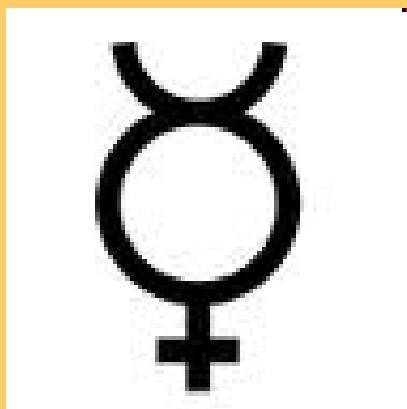
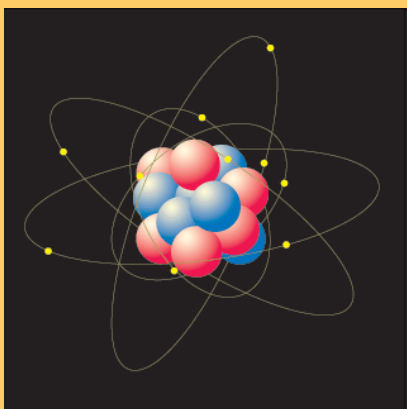


Repetitorium chemie I.

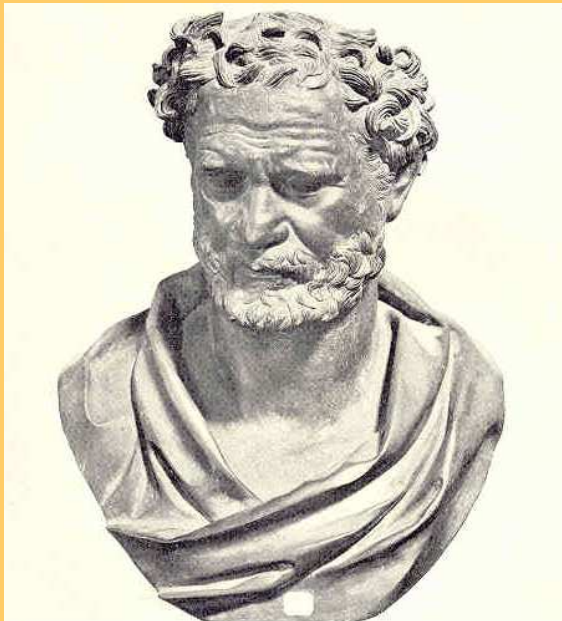


$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r})+V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

Atomy, prvky, obecná chemie
(2016)

Historické ohlédnutí: „nejmenší částčky hmoty“

- 5. stol. př.n.l. – Leukippos z Milétu, Demokritos z Abdér
škola atomistů, později zapomenuto
- Izák Caban: *Existentia atomorum* (Wittenberg 1667)
(vůně rozmarýnu / Španělsko, hřebíček / Zanzibar)



Démokritos z Abdér završuje Leukippovo učení tím, že zavádí do filozofie (a vědy) **pojem atom** - atomem je přitom podle Démokrita **základní, dále již nedělitelná částice látky** - právě jen z těchto částic (a z prázdna, které je obklopuje) je pak vytvořen celý svět.

Historické ohlédnutí: „nejmenší částčky hmoty“

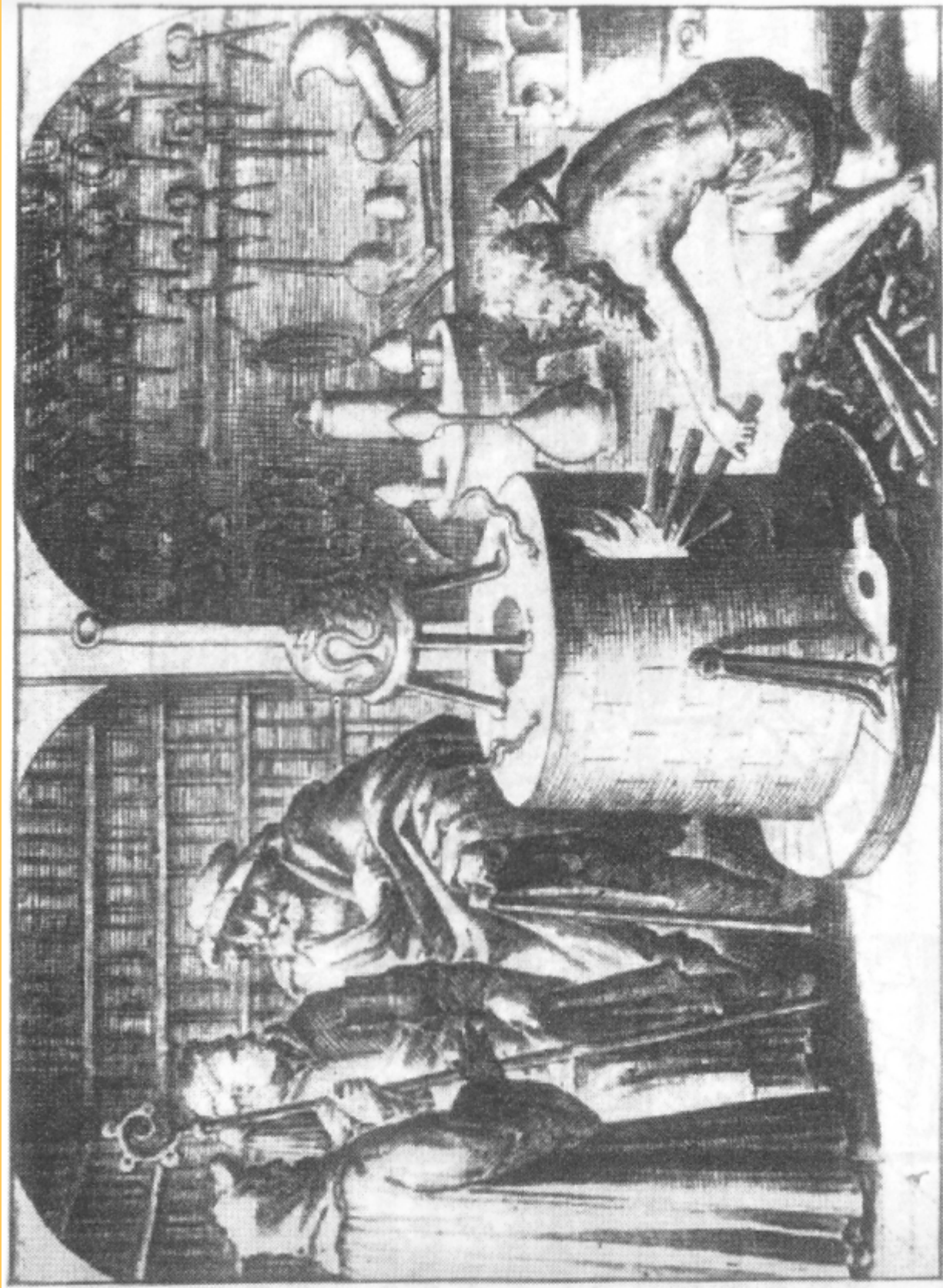


Obr. 3 Téměř současně s Lemeryho učebnicí se ve Francii objevilo neobvyklé alchymické dílo, *Mutus Liber* (Němá kniha). Datované 1677 v La Rochelle je opravdu němá; jediným textem je titulní strana, na dalších už je pouze symbolická mluva alchymie. Na tomto obrázku je v horní části v kapce postava Merkura stojící na Slunci a Měsíci, což se dalo vykládat jako rtuť, zlato a stříbro.



Obr. 4 *Mutus Liber* má jen patnáct stran, na nichž vystupuje adept alchymie pracující se svou manželkou na Velkém Díle, výrobě kamene mudrců. Na řadě stran najdeme zobrazení operací, které se přitom měly provést.

Alchymie: období hledání a nalézání



Věčné dilema evropské alchymie: kde hledat pravdu, v knihovně, anebo v laboratoři

IX.

X.

XI.

XII.

XIII.

XIV.

XV.

XVI.

XVII.

XVIII.

arabská
alchymie

překlady arabských
děl

racionální alchymie

paracelsovska
alchymie

poznatky o chemických
látkách

technická chemie

Historické ohlédnutí: „nejmenší částčky hmoty“



Zakladatel „**iatrochemie**“

„Nikoli jako oni říkají: alchymie dělej zlato, dělej stříbro. Zde je ručení: dělej léky a obračej je proti nemocem“

Velké ranhojičství (Ulm 1536)

Liber Paramirum

Herbarius

Knihy o tartarických onemocněních

Knihy o dlouhém životě

Archidoxis

Liber Paragranum

Knihy o otravách horníků

Philosophia sagax (Astronomia Magna)

Theophrastus Philippus Aureolus von Hohenheim (1493/4-1541)
řečený Paracelsus

Historické ohlédnutí: „nejmenší částčky hmoty“

- Počátek 18. století: novodobý atomismus, založený na experimentech
- 1738 Bernoulli: kinetická teorie plynů, matematicky odvodil závislost tlaku a objemu plynu (**Boylův-Mariottův zákon**)

$$p \cdot V = \text{konst.}$$

abbé Edmé Mariott:

$$T = \text{konst.}$$



Robert Boyle

(1627-1691)

Historické ohlédnutí: „nejmenší částčky hmoty“

- Dalton počátkem 19. století formuloval základní poučky atomové teorie:
 1. Prvky se skládají z hmotných atomů
 2. Je tolik druhů atomů, kolik je prvků
 3. Atomy jednoho prvku mají všechny vlastnosti stejné
 4. Atomy se mohou chemicky slučovat

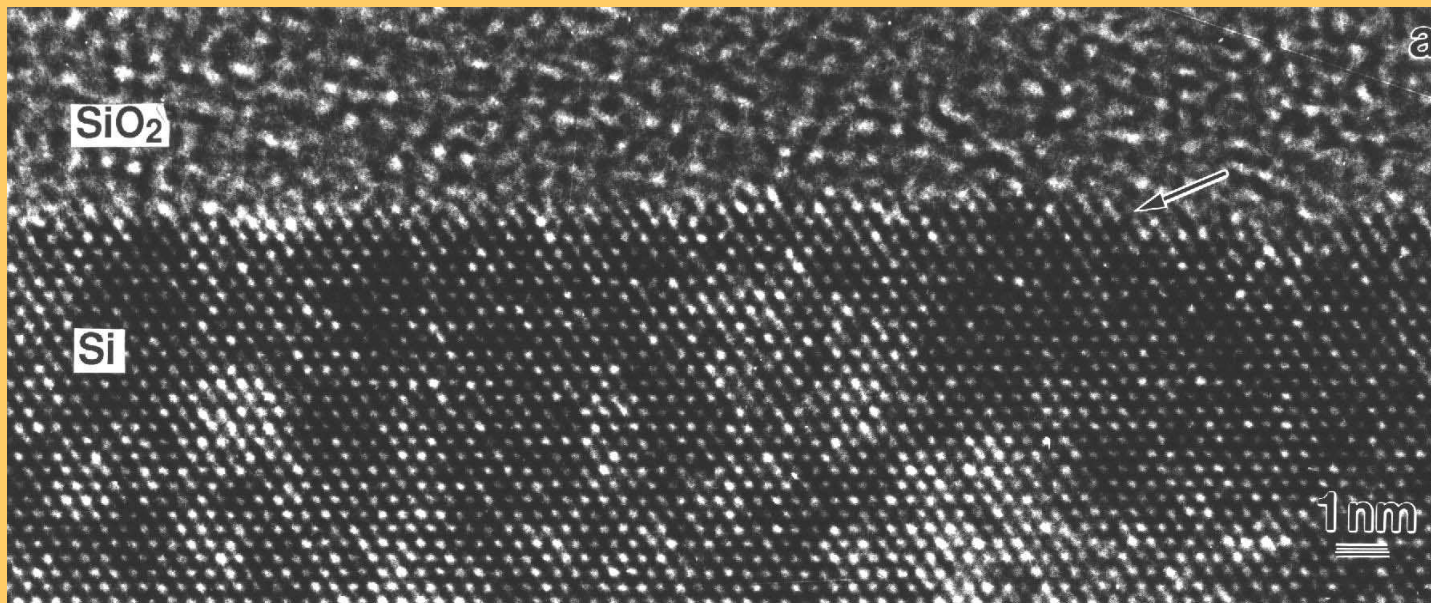


6. 9. 1766 - 27. 7. 1844

V roce 1794 Dalton jako první vědecky vysvětlil podstatu barvosleposti - sám barvoslepostí trpěl. Na jeho počest byla barvoslepost pojmenována *daltonismus*.

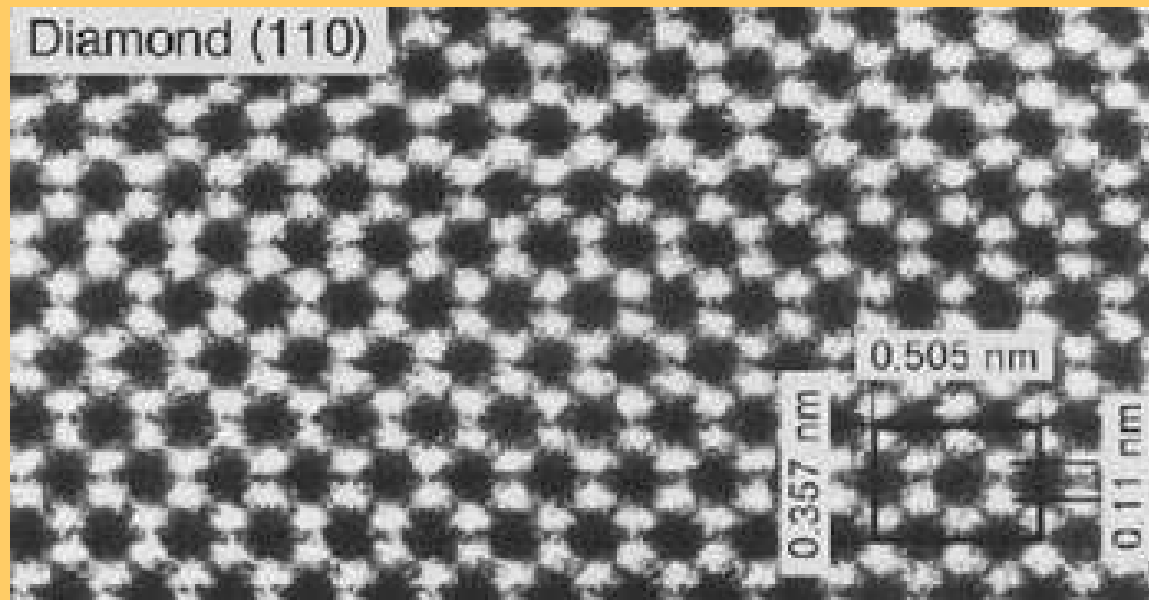
Atomy

- Velikost: hrana krystalu mědi o délce 1 mm obsahuje 4 miliony atomů.
- Na obrázku: povrch křemíku (**úsečka** představuje velikost 1 nm)

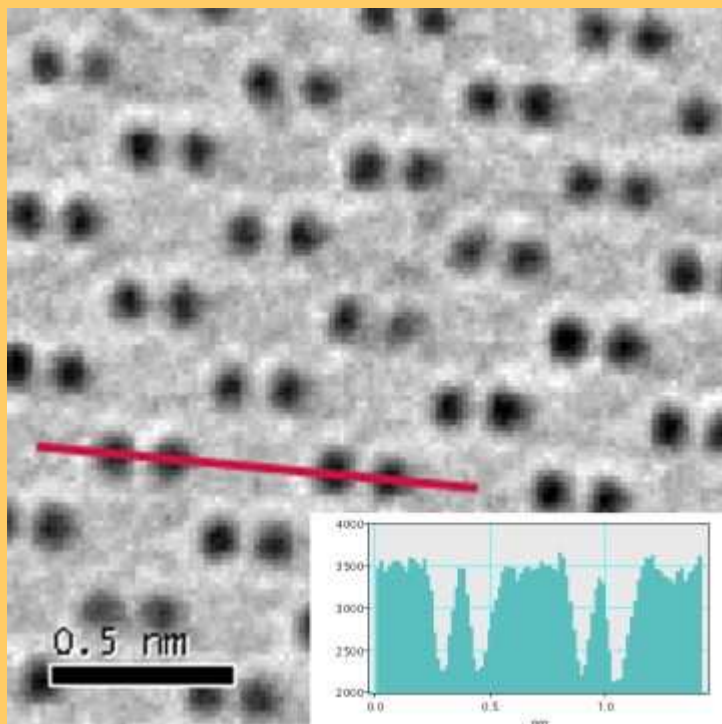


Atomy

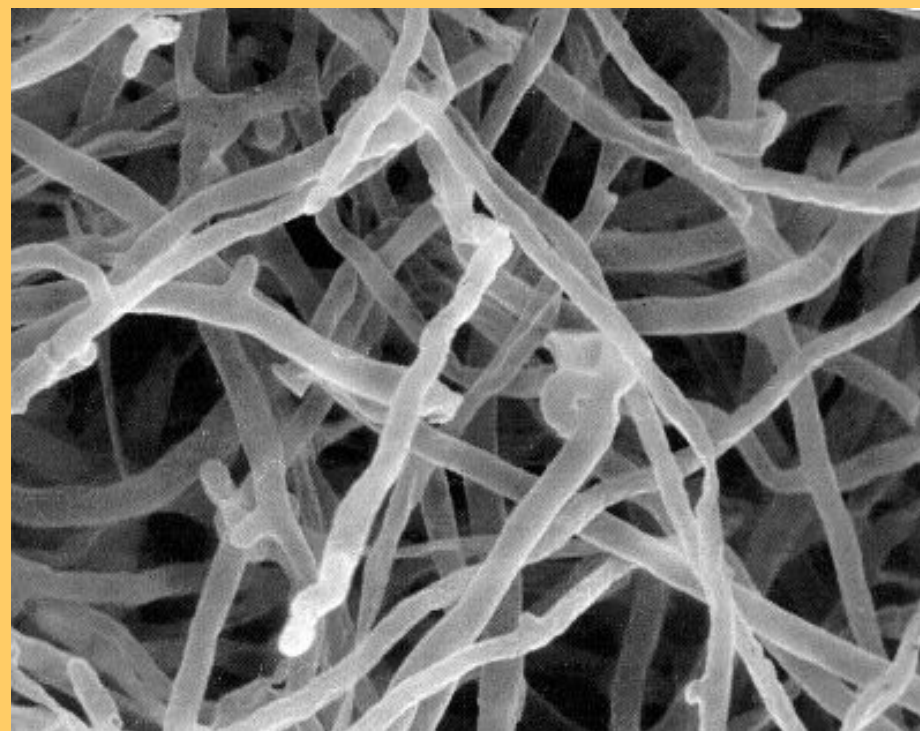
- Nejmenší hmotnost má atom vodíku ($1,67 \cdot 10^{-27}$)
- Relativní atomová hmotnost: základem je 1/12 hmotnosti isotopu $^{12}_6\text{C}$



Ještě elektronová mikroskopie



atomy germania



hyfy (vlákna) hlívy ústříčné

Ještě elektronová mikroskopie



Atomy

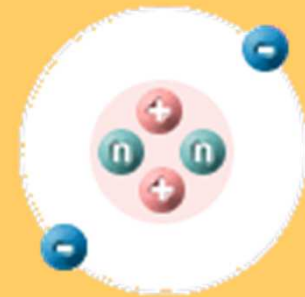
- 1 mol kteréhokoliv prvku obsahuje vždy stejný počet atomů $N_A = 6,023 \cdot 10^{23}$ Avogadrova konstanta
- 1 mol plynu má objem 22,4 l (molární objem)



Lorenzo Romano Amedeo Carlo Avogadro di Quaregna e Cerreto (1776-1856)

Atomy: atomové jádro

- Atom je elektroneutrální částice (jádro + elektronový obal)
- Jádro je složeno z protonů a neutronů
- Hmotnostní číslo udává počet protonů a neutronů v jádře, např. ^{23}Na
- Počet protonů je shodný s pořadovým číslem prvku v periodické tabulce, např. $_{11}\text{Na}$



Atomy: periodická tabulka prvků

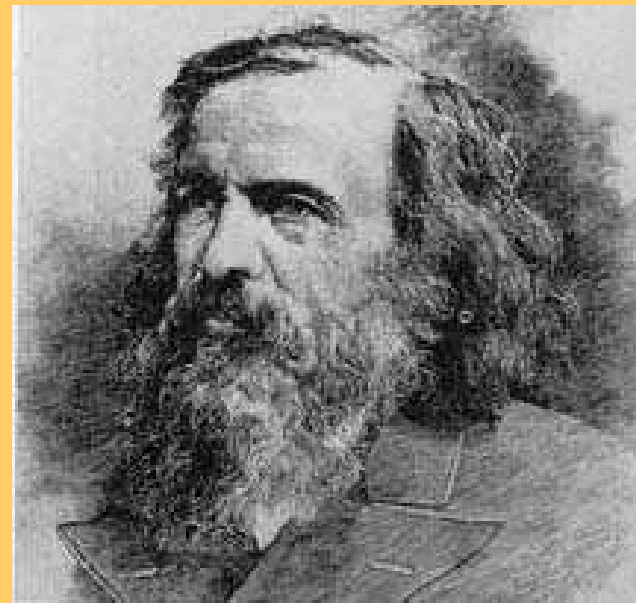
- 1829 J. W. Döbereiner: „Pokus seskupit elementární látky podle jejich podoby“ – triády (např. Li, Na, K, nebo S, Se, Te, nebo Cl, Br, I)
- 1850 M. von Pettenkofer zjistil, že ve skupinách může být více látek než tři
- 1863-1866 J. A. R. Newlands: zákon oktáv (vlastnosti prvků se opakují po každém osmém)

Atomy: periodická tabulka prvků

- 1. Kongres chemiků v Karlsruhe (1860):
„... je třeba odstranit chaos v oboru atomových vah“
- D. I. Mendělejev seřadil prvky podle atomových hmotností do period tak, aby v řádkách byly prvky podobných vlastností (nyní se píší do sloupců pod sebe).

Atomy: periodická tabulka prvků

- „věštecký sen“ 17. února 1869
- 6. března 1869 byl čten na zasedání Ruské chemické společnosti rukopis Mendělejevovy práce zabývající se „vztahem mezi vlastnostmi a atomovou vahou prvků“
- 1870 vychází tiskem práce „Přirozená soustava prvků a její použití k udání vlastností dosud neobjevených prvků“



(1834-1907)

ОПЫТЪ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВЪ.

ОСНОВАННОЙ НА ВѢСЪ АТОМНОГО ВѢСЪ И ХИМИЧЕСКОМУ СХОДСТВУ.

H = 1	Ti = 50	Zr = 90	? = 180.
Be = 9,4	V = 51	Nb = 94	Ta = 182.
B = 11	Cr = 52	Mo = 96	W = 186.
C = 12	Mn = 55	Rh = 104,4	Pt = 197,4.
N = 14	Fe = 56	Ru = 104,4	Ir = 198.
O = 16	Ni = 59	Pd = 106,8	Os = 199.
F = 19	Cu = 63,4	Ag = 108	Hg = 200.
Li = 7	Zn = 65,2	Cd = 112	
Na = 23	Al = 27,1	Ur = 116	Au = 197?
	Si = 28	? = 70	Sn = 118
	P = 31	As = 75	Sb = 122
	S = 32	Se = 79,4	Te = 128?
	Cl = 35,5	Br = 80	I = 127
	K = 39	Rb = 85,4	Cs = 133
	Ca = 40	Sr = 87,6	Ba = 137
	? = 45	Ce = 92	Pb = 207.
	?Er = 56	La = 94	
	?Yt = 60	Di = 95	
	?In = 75,6	Th = 118?	

Д. Менделѣевъ

Atomy: periodická tabulka prvků

- „Neobjevené prvky“ objeveny vzápětí:
- 1875 P.E. Lecocq de Boisbaudran objevil **gallium** (eka-aluminium)
- 1879 L.F. Nilson objevil **skandium** (eka-bor)
- 1886 C.A. Winkler objevil **germanium** (eka-silicium)
- 1894-1898 W. Ramsay objevil **vzácné plyny**

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
I A	II A	III B	IV B	V B	VI B	VII B	VIII	VIII	VIII	I B	II B	III A	IV A	V A	VI A	VII A	0	
Vodík 1 H 1,00784(7)																	Helium 2 He 4,002602(2)	
Lithium 3 Li 6,94(2)	Beryllium 4 Be 9,012182(3)																	Neon 10 Ne 20,1797(6)
Sodík 11 Na 22,989770(2)	Hořčík 12 Mg 24,305(6)																	Argon 18 Ar 39,948(1)
Draslík 19 K 39,0983(1)	Vápník 20 Ca 40,078(4)	Skandium 21 Sc 44,955910(8)	Titan 22 Ti 47,867(1)	Vanad 23 V 50,9415(1)	Chrom 24 Cr 51,9961(6)	Mangan 25 Mn 54,938045(9)	Železo 26 Fe 55,845(2)	Kobalt 27 Co 58,933200(9)	Nikl 28 Ni 58,6934(2)	Měď 29 Cu 63,546(3)	Cín 30 Zn 65,38(2)	Bor 5 B 10,811(7)	Uhlík 6 C 12,0107(8)	Dusík 7 N 14,0064(7)	Kyslík 8 O 15,9994(3)	Fluor 9 F 18,9984032(6)	Neon 10 Ne 20,1797(6)	
Rubidium 37 Rb 85,4678(3)	Stroncium 38 Sr 87,62(1)	Yttrium 39 Y 88,90584(2)	Zirkonium 40 Zr 91,224(2)	Niob 41 Nb 92,90638(2)	Molibden 42 Mo 95,94(1)	Techneclium 43 Tc (98,9063)	Ruthenium 44 Ru 101,07(2)	Rhodium 45 Rh 102,90550(2)	Palladium 46 Pd 106,42(1)	Síř 32 S 32,06(6)	Kadmium 48 Cd 112,411(8)	Indium 49 In 114,818(3)	Cin 50 Sn 118,710(7)	Antimon 51 Sb 121,760(1)	Tellur 52 Te 127,60(3)	Jod 53 I 126,90447(3)	Xenon 54 Xe 131,29(2)	
Cesium 55 Cs 132,90545(2)	Baryum 56 Ba 137,327(7)	Lanthanoidy 57-70 Lan noidy	Hafnium 72 Hf 178,49(2)	Tantal 73 Ta 180,9479(1)	Wolfram 74 W 183,84(1)	Rhenium 75 Re 186,207(1)	Osmium 76 Os 190,23(3)	Iridium 77 Ir 192,217(3)	Ptina 78 Pt 195,078(2)	Zlato 79 Au 196,96656(2)	Řeť 80 Hg 200,59(2)	Thallium 81 Tl 204,3833(2)	Olovo 82 Pb 207,2(1)	Biřmut 83 Bi 208,98038(2)	Polonium 84 Po (209,9824)	Ařet 85 At (209,9871)	Radon 86 Rn (222,0176)	
Francium 87 Fr (223,0187)	Radium 88 Ra (226,0254)	Aktinoidy 89-102 Akt noidy	Rutherfordium 104 Rf (261,110)	Dubnium 105 Db (262,1144)	Seaborgium 106 Sg (263,1186)	Bohrrium 107 Bh (264,12)	Hassium 108 Hs (265,1306)	Meitnerium 109 Mt (266)	Ununillium 110 Uun (266)	Ununilium 111 Uuu (272)	Ununbium 112 Uub (277)	Thallium 81 Tl 204,3833(2)	Olovo 82 Pb 207,2(1)	Biřmut 83 Bi 208,98038(2)	Polonium 84 Po (209,9824)	Ařet 85 At (209,9871)	Radon 86 Rn (222,0176)	

nekovy

alkalické kovy

alkalické zemní kovy

vzácné plyny

halogeny

metalloidy

přechodné kovy

jiné kovy

vzácné zemní prvky

název prvku

protonové číslo

značka prvku

relativní atomová hmotnost

Kyslík

8

O

15,9994(3)

- nekovy
- alkalické kovy
- alkalické zemní kovy
- vzácné plyny
- halogeny
- metalloidy
- přechodné kovy
- jiné kovy
- vzácné zemní prvky



Lanthan 57 La 138,9055(2)	Cer 58 Ce 140,116(1)	Praseodym 59 Pr 140,90766(2)	Neodym 60 Nd 144,24(3)	Promethium 61 Pm (144,9127)	Samarium 62 Sm 150,36(3)	Europium 63 Eu 151,964(1)	Gadolinium 64 Gd 157,25(3)	Terbium 65 Tb 158,92534(2)	Dysprosium 66 Dy 162,50(3)	Ytterbium 70 Yb 173,04(3)	Lutecium 71 Lu 174,967(1)
Actinium 89 Ac (227,0277)	Thorium 90 Th 232,0381(1)	Protaktinium 91 Pa 231,03688(2)	Uran 92 U 238,02891(1)	Neptunium 93 Np (237,0482)	Plutonium 94 Pu (244,0642)	Amercium 95 Am (243,0614)	Curium 96 Cm (247,0703)	Berkelium 97 Bk (247,0703)	Kalifornium 98 Cf (251,0786)	Nobelium 102 No (259,1011)	Lawrencium 103 Lr (262,110)

Lanthanoidy:

Aktinoidy:

Atomy: atomové jádro, isotopy

- Některé prvky mají více druhů atomů (mají stejné protonové číslo, ale různé hmotnostní, tj. mohou mít různý počet neutronů)
- Z řečtiny *isos topos* = stejné místo (v tabulce)
- ^{16}O , ^{17}O , ^{18}O , ^{14}N , ^{15}N , atd.

Radioaktivita

- Atomy některých prvků nejsou stálé, vyzařují ze svého jádra částice a tím se přeměňují v atomy jiných prvků

Empirická pravidla:

- lehké prvky jsou stabilní při poměru p/n 1:1
- těžší prvky jsou stabilní při poměru p/n 2:3

Radioaktivita

- Při přeměnách jader dochází k vyzařování tří hlavních druhů záření:

Označení	hmotnost (p)	náboj
----------	--------------	-------

- | | | |
|--------------------------|--------|----|
| • α - jádra helia | 4 | +2 |
| • β - elektrony | 1/1836 | -1 |
| • γ - záření | 0 | 0 |

Radioaktivita

- Druh záření a bezpečnost práce:

Označení

ochrana

- | | |
|--------------------------|-------------------------|
| • α - jádra helia | 2 cm vzduchu, mikrotén |
| • β - elektrony | 5 mm plexisklo |
| • γ - záření* | olověné cihly, Ba/beton |

*(vždy záleží na energii)

Radioaktivita

N ... počet dosud nerozpadlých jader

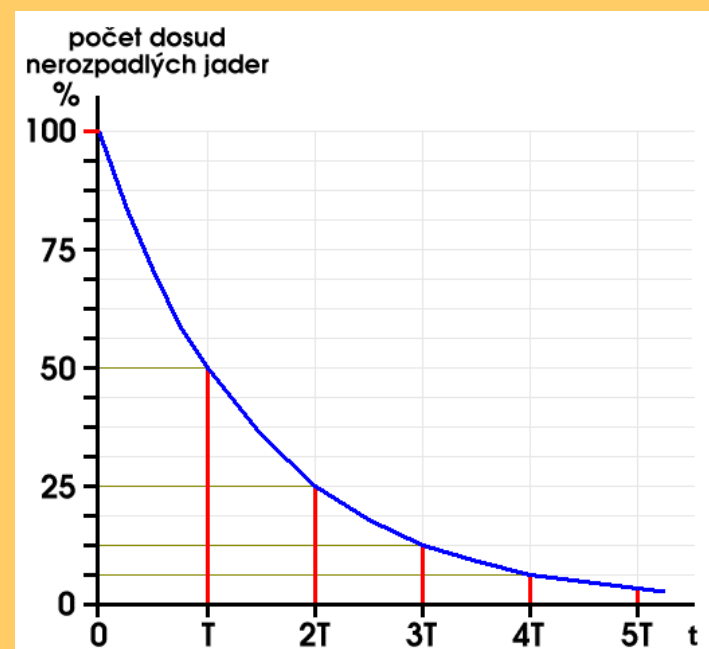
N₀ ... počet původních nerozpadlých jader

t ... čas

T ... poločas rozpadu

$$N = N_0 \cdot 2^{-t/T}$$

- Aktivita vzorku je dána rychlostí, s níž se jeho atomy přeměňují (aktivita klesá exponenciálně s časem).
- Poločas rozpadu je doba, za kterou se přemění polovina všech na počátku přítomných radioaktivních atomů.



http://www.walter-fendt.de/ph14cz/lawdecay_cz.htm

Radioaktivita – fyzikální jednotky

- **Becquerel** (zkratka Bq) je jednotka radioaktivity, definovaná jako aktivita množství radioaktivního materiálu ve kterém se jedno jádro rozkládá za sekundu (rozměr je s^{-1}).
- Starší jednotka radioaktivity byla **Curie** (Ci).
 $1 \text{ Bq} = 2.7 \times 10^{-11} \text{ Ci}$.



Radioaktivita

- Příklady poločasů rozpadu:

• ^{14}C	5730 let	beta
• ^{60}Co	5,26 let	beta, gama
• ^{40}K	$1,26 \cdot 10^9$ let	beta
• ^{238}U	$4,51 \cdot 10^9$ roků	rozpadové řady
• ^{18}F	110 min	(gama, detekce nádorů)
• ^{99}Tc	6 hodin	(gama, scintigrafie ledvin, jater, plic, srdce, mozku a dalších orgánů, jakož i v nádorové diagnostice)

Radioaktivita

Zákon rozpadu (přeměny):

$$N_{(t)} = N_{(0)} \cdot 2^{-t/T}$$

N = počet částic

t = aktuální čas

T = poločas rozpadu

Radioaktivita

- Nejběžnější isotopy v biologické laboratoři:

• ^{14}C	5730 let	beta
• ^3H	12,26 let	beta
• ^{32}P	14,3 dne	beta
• ^{35}S	87,1 dne	beta
• ^{131}I	8,14 dne	beta, gama

the 1990s, the number of people in the UK who are employed in the public sector has increased by 1.5 million (1990–1999) and the number of people in the public sector has increased by 2.5 million (1990–1999) (Department of Health 2000).

There is a growing emphasis on the need to improve the efficiency of the public sector. The Department of Health (2000) has set out a number of targets for the public sector, including a 10% reduction in the number of people employed in the public sector by 2005. This has led to a number of initiatives to improve the efficiency of the public sector, including the introduction of the 'New Deal' for the public sector (Department of Health 2000).

The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

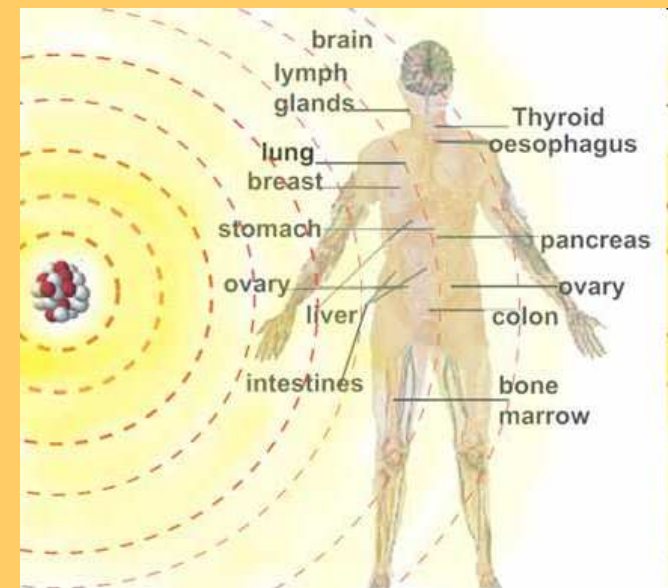
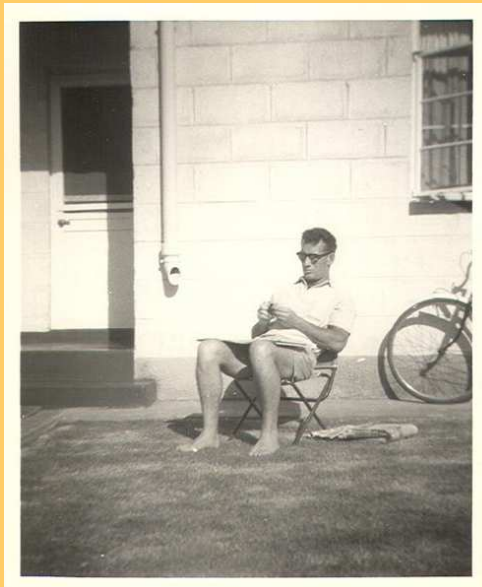
The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector. It includes a number of measures, such as the introduction of performance-related pay, the introduction of a 'New Deal' for the public sector, and the introduction of a 'New Deal' for the public sector. The 'New Deal' for the public sector is a set of initiatives designed to improve the efficiency of the public sector.

Radioaktivita – jednotky biologického účinku

- **Absorbovaná dávka** (zkráceně jen "dávka") D je energie ionizujícího záření absorbovaná v daném místě ozařované látky na jednotku hmotnosti.
- Jednotkou absorbované dávky je 1 J / kg , která se nazývá 1 **Gray** (dílčí jednotky pak $1 \text{ mGy} = 10^{-3} \text{ Gy}$ a $1 \mu\text{Gy} = 10^{-6} \text{ Gy}$).

Louis Harold Gray,
britský lékař - radiolog
10.11.1905 – 9.7.1965



Radioaktivita – jednotky biologického účinku

- **Dávkový ekvivalent** (ekvivalentní dávka) v uvažované tkáni je dána součinem absorbované dávky D v daném místě a jakostního faktoru Q :
 $H = Q \cdot D$
- Jednotkou dávkového ekvivalentu je 1 **Sievert** [Sv]. Dávka **1 Sv jakéhokoli záření** má stejné biologické účinky jako dávka **1 Gy rentgenového nebo gama záření** (pro které je jakostní faktor stanoven 1).



Kiev / Černobyl 2013



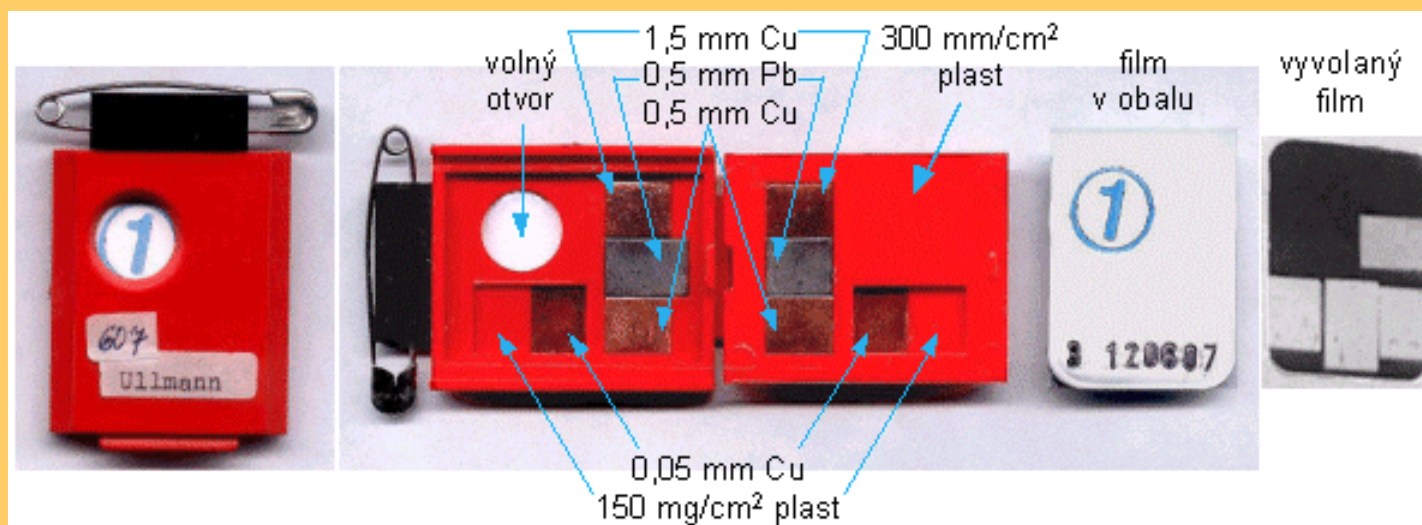
Kiev / Černobyl 2013



Kiev / Černobyl 2013

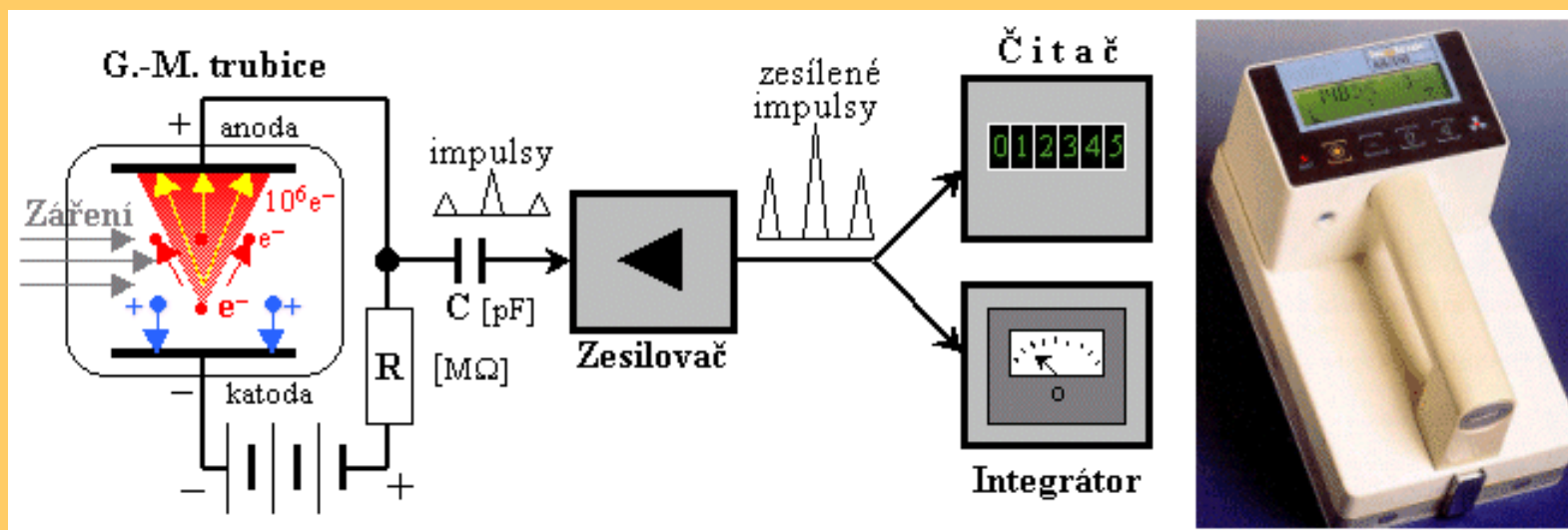


Radioaktivita – dozimetry



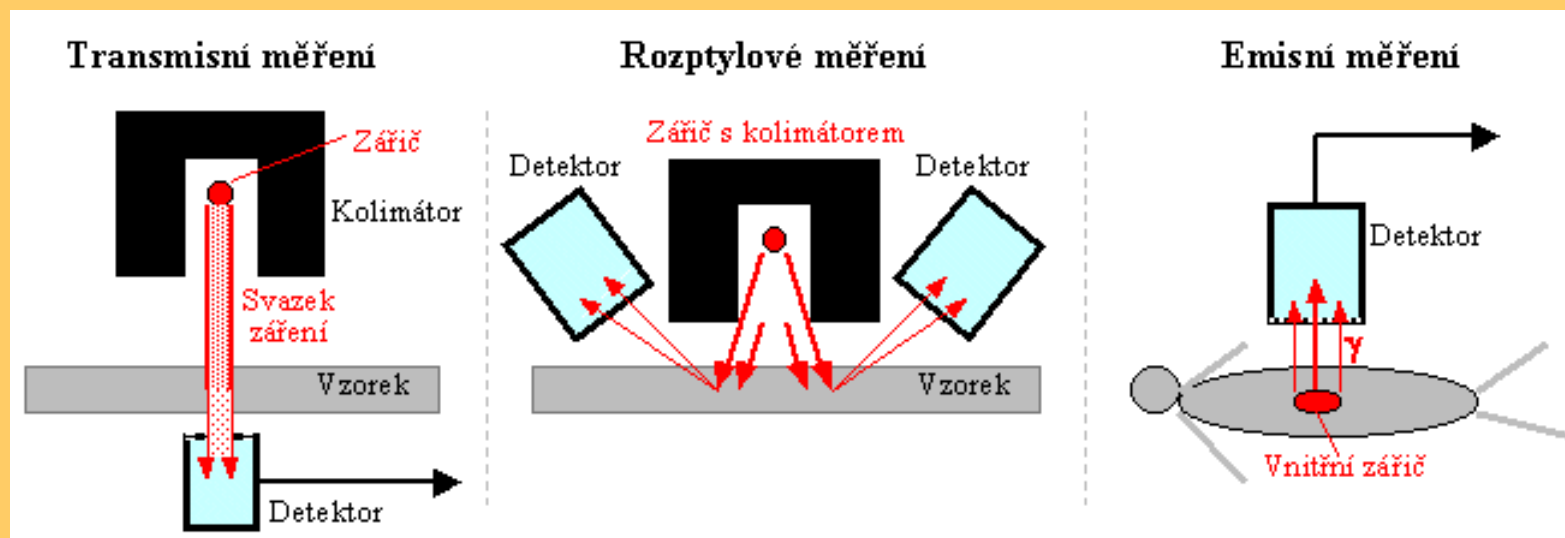
Osobní dozimetry, založené na expozici filmu

Radioaktivita – dozimetry



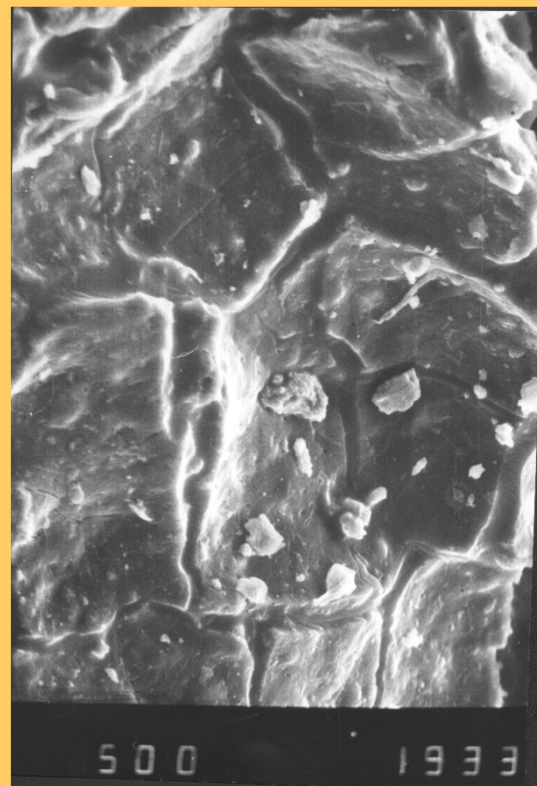
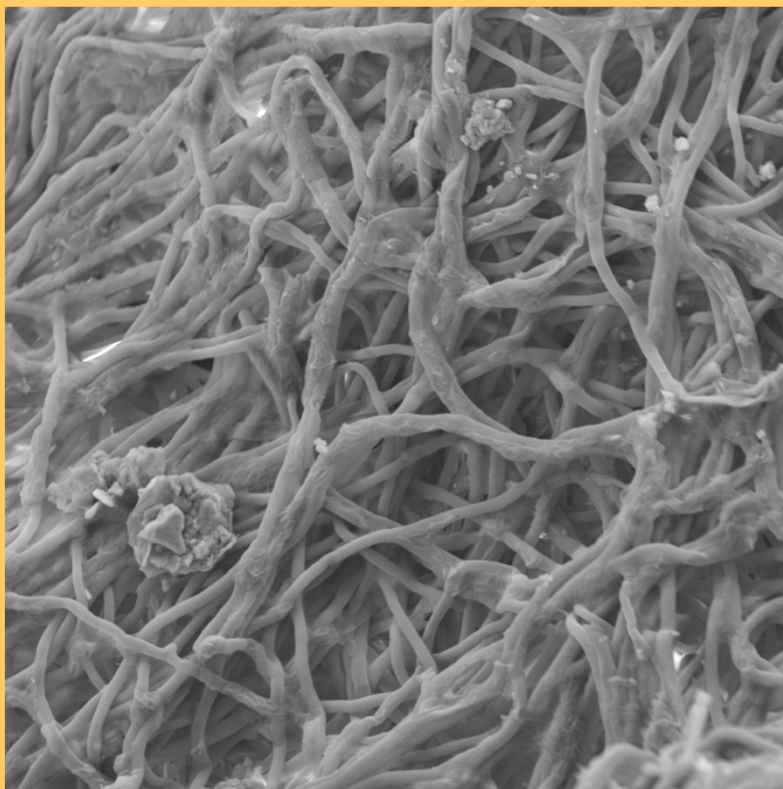
Geiger-Müllerovy dozimetry, založené na ionizaci plynu

Radioaktivita – aplikace v biologii



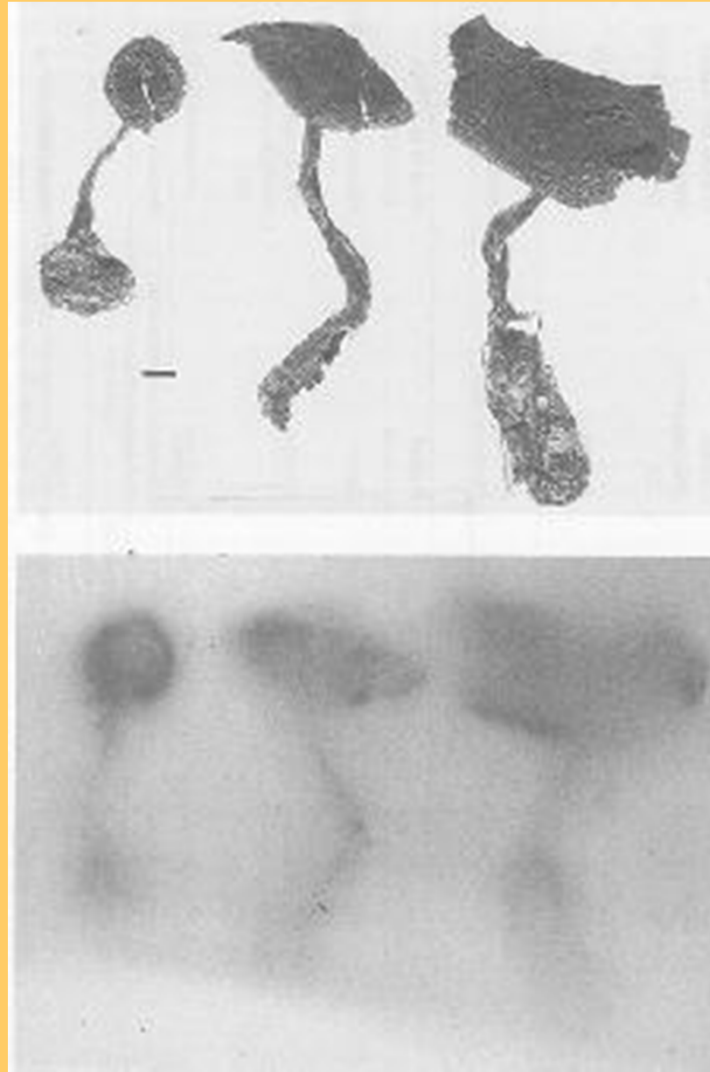
Detekce značených molekul (emisní měření)
Sterilizace materiálu (kobalt)

Biologická vsuvka: bioakumulace prvků (isotopů) v přírodě



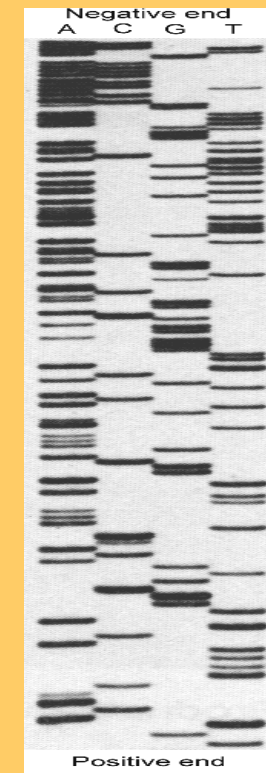
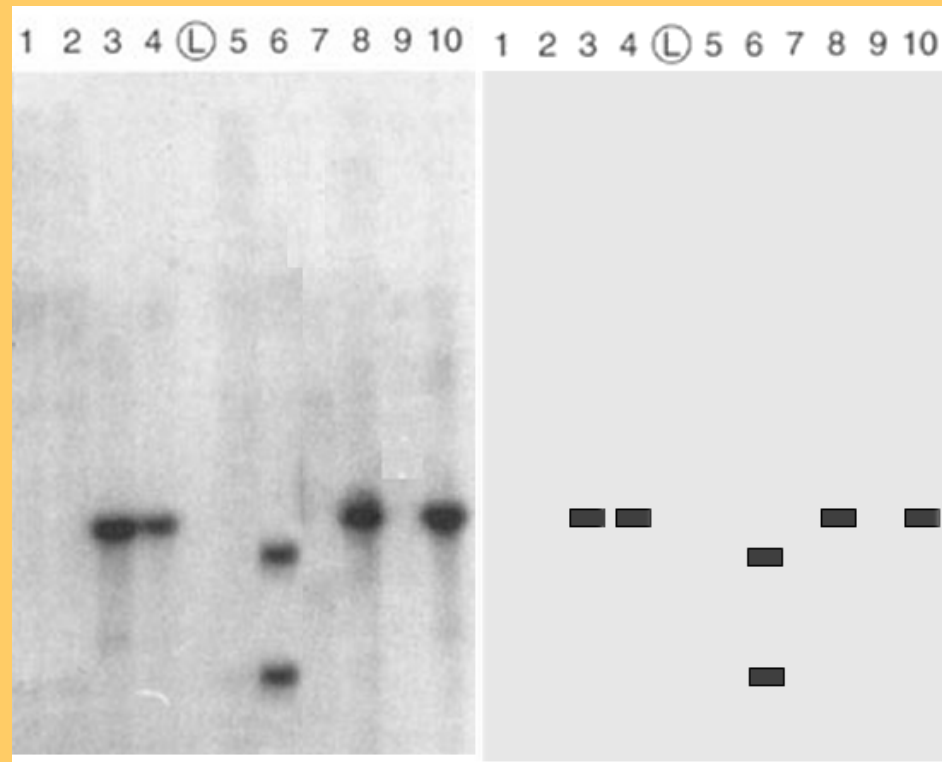
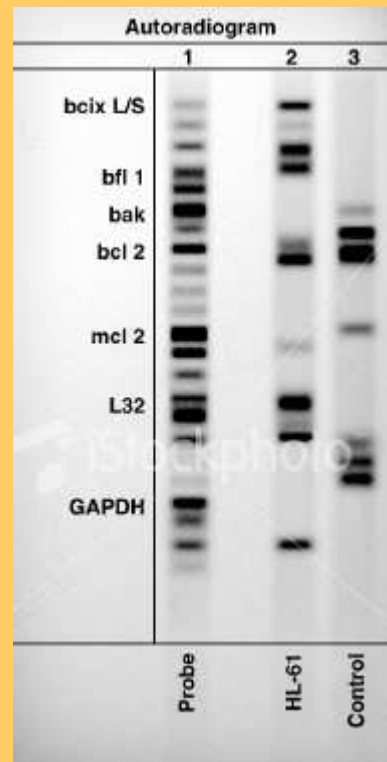
Povrch plodnice houby klanolístky obecné (vlevo) a troudňatce pásovaného (vpravo) s částicemi atmosférické depozice.

Biologická vsuvka: bioakumulace prvků (isotopů) v přírodě



Plodnice pavučince (*Cortinarius* sp.), sbírané ve Finsku r. 1987 (rok po Černobylské havárii).
Fotografie zobrazují plodnice hub – nahoře a jejich autoradiogramy – dole).

Biologická vsuvka: autoradiogramy v elektroforéze



Radioaktivita – předpisy pro praxi

Státní úřad pro jadernou bezpečnost v Praze (SÚJB)

- S radioaktivním materiálem mohou pracovat pouze odborně proškolené osoby
- Práci řídí osoby s atestem SÚJB
- Evidence pohybu radioizotopů (příjem – užití – odpad)
- Evidence pravidelného proměřování pracoviště
- Evidence pracovníků a jejich zdravotních prohlídek

Atomy: elektronový obal

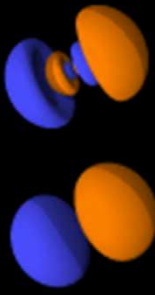
- Elektron má hmotnost 1836x menší než proton
- V obalu atomu může existovat jen v určitých oblastech (orbitech)
- V jednom orbitu může být 1, max. 2 elektrony, lišící se spinem
- **Podle tvaru se atomové orbity označují s (koule, 2e), p (činky, 6e), d (čtyřlístek, 10e), f (komplexní, 14e)**
- Orbity tvoří vrstvy, neboli sféry (K L M N O P)
- Počet vrstev v elektronovém obalu se shoduje s číslem periody v periodické tabulce

Typy orbitalů :

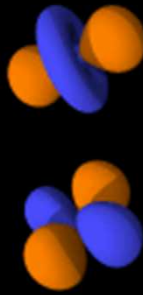
s



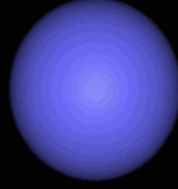
p



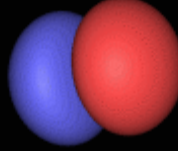
d



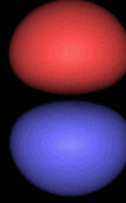
f



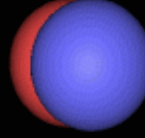
s



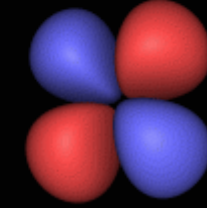
p_y



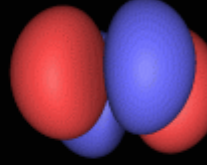
p_x



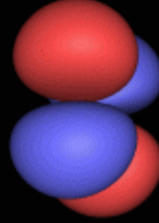
p_z



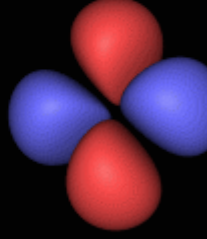
d_{xy}



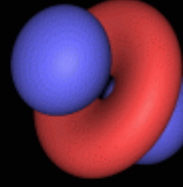
d_{xz}



d_{yz}



$d_{x^2-y^2}$



d_{z^2}

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

- Proč mají orbity zrovna tvary koule, činky...?
- Po krátkém připomenutí základních vztahů z fyziky (energie a hybnost) se lehce dopravujeme k „vlnové funkci systému“ a ke „zlatému hřebu“ aplikace kvantové mechaniky v chemii:

Schrödingerově rovnici

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

- Proč „vlnová“ mechanika?

De Broglie (1924) zjistil, že paprsek elektronů se na mřížce ohýbá, tj. má nejen vlastnosti hmotných částic, ale i záření („vln“).

Dosud platilo: p (hybnost částice) = $m \cdot v$

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

- De Broglie odvodil, že pro hybnost elektronového paprsku platí vztah:

$$p = h / \lambda$$

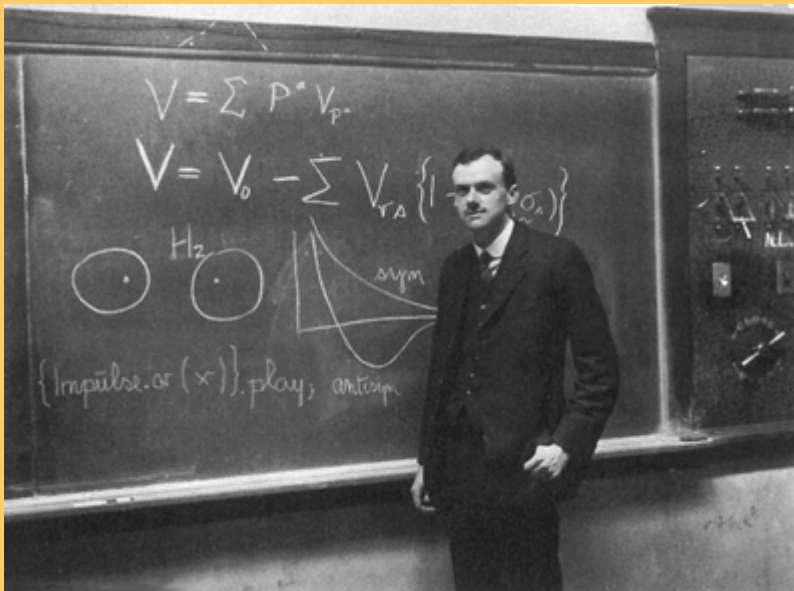
kde λ je vlnová délka ($1/\lambda = \nu$, vlnočet)
 h je tzv. Planckova konstanta



Luis de Broglie

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

$$\hbar = h / 2\pi \quad \dots 1.024 \cdot 10^{-34} \text{ J.s (zavedl P. Dirac)}$$



Paul Adrien Maurice Dirac
(8. srpna 1902 – 20. října 1984)
byl britský teoretický fyzik,
který se zabýval kvantovou
teorií, obecnou teorií relativity
a kosmologií. Za svoji základní
práci v kvantové fyzice získal
v roce 1933 společně s Erwinem
Schrödingerem Nobelovu cenu.

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

- Základní myšlenka vlnové mechaniky:
- U malých těles (e) nelze říci, kde se nalézá a zároveň, kterým směrem se bude v daném okamžiku pohybovat:
- 1927 Heisenbergův princip neurčitosti:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \approx \hbar$$

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

- Základní myšlenka vlnové mechaniky:
- Můžeme pouze určit relativní pravděpodobnost P , že v určitém čase bude částice (e) v daném místě a bude mít danou hybnost

$$P = \Psi \cdot \Psi^*$$

Kde Ψ je „vlnová funkce“ a
 Ψ^* je funkce komplexně sdružená

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

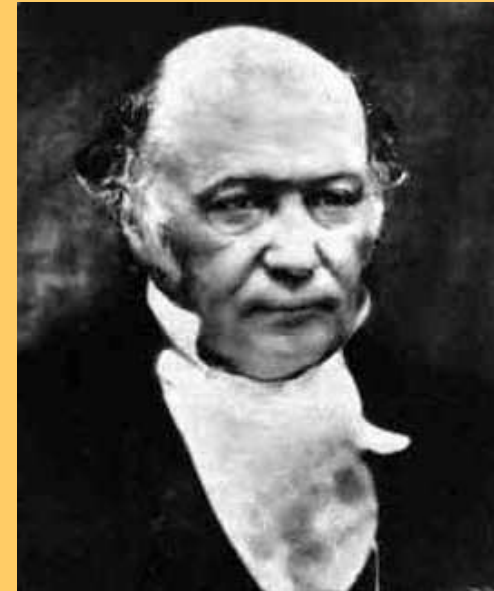
Schrödingerova rovnice:

Určitý způsob vyjádření
celkové energie systému = číselná hodnota energie

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

v klasické mechanice:

$H = T + V$ (součet kinetické a potenciální energie)



Sir William Rowan Hamilton

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

v klasické mechanice:

$$H = T + V \text{ (součet kinetické a potenciální energie)}$$

$$T = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m} \text{ (po dosazení vzorečku pro hybnost)}$$

$$V = - \frac{e^2}{r} \text{ (uvažuje se pouze elektrostatická interakce)}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

„vlnová funkce“ klasické mechaniky („Hamiltonián“)

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

Limitní přechod a hybnost:

klasická mechanika $\leftrightarrow$ vlnová mechanika

hybnost p nahradíme operátorem hybnosti

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla$$

kde „nabla“ $\nabla = (\partial/\partial x + \partial/\partial y + \partial/\partial z)$

je operátor derivace funkce podle souřadnic

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky

Po dosazení dostaneme pro vodíkový atom
Schrödingerovu rovnici ve tvaru:

$$[(-\hbar^2/2m) \Delta - e^2/r] \Psi = E \Psi$$

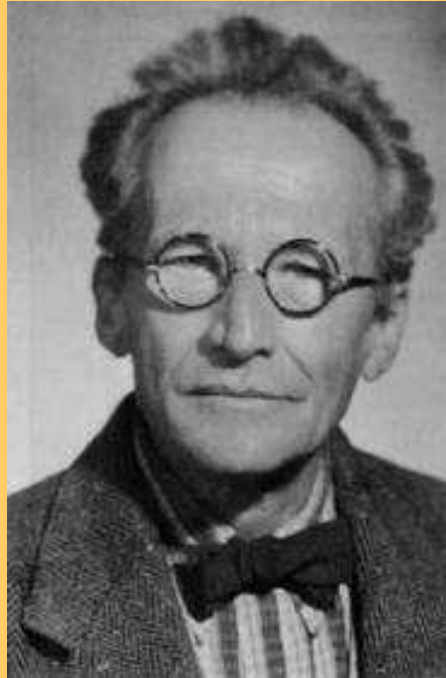
kde „lapla“ $\Delta = (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2)$
je operátor druhé derivace funkce podle souřadnic
(Laplaceův operátor)

Řešení této rovnice dává matematické funkce,
popisující tvary atomových orbitů

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky
otcové zakladatelé:



Werner Karl Heisenberg
(1901-1976)



Erwin Schrödinger
(1887-1961)



Max Planck
(1858-1947)

Malá vsuvka z kvantové (vlnové) mechaniky otcové (matky) zakladatelé(-ky):



Emma Noetherová
(1882-1935)

Z invariance (neměnnosti) přírodních dějů vůči
libovolnému
posunutí:

V prostoru $\Rightarrow$ zákon zachování hybnosti

V čase $\Rightarrow$ zákon zachování energie

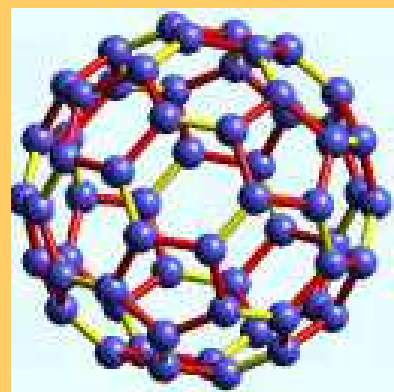
pootočení

V prostoru $\Rightarrow$ zákon zachování momentu
hybnosti

„Je-li daný fyzikální systém symetrický vzhledem k nějaké
Lieově grupě o n spojitých parametrech, pak tento systém
vykazuje zachování n nezávislých fyzikálních veličin“

Molekuly

- Molekula je skupina atomů schopných samostatné existence
- 1 atom (He, kovy)
- 2 atomy (N_2)
- 3 atomy (O_3)
- více atomů (P_4 , S_8 , Fe_{60})
- Molekulová hmotnost je součet atomových hmotností



Chemická vazba - iontová

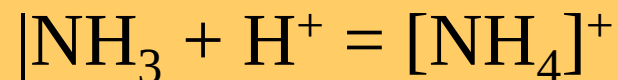
- Prakticky se rozeznávají vazba iontová, kovalentní, koordinačně-kovalentní a kovová
- Ionty: vznikají z atomů odštěpením e (kation, Na^+), nebo přijetím e (anion, Cl^-)
- Oba prvky si ve sloučenině vzniklé iontovou vazbou upravují své elektronové obaly na konfiguraci podobnou inertním plynům

Chemická vazba - kovalentní

- Některé dvojice atomů mohou elektrony sdílet, čímž dojde také k úpravě obalu na konfiguraci podobnou inertním plynům
- $\text{H}:\text{H}$ ($\text{H}-\text{H}$), $\text{<O}=\text{C}=\text{O>}$, $|\text{N}\equiv\text{N}|$
- Do dvojných či trojných vazeb vstupují dva druhy elektronů: σ a π

Chemická vazba – koordinačně-kovalentní

- Elektronová dvojice (nutná pro kovalentní vazbu) může být poskytnuta pouze jedním atomem:



- Též např. voda může poskytnout volný elektronový pár:

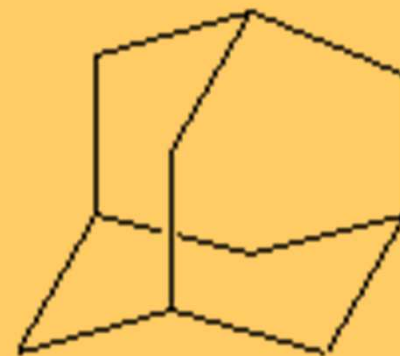
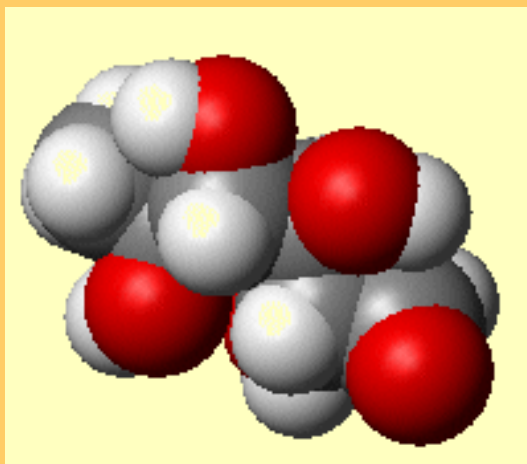


Chemická vazba – vazba kovová, vazba polární

- Kovy snadno uvolňují elektrony, které zůstávají volně pohyblivé (vodivost elektriny)
- Polární vazba představuje přechod mezi vazbou iontovou a kovalentní

(Elektrony nejsou v molekule rozmístěny tak jednoduše, jak naznačují valenční čárky, nýbrž pravděpodobnostně podle pravidel vlnové mechaniky)

Chemická vazba – modely, vzorce



O sloučeninách a jejich vlastnostech více příště...

Tento materiál je určen pouze pro výuku studentů.

This presentation has been scheduled for educational purposes only.

Pokud má někdo dojem, že použité obrázky (jiné než moje vlastní) jsou kryty copyrightem, necht' mi dá vědět.

If somebody believes, that pictures or figures in this presentation are covered by copyright, please let me know.

Jiří Gabriel (gabriel@biomed.cas.cz)