

Evropský sociální fond

Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti

Úvod do chemie

2/2 – 5 kreditů

Pavel Matějka

Pavel.Matejka@vscht.cz

Pavel.Matejka@gmail.com

<http://www.vscht.cz/anl/matejka>

VŠCHT Praha

1. O chemii vůbec

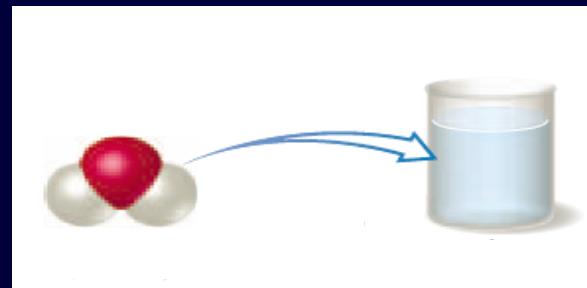
Komunikace chemiků

- studium hmoty a jejích transformací
 - chemistry, chemical science (the science of **matter**; the branch of the natural sciences dealing with the **composition** of **substances** and their **properties** and **reactions**)
 - χημεία derived from the Arabic word *kimia*, alchemy, where *al* is Arabic for *the*, the science that deals with the properties substances and their interactions. In the study of matter, chemistry also investigates the movement of electrons. Because of the diversity of matter, which is mostly composed of different combinations of atoms, chemists often study how atoms of different chemical elements interact to form molecules and how molecules interact with each other.

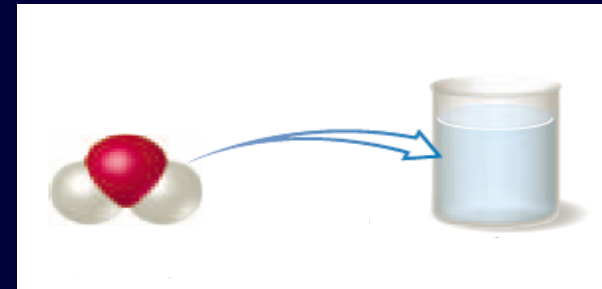
1. O chemii vůbec

Komunikace chemiků

- studium chemických jevů
 - chemické jevy se týkají změn látek a energetických přeměn
 - základní chemické jevy – **CHEMICKÉ REAKCE**
 - **ZÁNİK VÝCHOZÍCH LÁTEK** (*zánik vazeb*)
 - **VZNIK PRODUKTŮ** (*vznik nových vazeb*)
 - **REAKČNÍ STECHIOMETRIE** (MAKROSKOPICKÝ pohled)
 - **MECHANISMUS REAKCÍ** (MOLEKULÁRNÍ pohled)
 - **ENERGETIKA REAKCÍ**
 - **KINETIKA REAKCÍ**
 - **ROVNOVÁŽNÝ STAV**



1. O chemii vůbec



- studium souvislostí mezi světem molekulárním a makroskopickým
 - látky (izolovaná molekula, klastr, nanočástice, makroskopický objekt – např. monokrystal, kapalina, plyn)
 - **chemická individua** – chemicky čisté látky
 - záření (jednotlivý foton, tok záření)
- molekulární svět – **kvantová** fyzika (chemie)
- makroskopický svět – **klasická** fyzika (chemie) – např. klasická termodynamika
 - důležitá „pojítka“ – např. statistická termodynamika
 - **nanosvět ???**

1. O chemii vůbec

CHEMIE experimentální **EXPERIMENT** – DATA

- syntéza
- analýza
- měření

CHEMIE teoretická **TEORIE** - HYPOTÉZA

- definice, postuláty
- výroky - hypotézy

TEORIE – PREDIKCE

- vodítko pro další experiment

EXPERIMENT – OVĚŘOVÁNÍ

- vodítko pro další teorii

1. Komunikace chemiků

- **Nástroje pro komunikaci**
 - názvosloví, chemické vzorce
 - pojmosloví, pojmy a jejich definice
 - fyzikální veličiny a jejich jednotky
 - matematický aparát
- **Metody komunikace**
 - ústní sdělení – seminář, konference
 - písemná sdělení – protokol, článek
 - elektronická – e-protokol, web-presentace

1. Komunikace chemiků

- **Názvosloví – české (anorganické)**

- | | |
|-----------|---|
| 1820-1860 | Presl J.S. a filolog Jungmann J.
Obrozenecká doba |
| 1858 | Názvoslovná komise vedená V. Šafaříkem |
| 1859 | Šafaříkovy „Základy chemie“ |
| 1914 | práce Baťka A. a Votočka E.
zavedení označování oxidačního čísla
(známá zakončení), přijato na V. sjezdu
přírodovědců a lékařů
publikováno ve 12. ročníku Chem. Listů |
| 1941 | Hanuš J.
koordinační sloučeniny a další |
| 1953 | Tomíček O., Wichterle O. a Škramovský S.
Názvoslovná komise |
| 1960 | Názvoslovná komise při ČSAV – R. Brdička |

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - grafické zobrazení složení, případně struktury a prostorového uspořádání molekul chemické sloučeniny nebo prvku za použití symbolů prvků, případně čísel a dalších znaků (např. závorek) a grafických prvků (čar a křivek)

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - chemické značky pro prvky – H, He, Li, O
 - chemické vzorce pro sloučeniny
 - stechiometrické (empirické) vzorce
 - sumární (molekulové) vzorce
 - funkční (racionální) vzorce
 - strukturní (konstituční) vzorce
 - elektronový, rozvinutý, racionální, zjednodušený
 - geometrické vzorce
 - krystalochemické vzorce
 - konfigurační vzorce
 - konformační vzorce

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - stechiometrické (empirické) vzorce
 - složení chemické sloučeniny bez ohledu na skutečný počet atomů v molekule
 - (NaCl), {NaCl}
 - (H₈N₂O₄S), {H₈N₂O₄S}
 - (H₄N₂O₃), {H₄N₂O₃}
 - (CH₂O), {CH₂O}
 - (CH), {CH}
 - (CH₂), {CH₂}
 - (CH₃), {CH₃}

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - sumární (molekulové) vzorce
 - složení chemické sloučeniny s ohledem na skutečný počet atomů v molekule (?)
 - NaCl
 - $\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_4\text{S}$
 - $\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_3$
 - $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$
 - C_2H_2 , C_6H_6
 - C_2H_4 , C_3H_6 , C_6H_{12}
 - C_2H_6

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - funkční (racionální) vzorce
 - složení chemické sloučeniny s ohledem na skutečný počet atomů v molekule, postupný zápis funkčních skupin
 - NaCl
 - $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$
 - NH_4NO_3
 -
 - CH_3COOH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$

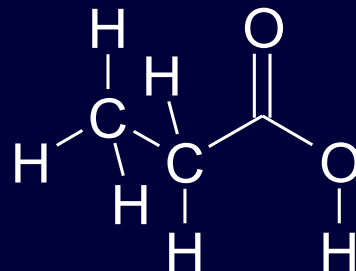
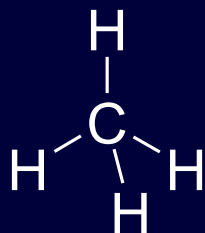
1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - strukturní (konstituční) vzorce
 - složení chemické sloučeniny s ohledem na propojování atomů v molekule
 - elektronový – nevazebné elektronové páry, nepárové elektrony, (parciální) náboje
-
- $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$
 - $\text{H} - \text{O} - \text{H}$
 - $\text{O} = \text{C} = \text{O}$

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - strukturní (konstituční) vzorce
 - složení chemické sloučeniny s ohledem na propojování atomů v molekule
 - rozvinutý konstituční – všechny atomy a vazby

- Na-Cl
- H-O-H
- O=C=O

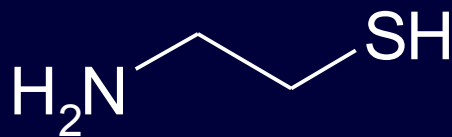


1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - strukturní (konstituční) vzorce
 - složení chemické sloučeniny s ohledem na propojování atomů v molekule
 - racionální konstituční – patrné funkční skupiny, nevypisují se všechny vazby
 - $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$
 - $\text{H}_2\text{N-CH}_2\text{-CH}_2\text{-SH}$

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - strukturní (konstituční) vzorce
 - složení chemické sloučeniny s ohledem na propojování atomů v molekule
 - zjednodušený (racionální) konstituční – patrné funkční skupiny, zjednodušený zápis skeletu molekuly



1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - geometrické vzorce
 - snaha znázornit prostorové uspořádání atomů

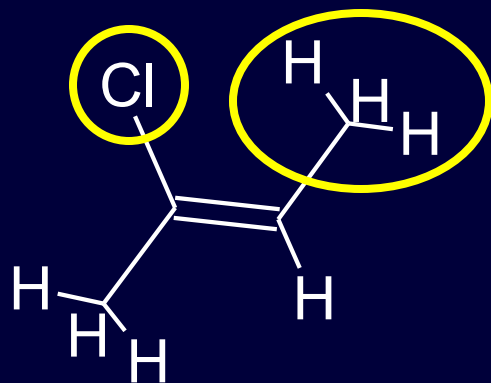


1. Komunikace chemiků

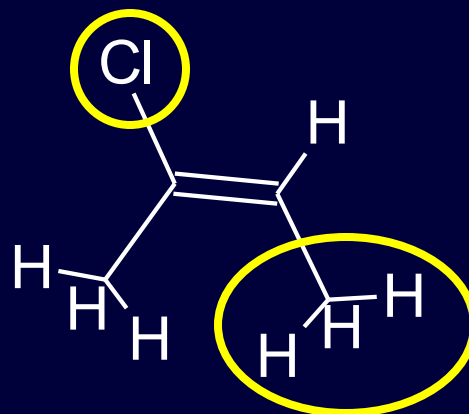
- Chemické vzorce
 - krystalochemické vzorce
 - empirické – neidealizované složení
 - počty atomů jednotlivých prvků v základní buňce, izomorfie – uzavření v kulaté závorce
 - $(\text{Zn}_{0,957}\text{Fe}_{0,061}\text{Cd}_{0,005}\text{Mn}_{0,002})_{1,025}\text{S}_{1,000}$
 - $(\text{Fe}^{2+}_{2,26}\text{Mn}_{0,47}\text{Mg}_{0,24}\text{Ca}_{0,04})_{3,01}(\text{Al}_{1,93}\text{Fe}^{3+}_{0,05})_{1,98}[\text{Si}_{3,01}\text{O}_{12,00}]$
 - koordinace každého atomu, iontu v krystalu
 - $\{\text{SiO}_{\frac{4}{2}}\}$ 4 O obklopují Si, 2 Si obklopují O
 - $\{\text{TiO}_{\frac{6}{3}}\}$ 6 O obklopuje Ti, 3 Ti obklopují O

1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - konfigurační vzorce
 - prostorová uspořádání molekul se stejnou konstitucí
 - cis-trans izomery, *E/Z* izomery



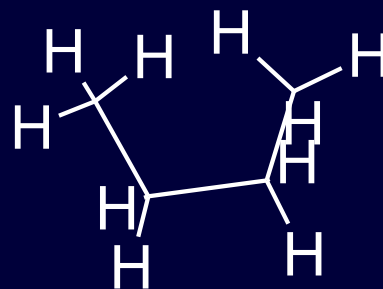
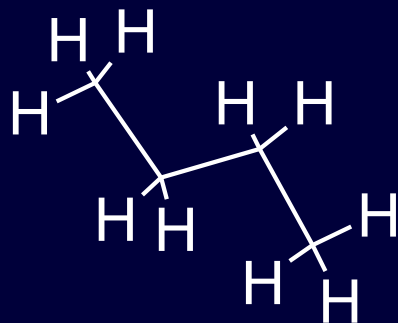
(2*Z*)-2-chlorobut-2-en



(2*E*)-2-chlorobut-2-en

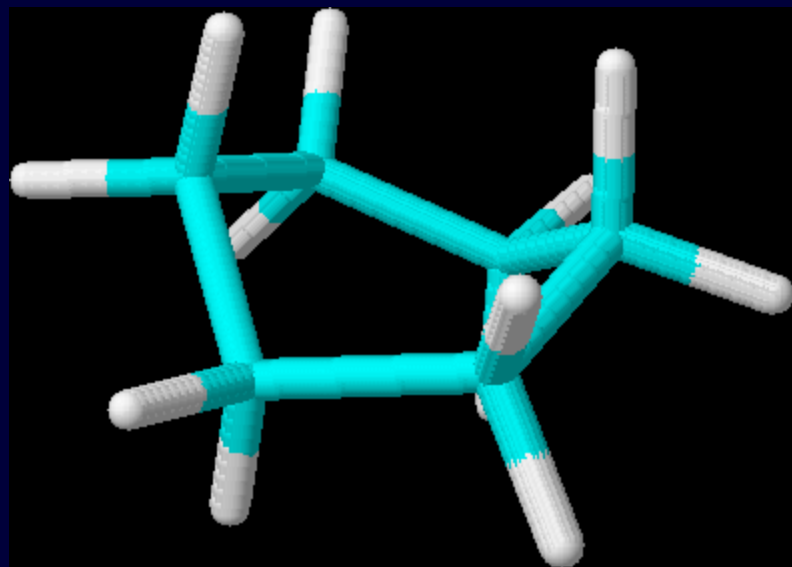
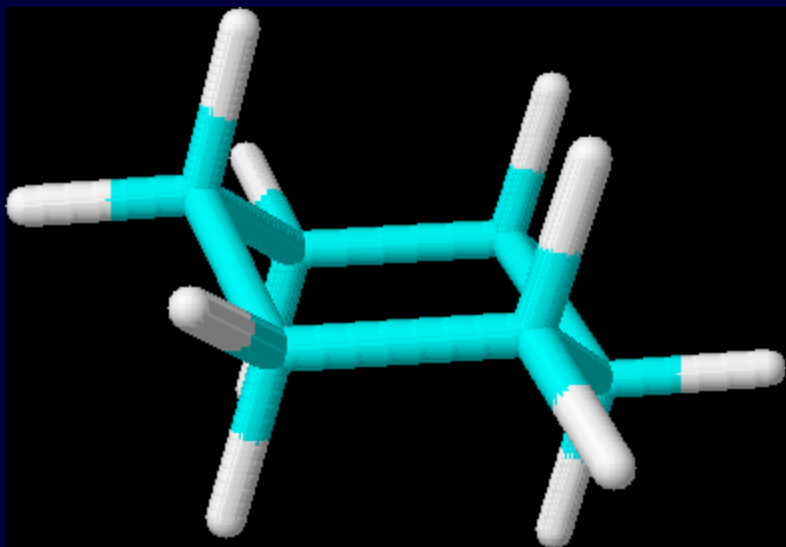
1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - konformační vzorce
 - prostorová uspořádání různých konformerů
 - lokální minima na hyperploše potenciální energie při rotaci kolem jednoduché vazby



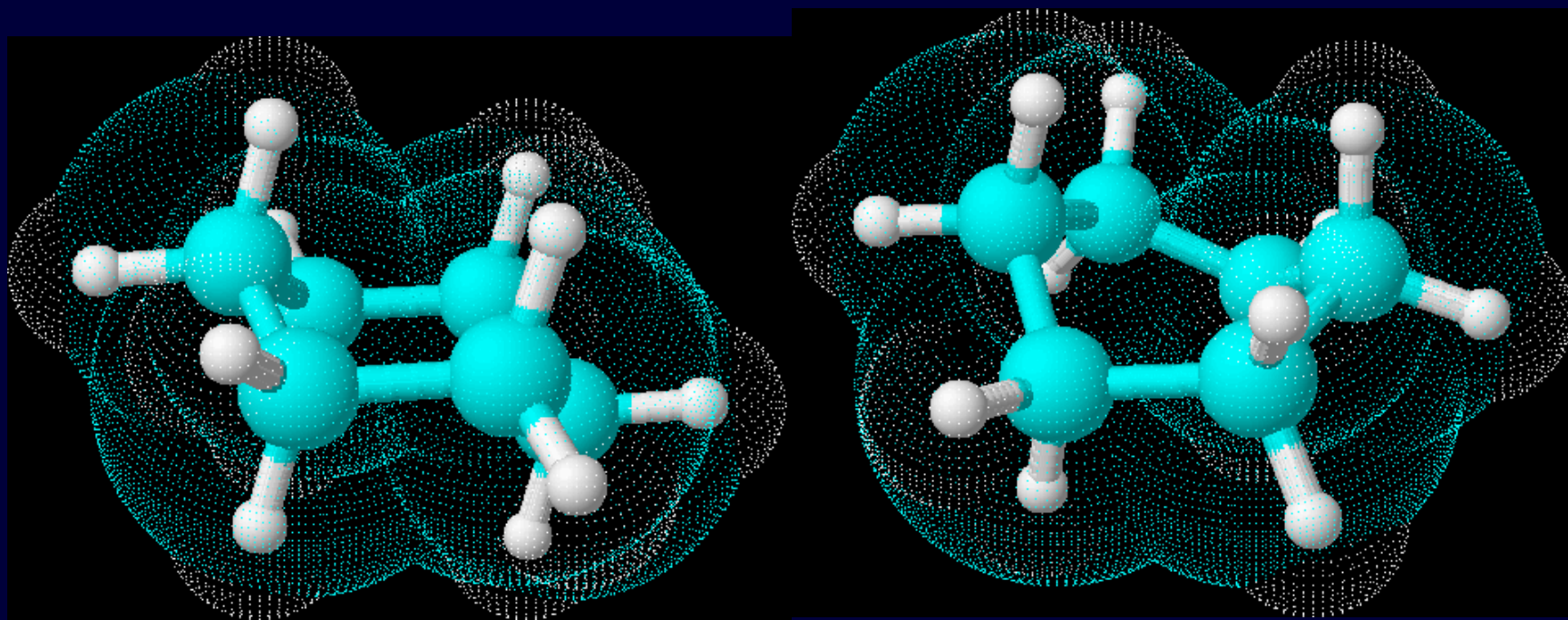
1. Komunikace chemiků

- „Chemické vzorce“ - modely
 - konformery
 - prostorová uspořádání - cyklická
 - lokální minima na hyperploše potenciální energie při rotaci kolem jednoduché vazby



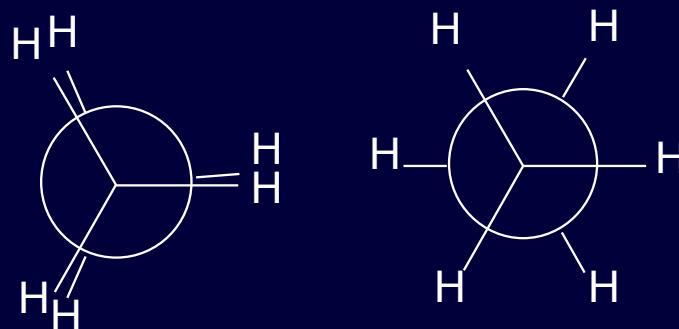
1. Komunikace chemiků

- „Chemické vzorce“ - modely
 - konformery
 - prostorová uspořádání - cyklická

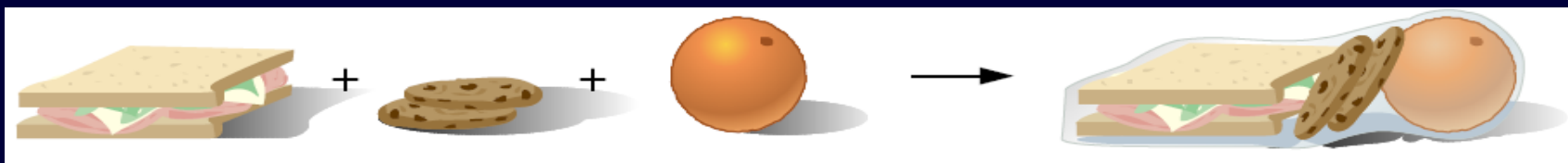


1. Komunikace chemiků

- Chemické vzorce
 - Newmanovy projekční vzorce
 - prostorová uspořádání různých konformerů
 - lokální minima na hyperploše potenciální energie při rotaci kolem jednoduché vazby

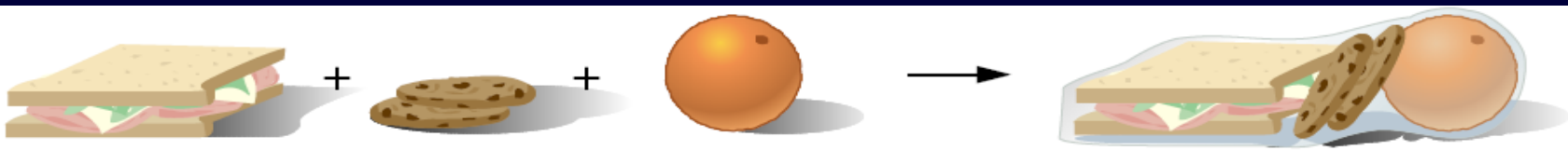


1. Komunikace chemiků

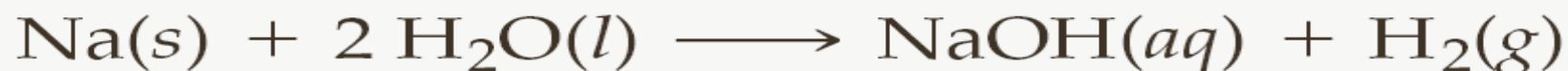
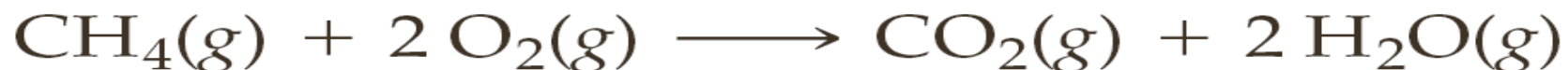
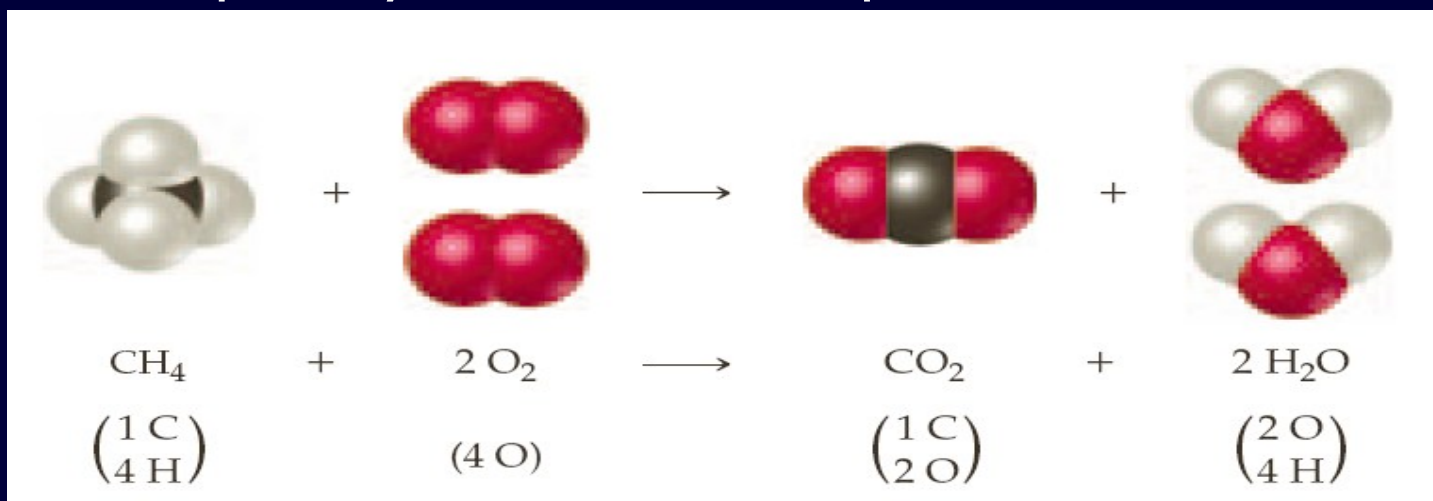


- Reakční schémata – nevyčíslená i vyčíslená
 - schéma jednoho kroku
 - schéma vícekrokové syntézy
 - cyklická schémata
- Chemické rovnice – vyčíslené
 - příp. další údaje – skupenský stav, teplota, tlak ...

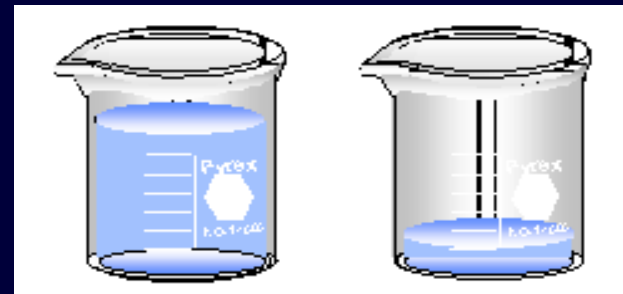
1. Komunikace chemiků



- chemické rovnice – vyčíslené
 - skupenský stav – důležité pro termochemii

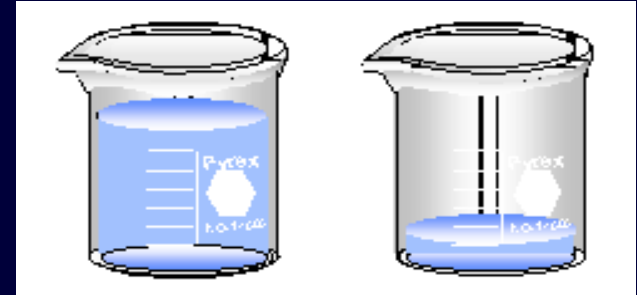


1. Komunikace chemiků



- Fyzikální veličiny a jejich jednotky
 - vlastnosti hmoty a jejich měření
 - hmotnost m [kg], [g], [mg] ...
 - látkové množství n [mol]
 - objem V [m³], [dm³], [ml], [μl]
 - zlomky – hmotnostní, molární, objemový
 - molární hmotnost, molární objem – „molární veličiny“
 - hustota
 - (látková) koncentrace

1. Komunikace chemiků



- Fyzikální veličiny a jejich jednotky
 - vlastnosti hmoty a jejich měření
 - **extenzivní** - stavové veličiny, jejichž hodnoty lze získat jako součet dílčích složek; extenzivní vlastnost soustavy - závislá na „velikosti“ (hmotnosti) soustavy
 - **intenzivní** - veličina závisající pouze na stavu soustavy nikoliv však na počtu částic, které ji tvoří (na její hmotnosti, látkovém množství)

1. Komunikace chemiků

- hmotnost m [kg] - extenzivní

1 kg je hmotnost mezinárodního prototypu kilogramu, který je uložen u Mezinárodního úřadu pro váhy a míry v Sevres u Paříže.

- látkové množství n [mol] - extenzivní

1 mol je takové množství látky, které obsahuje stejné množství částic (atomů, molekul, iontů apod.), jako je atomů v 0,012 kg nuklidu uhlíku $^{12}_6\text{C}$.

1. Komunikace chemiků

- látkové množství n [mol]



1 mol
helium
síra
měď
rtuť

1. Komunikace chemiků

- objem V [m^3], [dm^3], [ml], [μl]
- extenzivní
– vztah k délce

- 1 metr je délka dráhy, kterou proběhne světlo ve vakuu 1/299 792 458 sekundy.
- 1 sekunda je doba rovnající se 9 192 631 770 periodám záření, které odpovídá přechodu mezi dvěma hladinami velmi jemné struktury základního stavu atomu cesia 133 (při 0 K – CIPM 1997).

1. Komunikace chemiků

- molární hmotnost M [g.mol⁻¹]
- molární objem V_m [m³. mol⁻¹]
- molární tepelná kapacita [J.mol⁻¹.K⁻¹]
- molární Gibbsova energie [J. mol⁻¹]

– vztažené na jednotkové látkové množství

- intenzivní veličiny

- teplota

- 1 kelvin je roven 1/273,16 termodynamické teploty trojného bodu vody. (1967)

1. Komunikace chemiků

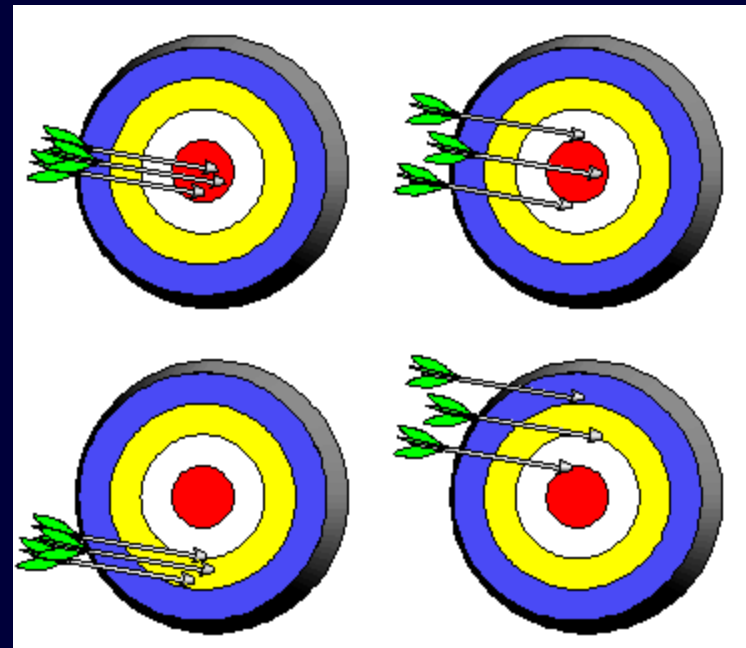
- zápis matematických, fyzikálních a chemických vztahů
 - symboly veličin, proměnných – *kurzívou* V , T
 - symboly konstant – obyčejně k , R , F
 - symboly jednotek – obyčejně nm , kg , fs
 - specifický způsob zápisu – vektory, matice, tenzory, operátory ...

1. Komunikace chemiků

- veličiny a jejich rozměr
 - veličiny – hodnoty vyjádřené v jednotkách – SI – V [m^3], T [K], c [$mol \cdot dm^3$]
 - veličiny bezrozměrné - 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 $A = -\log T$

1. Komunikace chemiků

- veličiny a jejich měření
 - Hodnota, nejistota, jednotky
 - přesnost
 - Těsnost souhlasu mezi nezávislými výsledky zkoušky získanými za předem specifikovaných podmínek.
 - správnost
 - Těsnost souhlasu mezi výsledkem měření a skutečnou hodnotou měřené veličiny.
 - skutečná hodnota



1. Komunikace chemiků

- matematický aparát
 - vztahy „úměrnosti“ – „trojčlenka“
 - sčítání, odečítání, násobení, dělení
 - logaritmy, mocniny
 - derivace, integrály, diferenciální rovnice
 - vektory, matice, tenzory v N-dimenzionálních prostorech
 - (lineární) operátory, funkcionály
 - Diracova notace (symbolika)
 - teorie grup