

2. Stavba hmoty

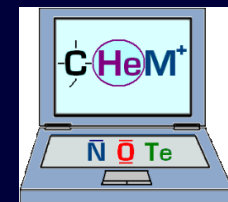
Atomy a molekuly



Evropský sociální fond
Praha & EU: Investujeme
do vaší budoucnosti

- **atom**

- jádro a elektronový obal
- **jádro** – nukleony
- **obal** – elektrony, pro chemii významné **valenční elektrony**



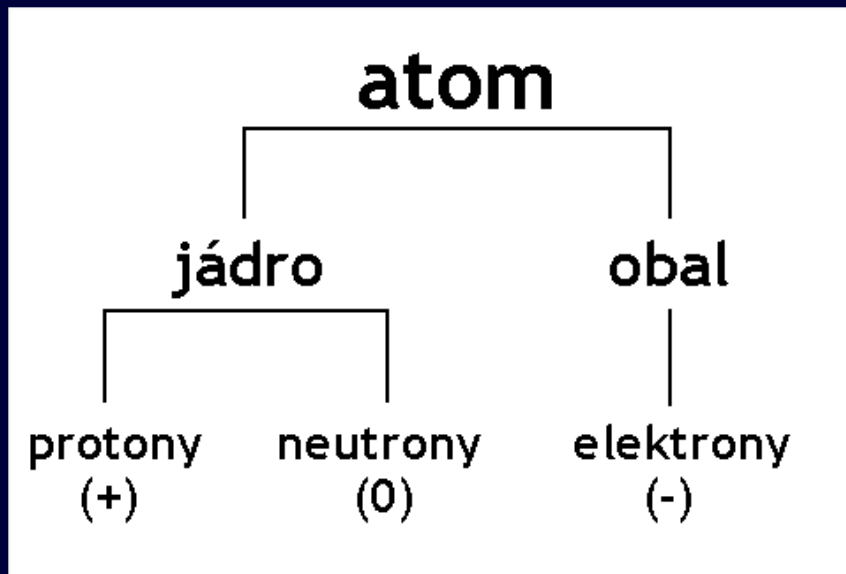
- **molekula**

- seskupení alespoň dvou atomů spojených chemickými vazbami („sdílení elektronů“)

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- atom prvku
 - ${}^A\text{X}$ – A – **nukleonové** (hmotnostní, hmotové) číslo ${}^{13}\text{C}$
 - ${}_Z\text{X}$ – Z – **protonové** (atomové) číslo ${}_6\text{C}$



2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- prvek – určující protonové číslo
 - ${}^A X$ – A – nukleonové číslo ${}^{13}\text{C}$, ${}^{12}\text{C}$
 - ${}_Z X$ – Z – protonové číslo ${}_6\text{C}$
 - konkrétní nukleonové i protonové číslo - **nuklid**
 - atomární forma (v plynném stavu)
(nízký tlak, vysoká teplota)
 - molekulární formy – O_2 , O_3 , N_2 , Cl_2
 - klastry (jednotky až stovky atomů)
 - a cluster is a (polycyclic) array of atoms that is intermediate in character between a molecule and a solid
 - P_4 , As_4 , C_{60} (dále klastry aniontové, kationtové)
 - vázány v krystalové struktuře

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- **izotopy** – od jednoho prvku, různé nukleonové číslo
- **izobary** – stejné nukleonové číslo, různé protonové číslo
- **izotony** – stejný počet neutronů

2. Stavba hmoty Atomy a molekuly

- izotopy
- izobary
- izotony

izotopy $Z = 16$	$^{32}_{16}\text{S}$	$^{33}_{16}\text{S}$	$^{34}_{16}\text{S}$
izobary $A = 130$	$^{130}_{52}\text{Te}$	$^{130}_{54}\text{Xe}$	$^{130}_{56}\text{Ba}$
izotony $N = 16$	$^{30}_{14}\text{Si}$	$^{31}_{15}\text{P}$	$^{32}_{16}\text{S}$

2. Atomy a molekuly

INTERAKCE	gravitační	slabá	elektromag- netická	silná	
		elektroslabá		funda- mentální	zbyt- ková
působí na	hmotu-energii	slabý náboj ("vůň")	elektrický náboj	barevný náboj	viz text
interagující částice	všechny	leptony kvarky	elektricky nabitě	kvarky gluony	hadrony
nosiče interakce	graviton (dosud nebyl pozorován)	$W^+ W^- Z^0$	γ (foton)	gluony	mezony

- jádro – nukleony – baryony
 - protony – kladný jednotkový náboj
 - neutrony – nulový náboj
 - uplatnění **silných interakcí**
 - gluony – vazba kvarků, mezony – vazba protonů a neutronů
 - dosah 10^{-15} m – síly krátkého dosahu
 - (síla coulombické repulze mezi kladně nabitými protony je proti **silné interakci** zanedbatelná)

http://www-hep2.fzu.cz/adventure/nucleus_binding.html

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- jádro - modely – kapkový, slupkový ...
- stabilita – (*hmotnostní defekt*)
 - důležitý poměr počtu neutronů a protonů
 - u lehčích atomů $A = 2 Z$
 - u těžších atomů $A > 2 Z$
 - stabilnější nuklidy sudo-sudé
 - magická čísla – 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 184
 - pouze čtyři stabilní lichá-lichá – ${}^2\text{H}$, ${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$, ${}^{14}\text{N}$

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- **jádro** – radioaktivní přeměny
 - α – záření – jádra ${}^4\text{He}$
 - β – záření – β^- , β^+ - elektrony, pozitrony
 - γ – záření
 - elektronový záchyt – K-záchyt, L-záchyt –
(následné zaplnění vakance z vyšší hladiny)
 - RADIOAKTIVITA – aktivita A [Bq]
 - kinetická rovnice 1.řádu
 - jaderné reakce, jaderné štěpení, jaderná fúze

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- **jádro** – jaderný spin
 - neutrony i protony – FERMIONY (Pauliho princip)
 - spinové kvantové číslo nukleonu nabývá lichých násobků $\frac{1}{2}$
 - NMR spektrometrie
 - nutný nenulový spin jádra - lichý počet alespoň jednoho typu nukleonů
 - příklad – ^1H , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P – polovinový spin jádra
 - příklad – ^{14}N , ^2H , ^{10}B – celočíselný spin jádra
 - jádra se sudo-sudá mají nulový celkový spin a nelze je měřit – ^{12}C , ^{16}O

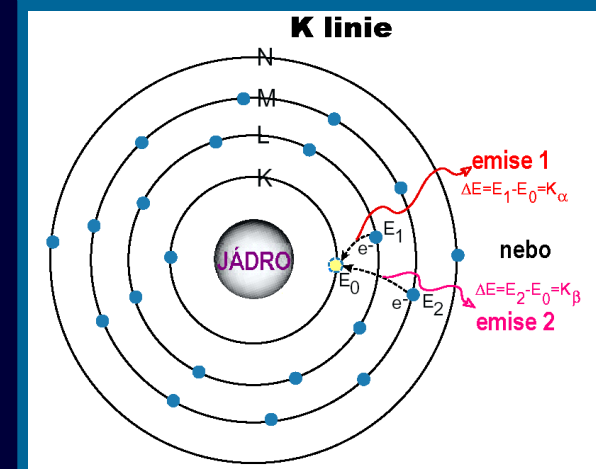
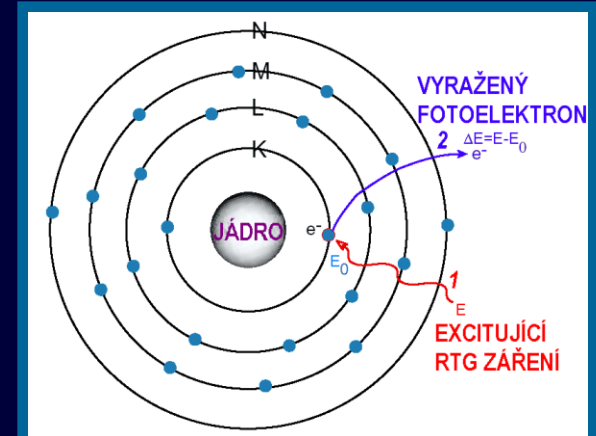
2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- **elektronový obal**
 - ATOMOVÉ ORBITALY
 - energetické hladiny, výstavbový princip
 - degenerace
 - základní stav a excitované stavy
 - kvantová čísla – hlavní - n , vedlejší - l , magnetické - m , spinové
 - Pauliho princip výlučnosti (fermiony)

2. Stavba hmoty Atomy a molekuly

- elektronový obal
 - vnitřní elektrony
 - spektrometrie využívající RTG záření
 - možnost prvkové analýzy
 - RTG fluorescence
 - valenční elektrony
 - spektrometrie v UV a viditelné oblasti – atomová a molekulová
 - meziatomové interakce – vznik chemické vazby, molekulové orbitaly – σ , π , π^* , σ^*



2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- chemická vazba
 - překryv AO – vznik MO – σ , π , π^* , σ^*
 - vazebná energie
 - délka chemické vazby („síla vazby“)
 - kovalentní vazba, koordinační vazba, iontová vazba, „kovová vazba“
 - lokalizace MO, polarita vazby, počet zúčastněných AO
 - vznik a zánik chemických vazeb
 - **CHEMICKÁ REAKCE**

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- molekula

- seskupení atomů spojených chemickými vazbami („sdílení elektronů“)
- prostorová struktura – geometrie
- kartézské souřadnice jader atomů („rovnovážné“ souřadnice)
- vnitřní souřadnice
 - délky vazeb, valenční (vazebné) úhly, di(h)edrální úhly, mimorovinné souřadnice

2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- molekula
 - seskupení atomů spojených chemickými vazbami („sdílení elektronů“)
 - elektroneutrální útvar
 - obvyklé molekuly – sudý počet e^-
 - nepárový elektron – radikál, biradikál
 - lichý počet atomů vnášejících lichý počet e^-
 - odvozené elektricky nabitě částice
 - kationty, anionty, (radikálové ionty)

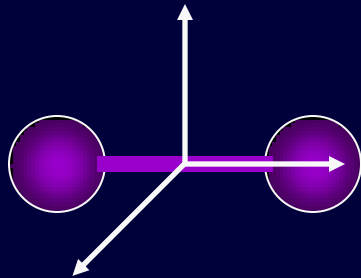
2. Stavba hmoty

Atomy a molekuly

- **molekuly**
 - seskupení atomů spojených chemickými vazbami („sdílení elektronů“)
 - **dynamické objekty** – vibrace, rotace
 - stupně volnosti
 - velmi **odlišné velikosti** – od biatomických přes „malé“ molekuly k makromolekulám
 - strukturní variabilita, rigidita struktury

Stupně volnosti

2 atomy spojené vazbou - LINEÁRNÍ MOLEKULA



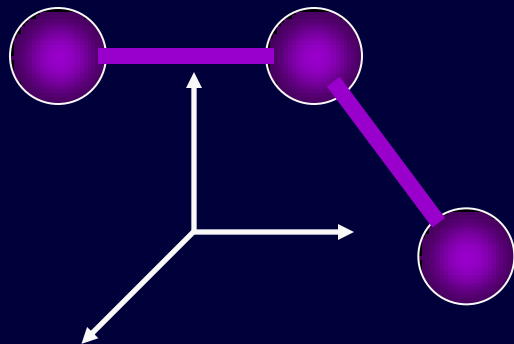
2 x 3 stupně volnosti ~ 6

3 stupně volnosti - translace těžiště

2 stupně volnosti - rotace molekuly

1 stupeň volnosti - vibrace

3 atomy spojené vazbami - LOMENÁ MOLEKULA



3 x 3 stupně volnosti ~ 9

3 stupně volnosti - translace těžiště

3 stupně volnosti - rotace molekuly

3 stupně volnosti - vibrace

Vibrační stupně volnosti

N atomů spojených vazbou - LINEÁRNÍ MOLEKULA

$N \times 3$ stupně volnosti $\sim 3N$

3 translace těžiště

2 stupně volnosti - rotace molekuly

$3N - 5$ stupňů volnosti - vibrace

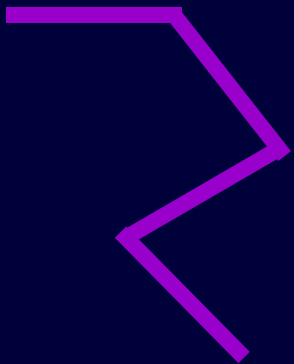
N atomů spojených vazbou - LOMENÁ MOLEKULA

$N \times 3$ stupně volnosti $\sim 3N$

3 translace těžiště

3 stupně volnosti - rotace molekuly

$3N - 6$ stupňů volnosti - vibrace



2. Stavba hmoty

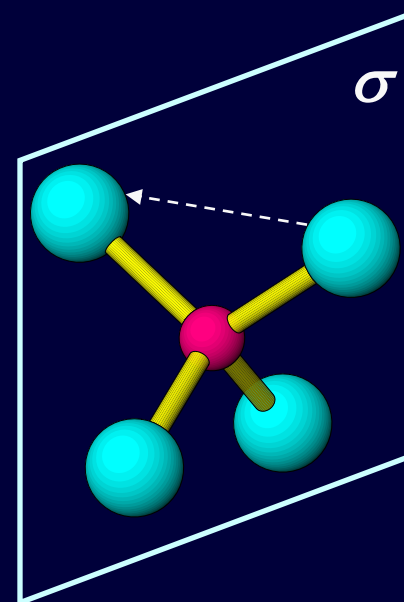
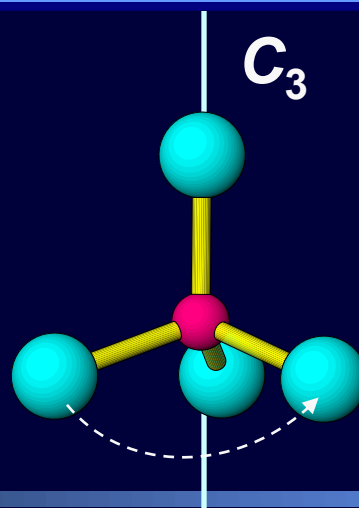
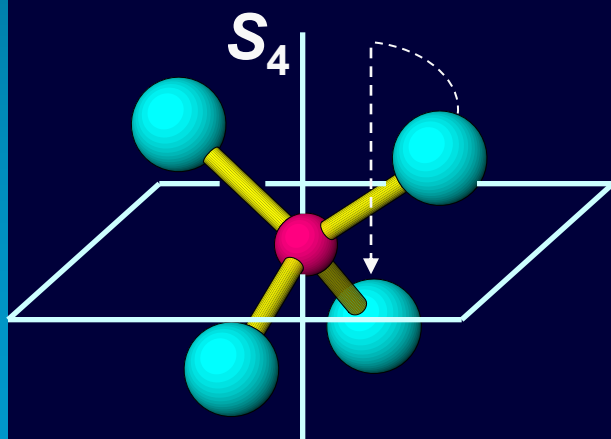
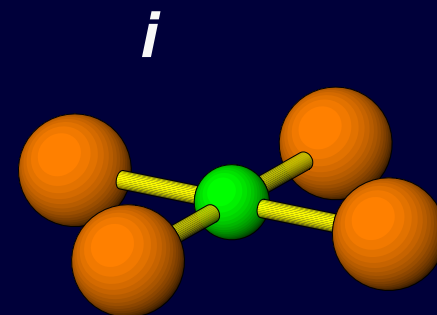
Atomy a molekuly

- molekula
 - prostorové seskupení atomů spojených chemickými vazbami („sdílení elektronů“)
 - **SYMETRIE molekul**
 - prvky a operace symetrie
 - zachování pozice alespoň jednoho bodu (jeden bod tělesa invariantní)
 - zachování vzdáleností, úhlů, velikosti
 - **bez translace**
 - » BODOVÉ GRUPY SYMETRIE

2. Atomy a molekuly

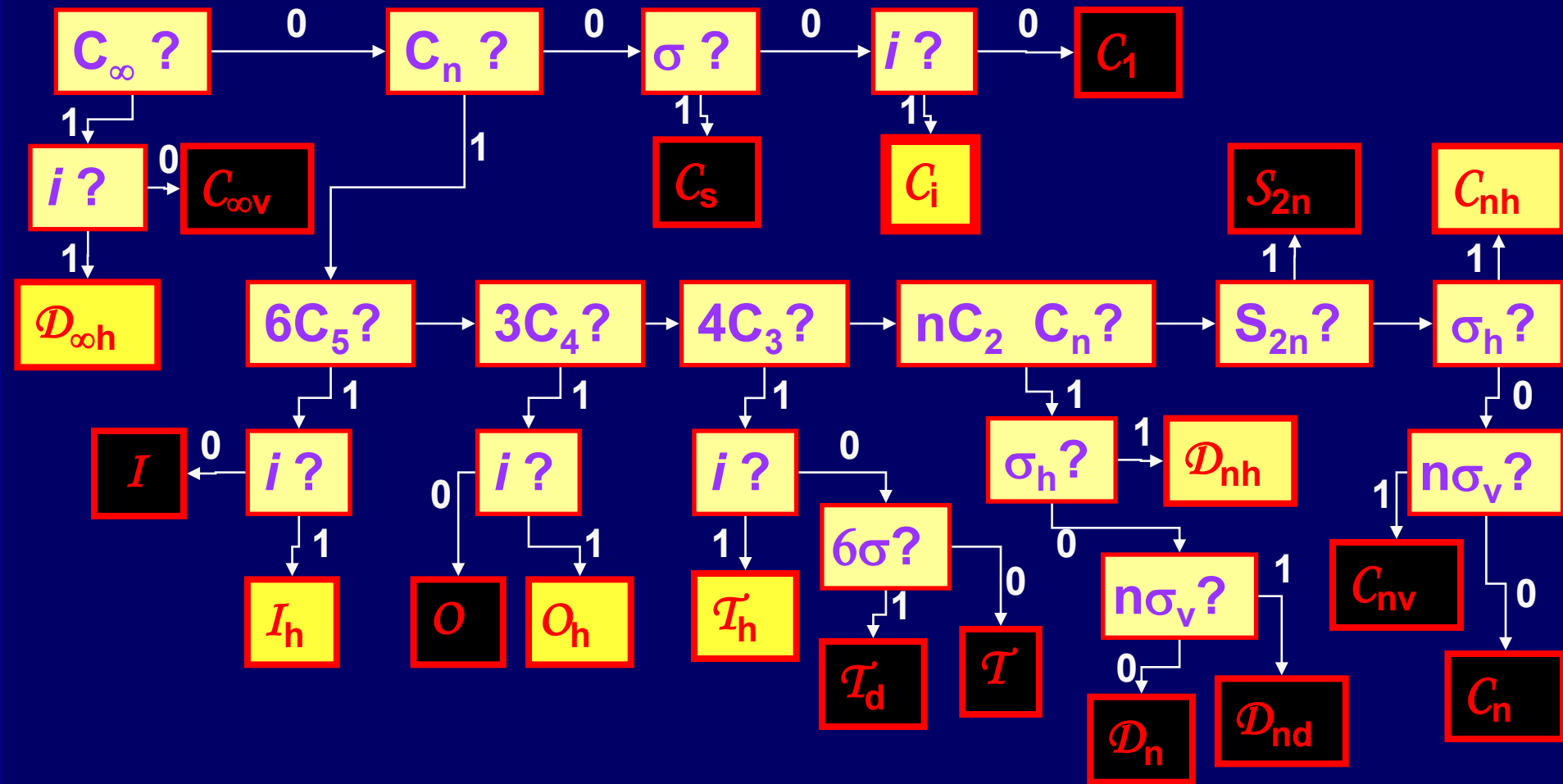
- SYMETRIE molekul
 - prvky / *operace* symetrie

- identita – E
- střed symetrie / *inverze* – i
- n -četná osa symetrie / *rotace* – C_n
- rovina symetrie / *zrcadlení, reflexe* – s
- n -četná rotačně-reflexní osa – S_n



2. Atomy a molekuly

- Množiny operací symetrie
 - grupy – grupové postuláty – „bodové“ grupy



2. Atomy a molekuly

- Množiny operací symetrie
 - grupy – grupové postuláty – „bodové“ grupy
 - grupové násobení – „skládání“ (postupná aplikace) operací symetrie
 - uzavřenost grupy – výsledek grupového násobení je též prvkem grupy
 - grupové násobení je asociativní
 $(a.b).c = a.(b.c)$
 - existuje neutrální prvek - identita – E
 - $e.f = f.e = f$
 - ke každému prvku existuje inverzní prvek
 - $f.f^{-1} = f^{-1}.f = e$

2. Atomy a molekuly

- Množiny operací symetrie
 - grupy – grupové postuláty – „bodové“ grupy
 - grupové násobení – „skládání“ (postupná aplikace) operací symetrie
 - grupové násobení nemusí být komutativní
$$a.b \neq b.a$$
 - grupa, v níž pro každé dva prvky platí komutativnost – komutativní (Abelova) grupa
 - podgrupy – část grupy splňující grupové postuláty
 - triviální podgrupa – jednotková grupa tvořená identitou

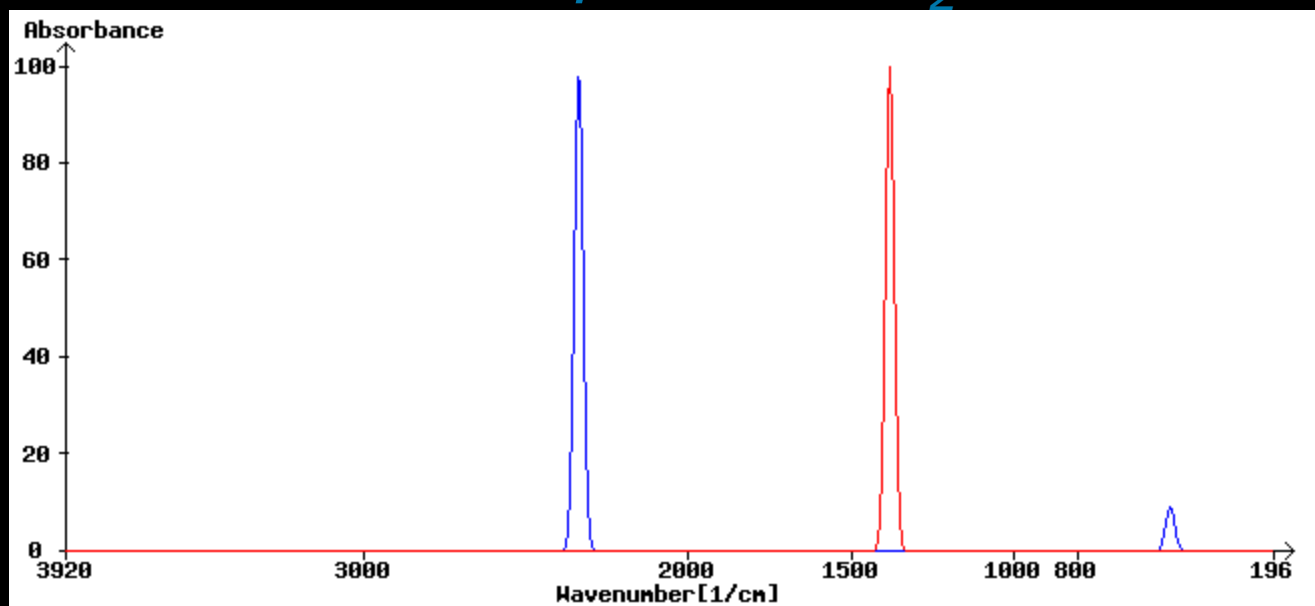
Symetrie v chemii

Aplikace:

- klasifikace molekul a vlastnosti molekul
 - pozn. – chirální molekuly – nemají rotačně-reflexní osu
- hybridní orbitaly
- molekulové orbitaly
- teorie krystalového pole
- vibrační spektra – IČ a Ramanova spektroskopie
- predikce dovolených spektrálních přechodů

Rozdíly IČ a Ramanovy spektrometrie

APROXIMATIVNÍ VÝPOČTY VIBRAČNÍCH MÓDŮ *IČ/Ramanova spektra CO₂*



IR:	calculated (3557 data points)	Structure:	CO ₂	
Origin:	Vamp7.0	Method:	PM3	
Author:	WWW daemon apache	Date:	2005-09-05 14:38:02	
From:	3920.0 [1/cm]	To:	196.0 [1/cm]	
Xunit:	[1/cm]	Yunit:	Absorbance	

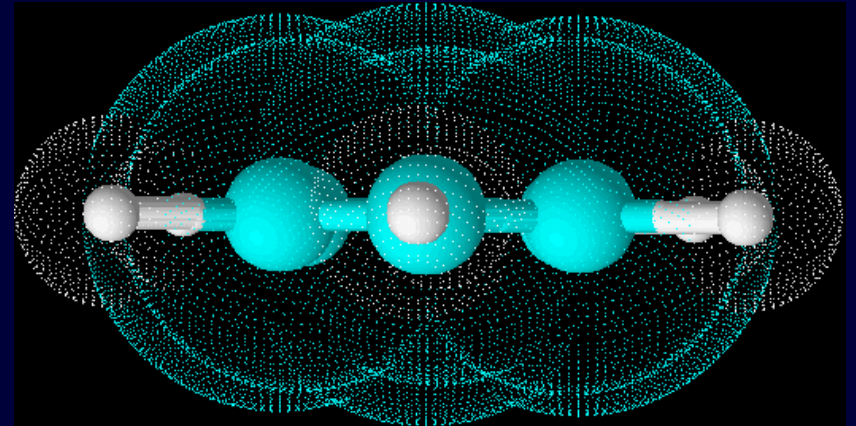
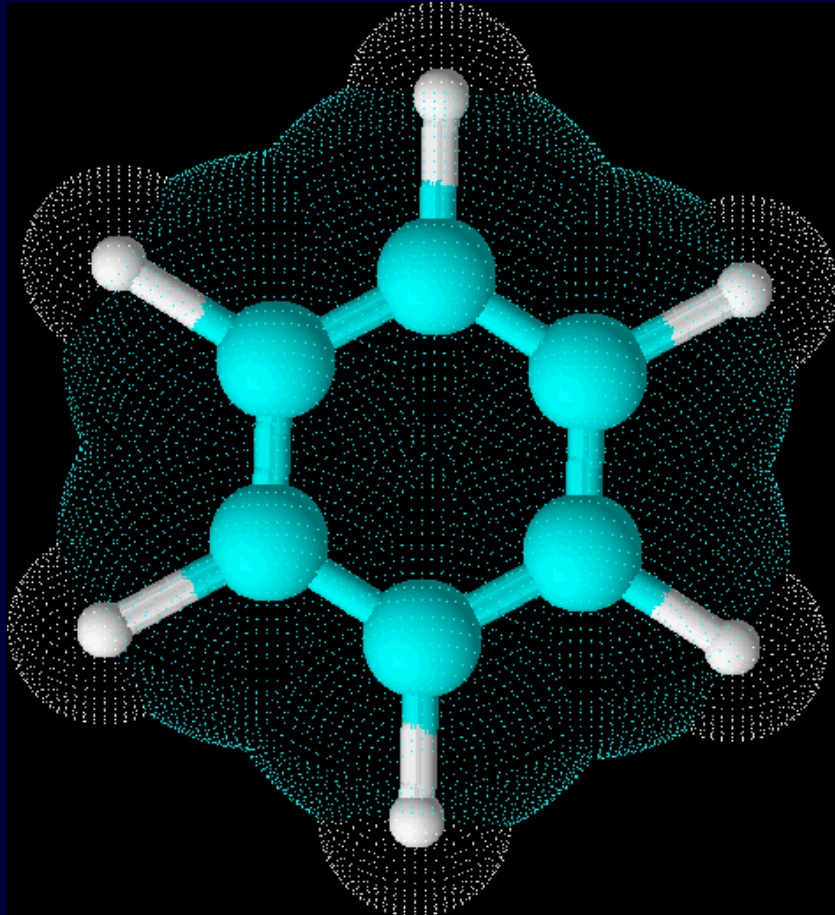
Rozdíly IČ a Ramanovy spektrometrie

APROXIMATIVNÍ VÝPOČTY VIBRAČNÍCH MÓDŮ *IČ/Ramanova spektra CO₂*

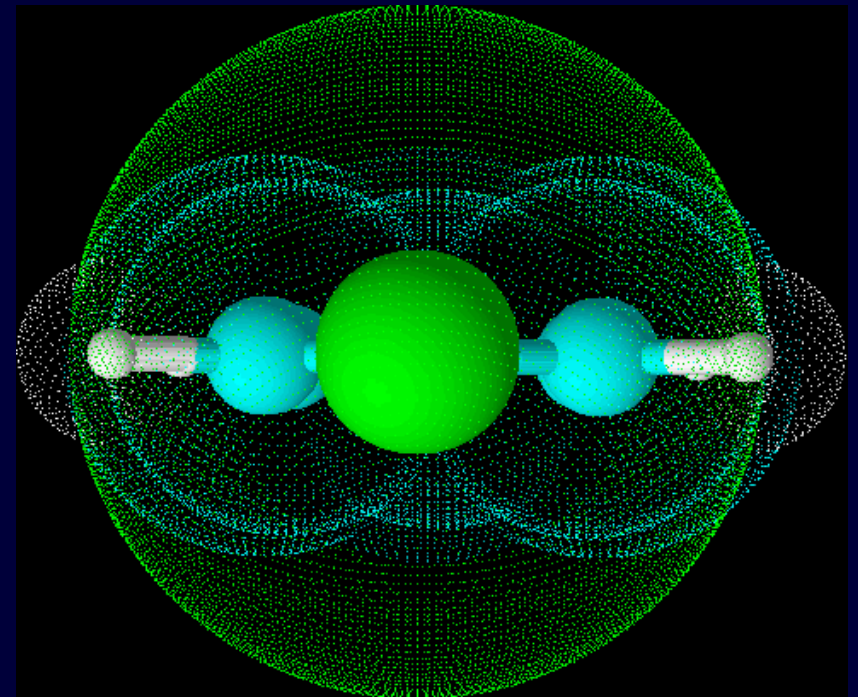
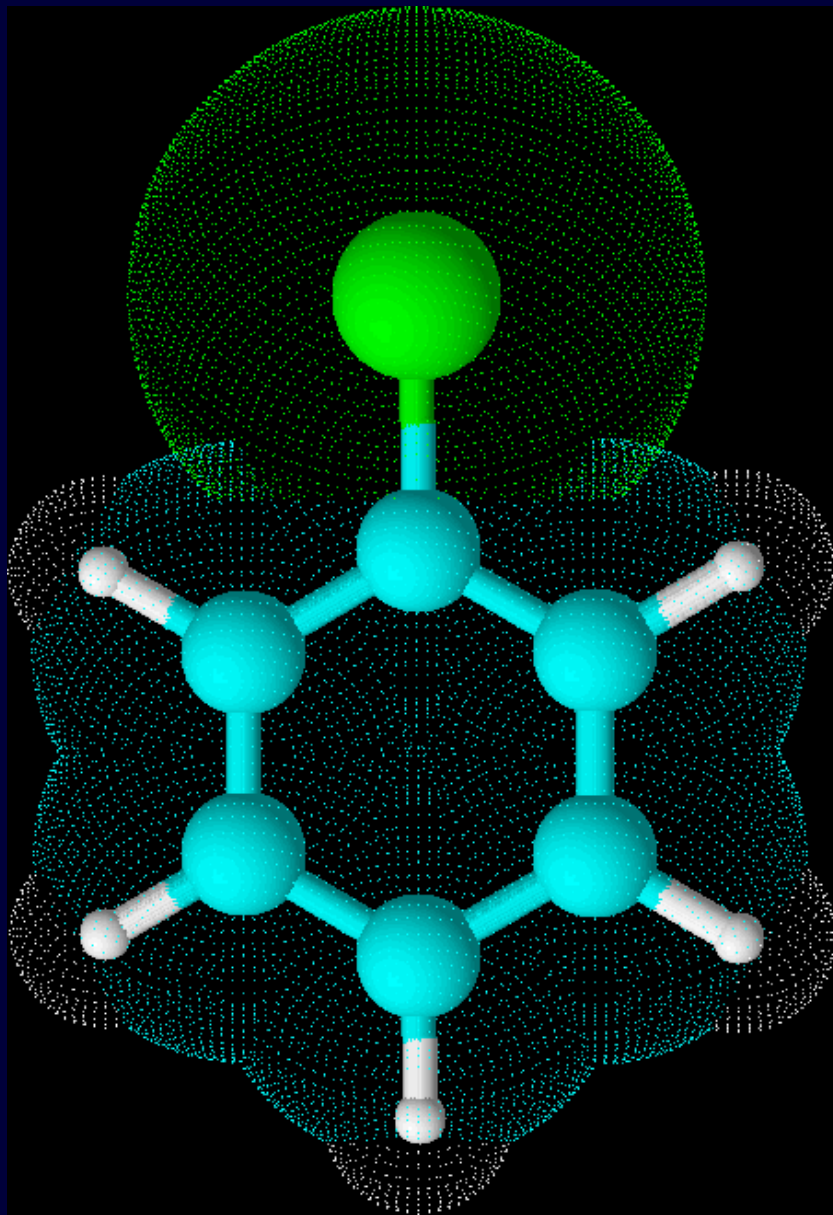
Normal Vibrations:
Click on the wave number to see corresponding 3D normal vibration

Peakname	[1/cm]	IR Intensity	Raman Intensity	Peakname	[1/cm]	IR Intensity	Raman Intensity
4 SIU	2339.06	100.000	0.000	3 PIU	516.85	4.693	0.000
1 SIG	1379.97	0.000	100.000	3 PIU	514.62	4.689	0.000

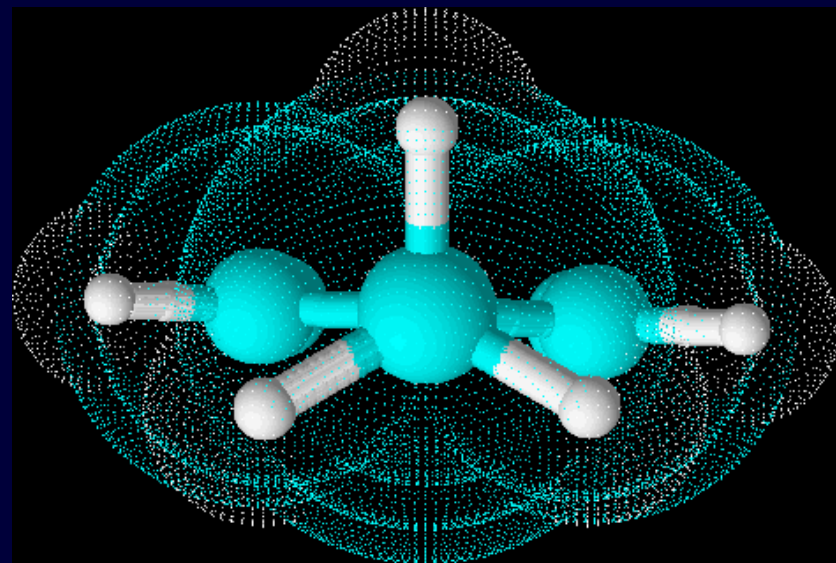
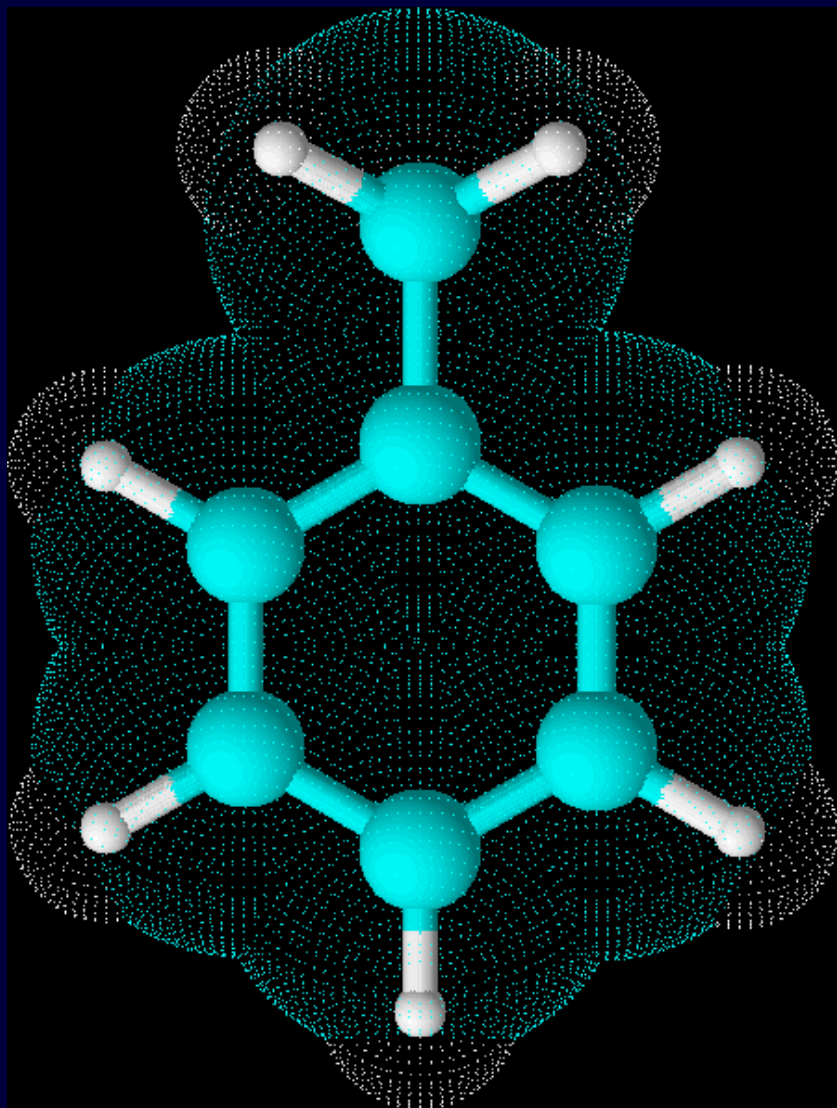
Příklady molekul



Příklady molekul



Příklady molekul



Příklady molekul

