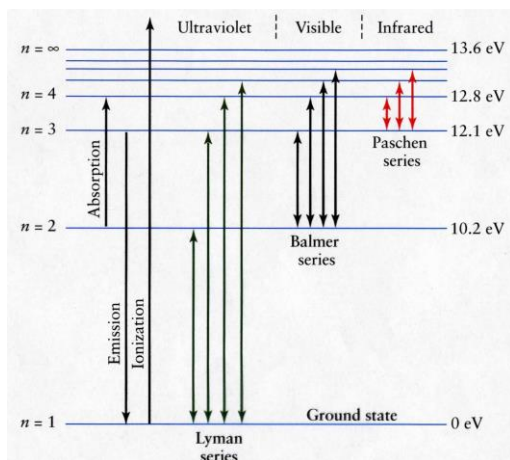
graf známých nuklidů,
zelené – stabilní,
béžové radioaktivní



Kvantový pohled na atom

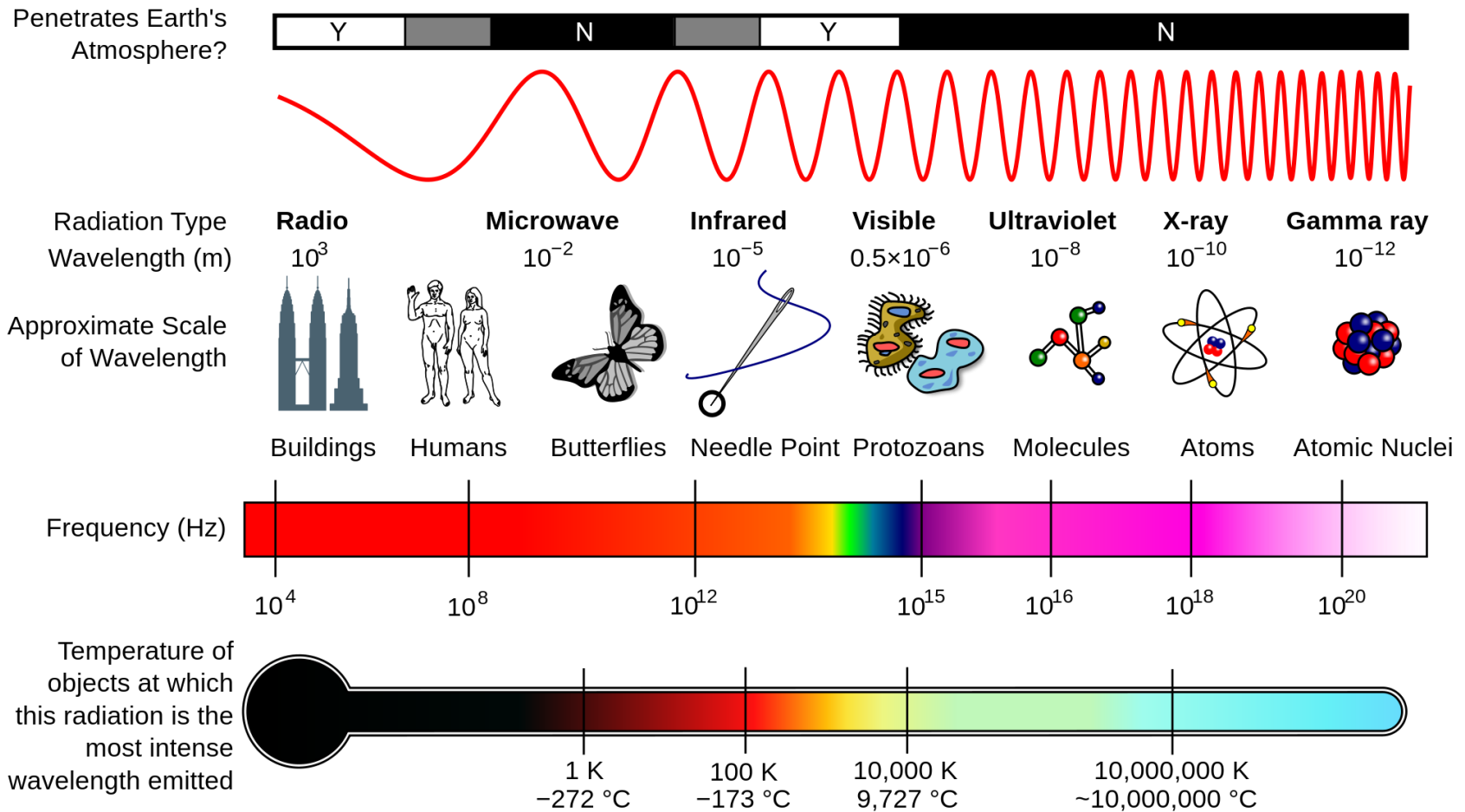
V mikrosvětě dochází k tzv. **kvantování energie**.

Přípustné energie vytvářejí soubor oddělených (diskrétních) energetických hladin. Přejít mezi hladinami je spojen s přijetím nebo odevzdáním E , která odpovídá energetické vzdálenosti hladin.



Od tepelného záření ke kvantování energie

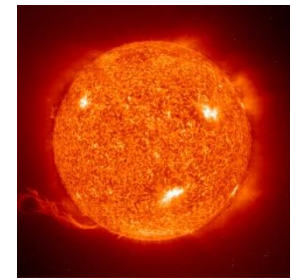
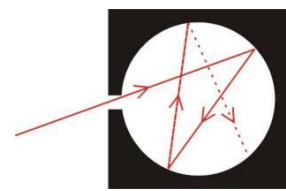
- Elektromagnetické záření vydávají všechna tělesa



- Chladná vyzařují okem neviditelné infračervené záření
- Zahřátá tělesa (asi nad 500°C) pak záření viditelné

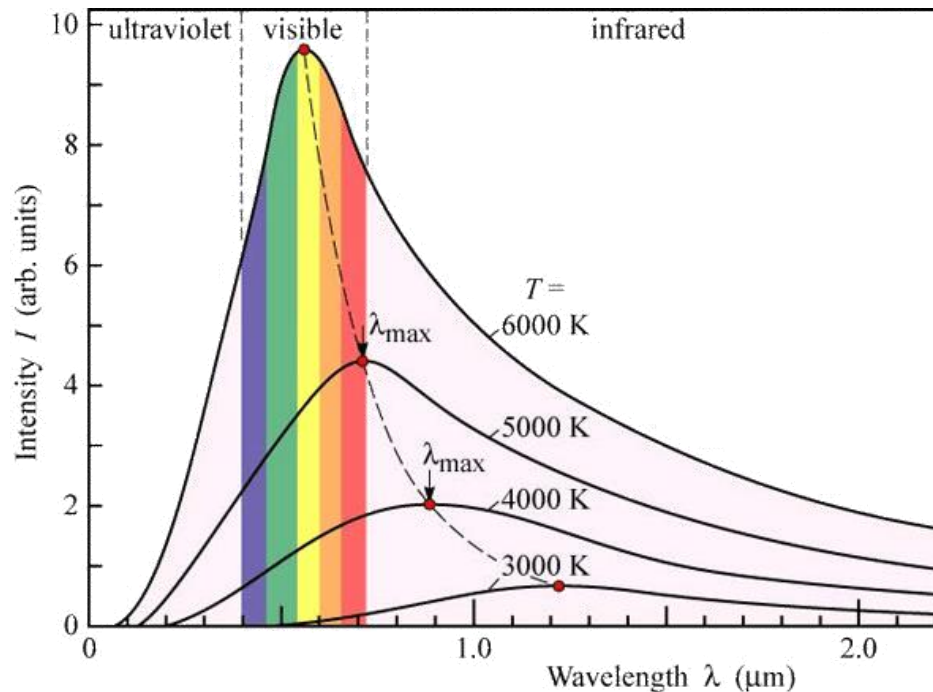
Záření těles

Absolutně černé těleso



- Dokonale pohlcuje veškerou dopadající energii a následně tuto energii vyzařuje zpět ve formě elektromagnetických vln.
- Nedochozí k žádnému odrazu záření, čímž se za nízké teploty jeví dokonale černé

měření E dopadajícího záření pro jednotlivé vlnové délky



- při nižší teplotě (600 °C) → zahřáté těleso se jeví jako červené
- 1 300 °C → se jeho barva mění na bílou, poněvadž jsou v záření zastoupeny všechny vlnové délky viditelné části spektra
- při ještě vyšších teplotách se barva tělesa mění v modrobílou a těleso vyzařuje i ultrafialové záření (elektrody při obloukovém svařování)

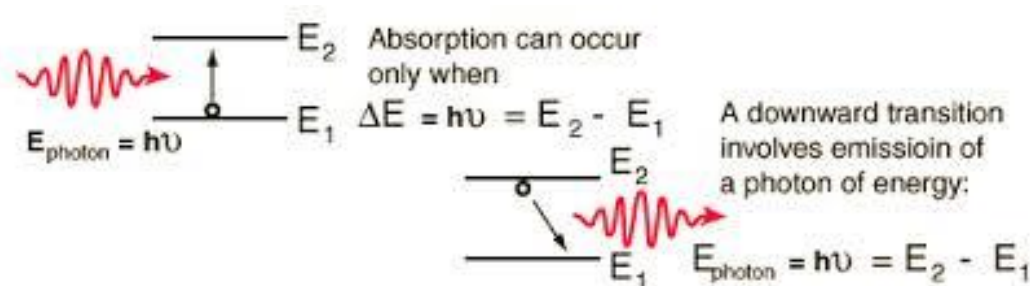


Od černého tělesa ke kvantování

- **M. Planck** → těleso vyzařuje jen záření **určitých vlnových délek**.
- Světelná energie je vyzařována po **kvantech** a **ne spojitě** (elementární kvantum – foton ... quantum – množství).

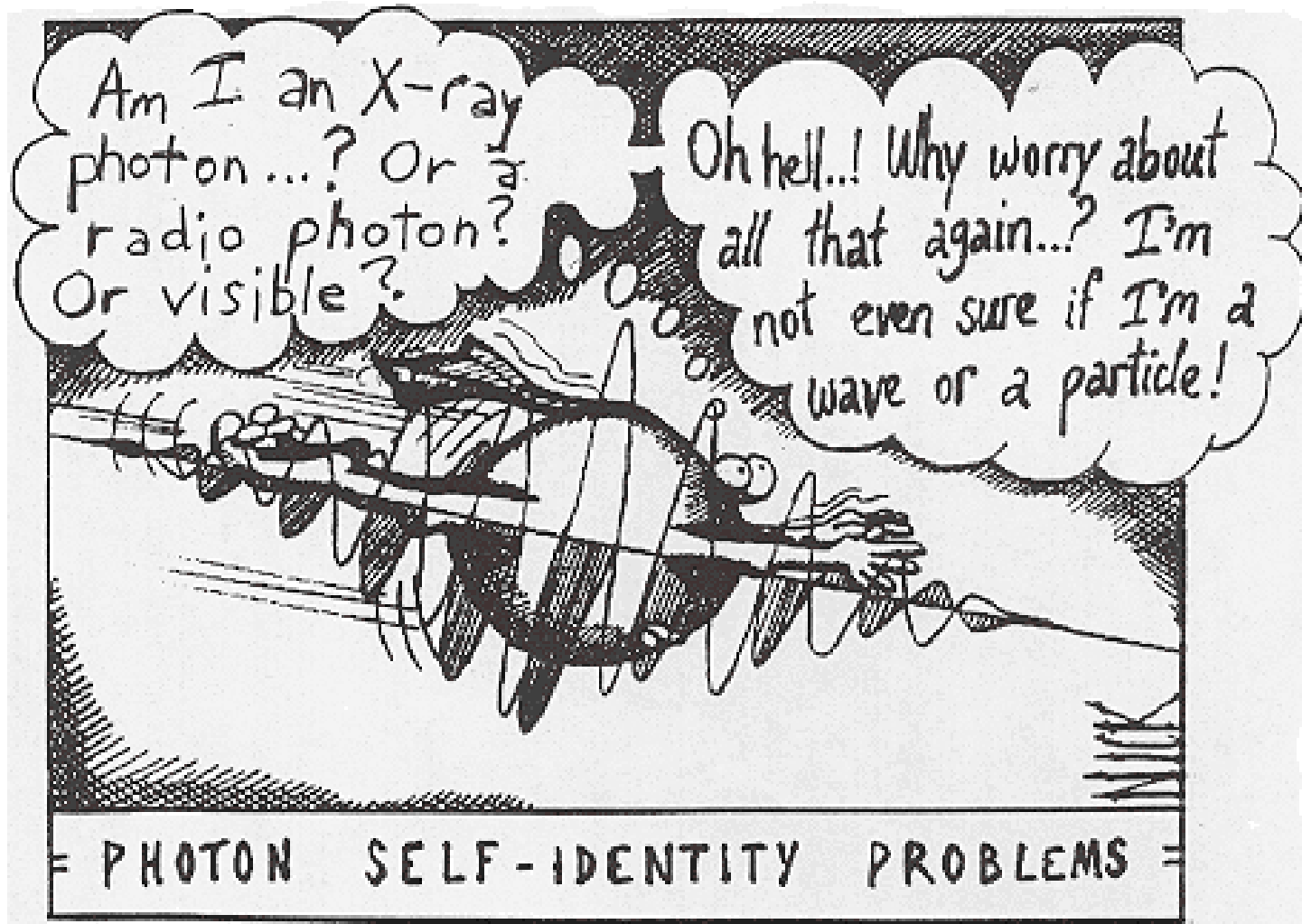
$$E = h\nu$$

ν je frekvence záření a h je Planckova konstanta ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$)



- Jde tedy o částice (jak by napovídalo kvantování) nebo o vlnu (frekvence)?

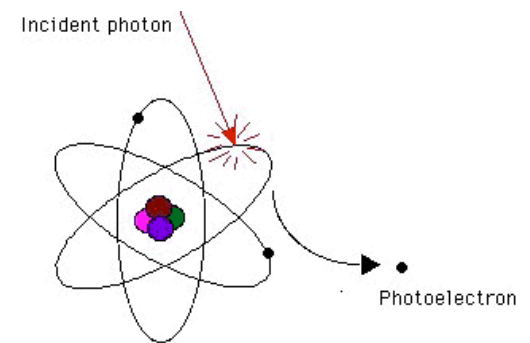
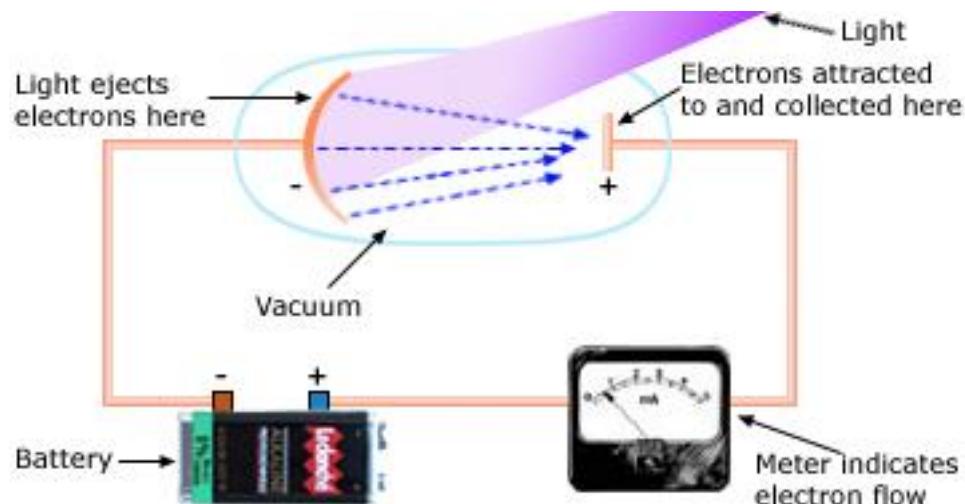
Částice nebo vlna?



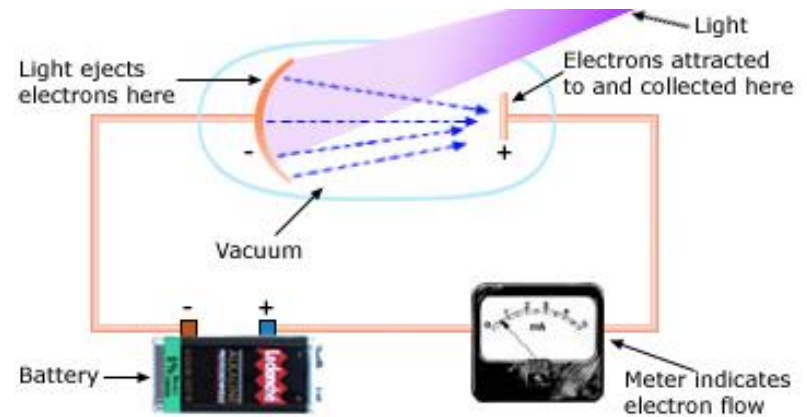
Částice nebo vlna? Částice!

Důkaz – měření energií elektronů vznikajících při fotoelektrickém jevu.

Fotoelektrický jev (Nobelovka 1921) – pokud na fotokatodu, záporně nabitou kovovou elektrodu umístěnou spolu s anodou v evakuované skleněné trubici, dopadá záření vhodné energie, lze pozorovat, že obvodem začne protékat proud (zvýší-li se intenzita, roste také proud).



Částice!



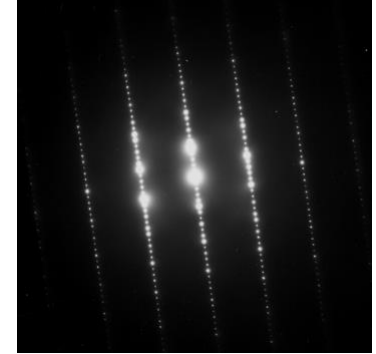
Snižuje-li se frekvence světla → po dosažení určité energie proud v obvodě přestane protékat.

Minimální E fotonu (výstupní práce W elektronu potřebná k vyražení elektronu z kovu, záleží na materiálu → řádově jednotky eV) .

Energie fotonu se transformuje do kinetické energie elektronu a výstupní práce

$$E = h\nu = E_k + W$$

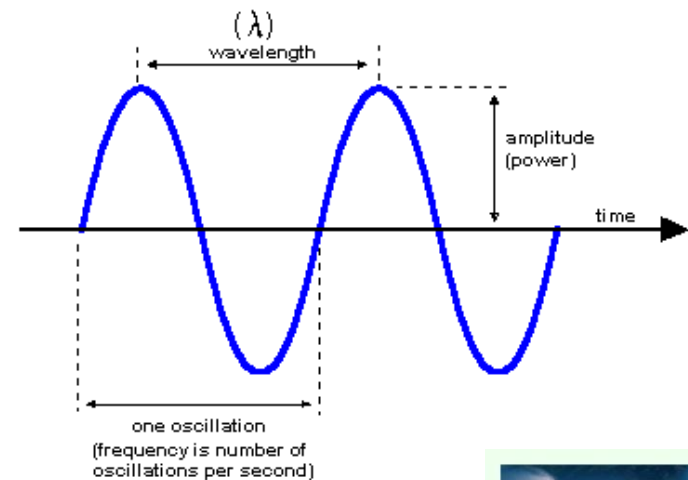
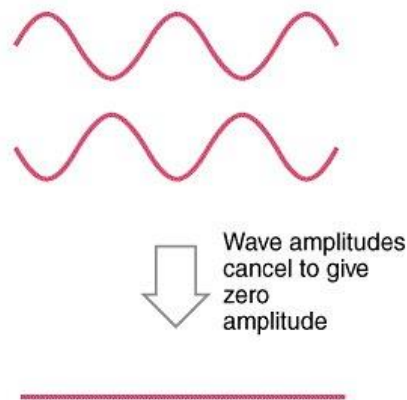
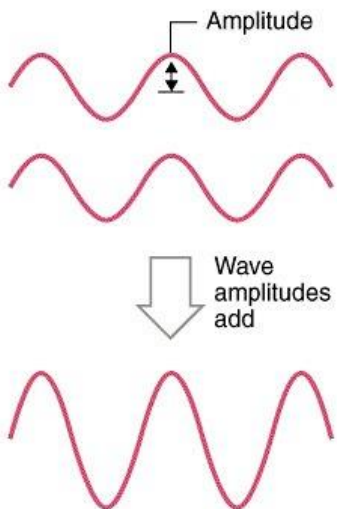
Ne je to vlna!



C. Davisson a L. Germer pozorovali difrakci elektronů na krystalu.

Zopakováno i s molekulami (vodíkem).

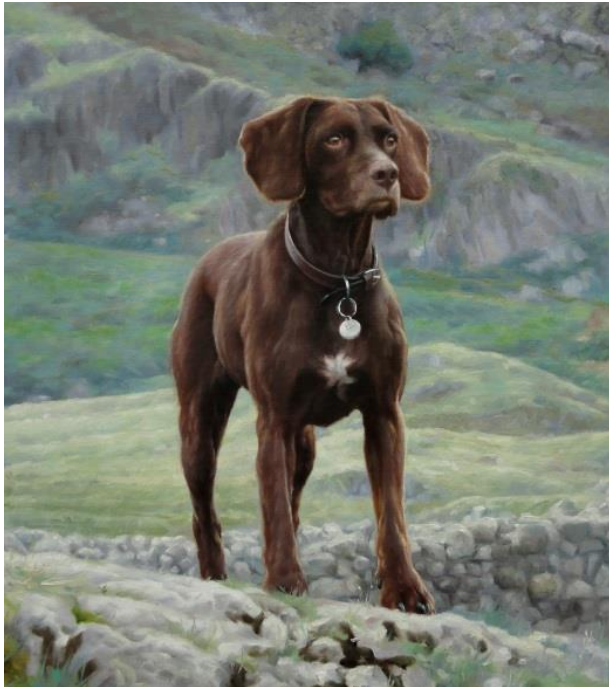
Difrakce je charakteristická vlastnost **vln** → nastává při interferenci vln.



Ne je to vlna!

L. de Broglie navrhl, že každá částice pohybující se s hybností p má vlnovou délku λ danou vztahem:

$$\lambda = \frac{h}{p}$$



$$\lambda = 10^{-35} \text{ m}$$

Pro difrakci musí být λ srovnatelná v řádech s velikostí!
Čím vyšší rychlost, tím kratší λ .

Dualismus

A. Einstein – světelné kvantum nese hybnost

De Broglie – hmotná částice mající hybnost je popsatelná vlnovou délkou

$$E = h\nu = mc^2$$

Jak danou částici popíšeme záleží jen na uspořádání experimentu a způsobu pozorování!



Princip komplementarity

Heisenbergův princip neurčitosti

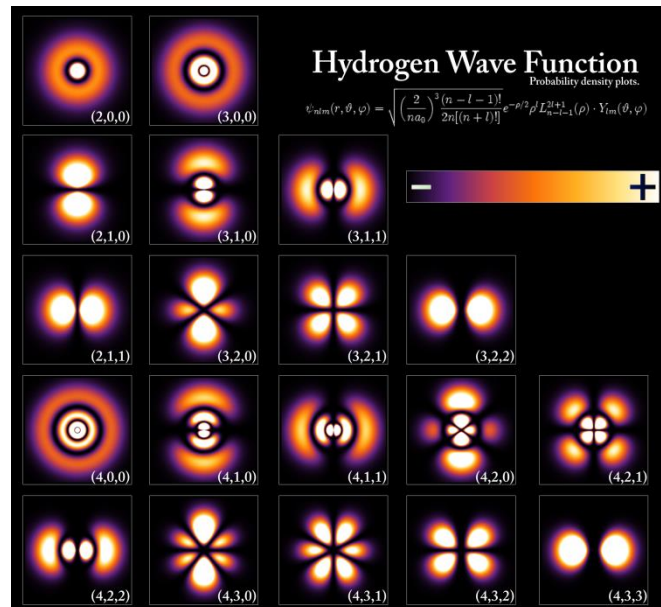
Není možno současně určit hybnost a polohu částice s libovolnou přesností.

Podobně energie a čas



Vítejte v mikrosvětě

- Pro popis chování systému podle počátečního stavu nelze použít klasickou Newtonovskou mechaniku → kvantová mechanika
- Klasický pojem trajektorie je v kvantové mechanice nahrazen pojmem vlna → vlnová funkce ψ .



Vlnová funkce - ψ

- Obsahuje všechny informace o částici

Smeared particle = perfect wave



Localized particle = tight wave packet



Somewhat localized particle = Wave packet



Čím více vln pro jednu částici máme, tím lépe ji můžeme lokalizovat, ale ztratíme informaci o hybnosti.

Jak získáme vlnovou funkcií?

- Vyhovuje Schrödingerově rovnici

$$H\psi = E\psi$$

(bezčasová S. rovnice)

- Pokud vlnová funkce částice nabývá hodnotu ψ v určitém bodě x , pravděpodobnost, že najdeme částici mezi x a $x+dx$ je úměrná $|\psi|^2 dx \rightarrow \psi^2$ je hustota pravděpodobnosti

Schrödingerova rovnice

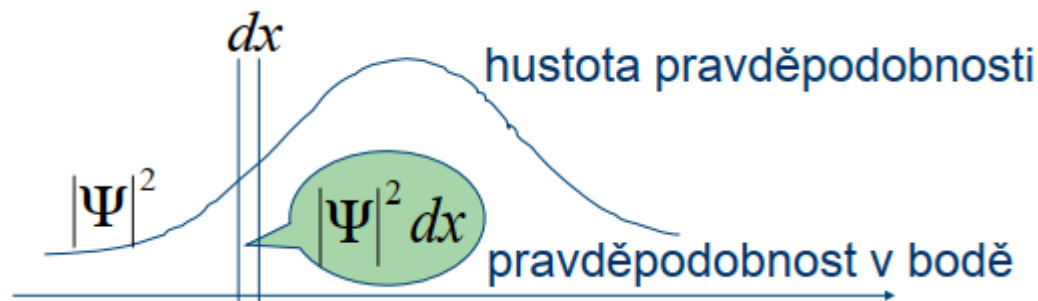
$$H\psi = E\psi$$

- Diferenciální rovnicí druhého řádu, kde řešením jsou dvojice (ψ, E) , které splňují tuto rovnici.
- ψ je vlastní funkcí hamiltoniánu (H)
- H popisuje kinetickou a potenciální energii částic
- konstanta E je vlastní hodnotou hamiltoniánu (popisuje tedy energetickou hodnotu vlnové funkce ψ).
- Exaktně je možno řešit pouze vodíkové atomy (H , He^+ , Li^{2+} , ...) s jedním elektronem
- Toužíte-li poznat víc, je tu kvantová chemie!

KFC / QCH

A k čemu vůbec vlnová funkce je?

Určuje pravděpodobnost výskytu částice (elektronu) v atomu

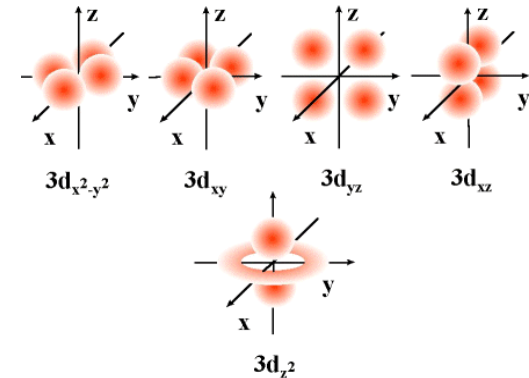
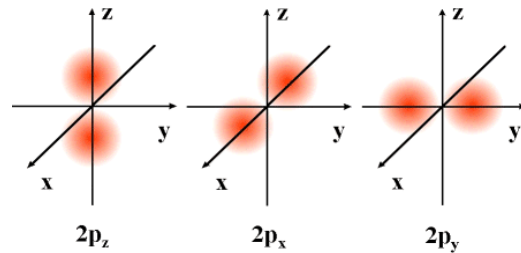
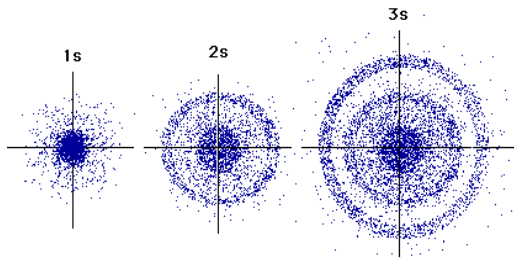


Každá vlnová funkce obsahuje 3 charakteristická celá čísla (kvantová čísla):

- Hlavní kvantové číslo (n)
 - charakterizuje energii AO
 - nabývá hodnot: $n = 1, 2, 3, \dots$
- Vedlejší kvantové číslo (l)
 - určuje tvar AO
 - nabývá hodnot: $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

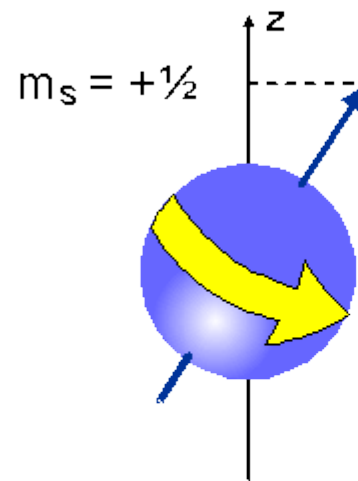
	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>
	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
$n = 1$	1 <i>s</i>					
$n = 2$	2 <i>s</i>	2 <i>p</i>				
$n = 3$	3 <i>s</i>	3 <i>p</i>	3 <i>d</i>			
$n = 4$	4 <i>s</i>	4 <i>p</i>	4 <i>d</i>	4 <i>f</i>		
$n = 5$	5 <i>s</i>	5 <i>p</i>	5 <i>d</i>	5 <i>f</i>	5 <i>g</i>	
$n = 6$	6 <i>s</i>	6 <i>p</i>	6 <i>d</i>	6 <i>f</i>	6 <i>g</i>	6 <i>h</i>

	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>	<i>h</i>
	$l = 0$	$l = 1$	$l = 2$	$l = 3$	$l = 4$	$l = 5$
$n = 1$	1 <i>s</i>					
$n = 2$	2 <i>s</i>	2 <i>p</i>				
$n = 3$	3 <i>s</i>	3 <i>p</i>	3 <i>d</i>			
$n = 4$	4 <i>s</i>	4 <i>p</i>	4 <i>d</i>	4 <i>f</i>		
$n = 5$	5 <i>s</i>	5 <i>p</i>	5 <i>d</i>	5 <i>f</i>	5 <i>g</i>	
$n = 6$	6 <i>s</i>	6 <i>p</i>	6 <i>d</i>	6 <i>f</i>	6 <i>g</i>	6 <i>h</i>

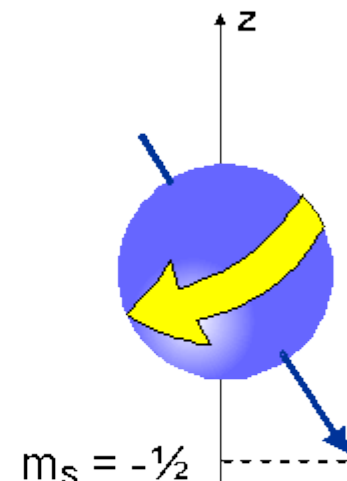


- Magnetické kvantové číslo (m_l):
 - určuje orientaci AO k souřadnému systému
 - nabývá hodnot: $m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$

- Spinové kvantové číslo (m_s) nabývá hodnot $\pm 1/2$
popisuje vnitřní moment rotace elektronu



α



β

Spinová multiplicita $2S+1$

Singlet (1), dublet (2), triplet (3)

$$S = 1/2(n_\alpha - n_\beta)$$

Elektronová konfigurace atomů

Pokud známe kvantová čísla všech elektronů v atomu, známe elektronovou konfiguraci atomu

- **Pauliho vylučovací princip**

“Dva nerozlišitelné fermiony se nemohou nacházet ve stejném kvantovém stavu.” - v jednom orbitalu se nemohou nacházet vce jak dva elektrony

- **Výstavbový princip**

“Orbitaly se obsazují od energeticky nejnižších”

- **Hundovo pravidlo**

“Nejstabilnější konfigurace je konfigurace s maximální multiplicitou.”

Závěr – elementární částice

- Hmota se skládá z elementárních částic (e, p, n) tvořících látku interagujících mezi sebou prostřednictvím elementárních částic polí (fotony)
- Mikrosvět elementárních částic má v mnoha ohledech poněkud zvláštní (kvantové) chování
- Existuje dualismus částice = vlna
- Vlnová funkce popisuje systém

Poděkování

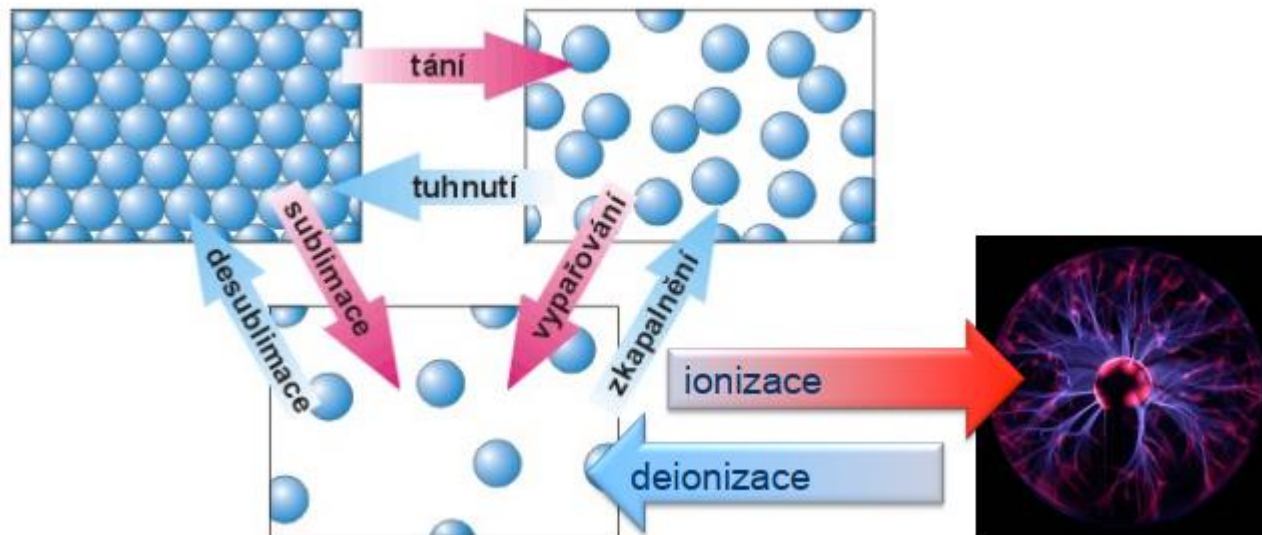
- Vytvořeno na základě podkladů
 - Prof. Otyepka
 - Dr. Kührová

Příště

- Interakce hmoty se zářením
- Stavba molekul

Skupenství

- Pevné, kapalné, plynné
- Plazma, kvark-gluonové plazma (kvagma), Bose-Einsteinův koncentrát (např. fotony)



Základní zákony

- 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

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.

Relativní velikost částic

THE RELATIVE SIZE OF PARTICLES

From the COVID-19 pandemic to the U.S. West Coast wildfires, some of the biggest threats now are also the most microscopic.

A particle needs to be 10 microns (μm) or less before it can be inhaled into your respiratory tract. But just how small are these specks?

Here's a look at the relative sizes of some familiar particles ↘

HUMAN HAIR 50-180 μm >
FOR SCALE

FINE BEACH SAND 90 μm >

GRAIN OF SALT 60 μm >

WHITE BLOOD CELL 25 μm >

GRAIN OF POLLEN 15 μm >

DUST PARTICLE (PM₁₀) <10 μm >

RED BLOOD CELL 7-8 μm >

RESPIRATORY DROPLETS 5-10 μm >

DUST PARTICLE (PM_{2.5}) 2.5 μm >

BACTERIUM 1-3 μm >

WILDFIRE SMOKE 0.4-0.7 μm >

CORONAVIRUS 0.1-0.5 μm >

T4 BACTERIOPHAGE 225nm >

ZIKA VIRUS 45nm >



Pollen can trigger allergic reactions and hay fever—which 1 in 5 Americans experience every year.
Source: Harvard Health

The visibility limits for what the naked eye can see hovers around 10-40 μm .



Respiratory droplets have the potential to carry smaller particles within them, such as dust or COVID-19.



Wildfire smoke can persist in the air for several days, and even months.