# Poznámky k seminářům z obecné chemie

Zdeněk Moravec, hugo@chemi.muni.cz

9. prosince 2024

# Obsah

1	$\operatorname{Ter}$	modynamika	3
	1.1	Zákony termodynamiky	3
	1.2	Termochemie	4
	1.3	Hessův zákon	5
<b>2</b>	pН		6
	2.1	Vzorce	6
	2.2	Iontový součin vody	6
	2.3	Silné kyseliny a zásady	7
	2.4	Slabé kyseliny a zásady	8
	2.5	Soli	8
		2.5.1 Sůl silné kyseliny a silné zásady	8
	2.6	Pufry	8
3	Krv	rstaly	9

## 1 Termodynamika

### 1.1 Zákony termodynamiky

**Termodynamika** je obor fyziky, který se zabývá procesy a vlastnostmi látek a polí spojených s teplem a tepelnými jevy; je součástí termiky. Vychází přitom z obecných principů přeměny energie, které jsou popsány čtyřmi termodynamickými zákony (z historických důvodů číslovány nultý až třetí):

### Nultý zákon TD

Jsou-li dvě a více těles v termodynamické rovnováze s tělesem dalším, pak jsou všechna tato tělesa v rovnováze.

#### První zákon TD

Celkové množství energie (všech druhů) izolované soustavy zůstává zachováno.

Nelze sestrojit stroj, který by trvale dodával mechanickou energii, aniž by spotřeboval odpovídající množství energie jiného druhu.

### Druhý zákon TD

Teplo nemůže při styku dvou těles různých teplot samovolně přecházet z tělesa chladnějšího na těleso teplejší.

Nelze sestrojit periodicky pracující tepelný stroj, který by trvale konal práci pouze tím, že by ochlazoval jedno těleso, a k žádné další změně v okolí by nedocházelo.

#### Třetí zákon TD

Při absolutní nulové teplotě je entropie čisté látky pevného nebo kapalného skupenství rovna nule.

### 1.2 Termochemie

Vypočítejte reakční entalpii přeměny grafitu na diamant:

$$C(gr) \longrightarrow C(diam)$$

jestliže znáte entalpie reakcí:

A: 
$$C(gr) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g)$$
  $-393,77 \text{ kJ.mol}^{-1}$   
B:  $C(diam) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g)$   $-395,65 \text{ kJ.mol}^{-1}$ 

Jelikož nás zajímá přeměna grafitu na diamant, vezmeme entalpii spalování grafitu a od ní odečteme entalpii spalování diamantu:  $\mathbf{A} - \mathbf{B}$ 

$$C(gr) + O_2(g) + CO_2(g) \longrightarrow C(diam) + O_2(g) + CO_2(g)$$

Entalpii tedy vypočítáme:

$$\Delta H_r \ = \ -393,77 \ - (-395,65) \ = \ 1,88 \ \mathrm{kJ.mol^{-1}}$$

Entalpie přeměny grafitu na diamant bude 1,88 kJ.mol<sup>-1</sup>

Vypočítejte entalpii spalování acetylenu:

$$C_2H_2(g) + \frac{5}{2}O_2(g) \longrightarrow 2CO_2(g) + H_2O(l)$$
 jestliže znáte entalpie reakcí:

$$\begin{array}{lll} A\colon & 2\,C(s) + H_2(g) \longrightarrow C_2H_2(g) & 226,92 \text{ kJ.mol}^{-1} \\ B\colon & 2\,C(s) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) & -393,97 \text{ kJ.mol}^{-1} \\ C\colon & H_2(g) + \frac{1}{2}\,O_2(g) \longrightarrow H_2O(l) & -285,96 \text{ kJ.mol}^{-1} \end{array}$$

Zadanou rovnici získáme následující kombinací známých reakcí:  $-\mathrm{A}{+}2\mathrm{B}{+}\mathrm{C}$ 

Entalpii tedy vypočítáme:

$$\Delta H_r = -226,92-2.393,7-285,96=-1300,82~{\rm kJ.mol^{-1}}$$
 Entalpie zadané reakce bude $-1300,82~{\rm kJ.mol^{-1}}$ 

# 1.3 Hessův zákon

# 2 pH

### 2.1 Vzorce

Silná kyselina 
$$pH = -\log c$$

Silná zásada 
$$pH = 14 + \log c$$

Slabá kyselina 
$$pH = \frac{1}{2}pK_A - \frac{1}{2}\log c$$

Slabá zásada 
$$\mathrm{pH} = 14 \; + \; \tfrac{1}{2} \log \mathrm{c} - \tfrac{1}{2} \mathrm{p} K_B$$

Sůl slabé k a silné z     pH = 7  +  
$$\frac{1}{2}\log c + \frac{1}{2}pK_A$$

Sůl silné k a slabé z     pH = 7          
$$\frac{1}{2} \log c - \frac{1}{2} pK_B$$

Sůl slabé k a slabé z   pH = 7  +  
$$\frac{1}{2}$$
p $K_A - \frac{1}{2}$ p $K_B$ 

Pufr – kyselina 
$$pH = pK_A + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$$

Pufr – zásada pH = 14 - p
$$K_B$$
 –  $\log \frac{[B^+]}{[BOH]}$ 

# 2.2 Iontový součin vody

$$\mathrm{H_2O} + \mathrm{H_2O} \Longrightarrow \mathrm{H_3O}^+ + \mathrm{OH}^-$$

$$K = \frac{[H_3O^+][OH^-]}{[H_2O]^2}$$

$$K_w = [H_3O^+][OH-] = 10^{-14}$$

$$\mathrm{pK}_w = \mathrm{pH} + \mathrm{pOH} = 14$$

### 2.3 Silné kyseliny a zásady

Vypočítej pH kyseliny chlorovodíkové o koncentraci 0,3 M.

$$HCl \longrightarrow H^+ + Cl^-$$

$$pH = -\log c = -\log 0.3 = 0.52$$

Vypočítej pH kyseliny sírové o koncentraci 0,3 M.

$$H_2SO_4 \longrightarrow 2H^+ + SO_4^{2-}$$

$$pH = -log c = -log (2 \times 0.3) = 0.22$$

Vypočítej pH hydroxidu sodného o koncentraci 0,3 M.

$$NaOH \longrightarrow Na^{+} + OH^{-}$$

$$pOH = -log c = -log 0.3 = 0.52$$

$$pH = 14 - pH = 14 - 0.52 = 13.48$$

### 2.4 Slabé kyseliny a zásady

Jaké je pH 0,2 M kyseliny octové,  $pK_a = 4,76$ ?

$$CH_3COOH \Longrightarrow CH_3COO^- + H^+$$

$$K_a = 10^{-\mathrm{pK}_a} = 10^{-4.76} = 0,000017$$

$$K_a = \frac{[\mathrm{CH_3COO^-}][\mathrm{H^+}]}{[\mathrm{CH_3COOH}]} = \frac{x.x}{0.2-x}$$

Dosadíme za  $K_a$  a upravíme získaný výraz, čímž dostaneme kvadratickou rovnici:

$$x^2 + 0,000017x - 0,0000034 = 0$$

Kvadratickou rovnici vyřešíme pomocí diskriminantu:

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} = \frac{-0,000017 \pm \sqrt{0,000017^2 - 4.1.(-0,0000034)}}{2.1}$$

Ze dvou vypočítaných kořenů zvolíme ten kladný, koncentrace totiž nemůže být záporná.

$$x = 0.001835$$

$$\mathrm{pH} = -\log[H^+] = -\log 0,01835 = 2,736$$

Zjednodušený výpočet 
$$K_a = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}^+]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} = \frac{x.x}{0.2}$$

Dosadíme za  ${\cal K}_a$ a upravíme získaný výraz, čímž dostaneme kvadratickou rovnici:

$$x^2 - 0,0000034 = 0$$

$$x = \pm \sqrt{0,0000034}$$

$$x = 0,001844$$

$$pH = -log 0.001844 = 2.734$$

### 2.5 Soli

### 2.5.1 Sůl silné kyseliny a silné zásady

$$NaCl \longrightarrow Na^+ + Cl^-$$

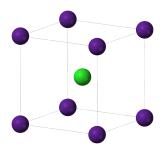
Při disociaci nedochází ke vzniku  $\boldsymbol{H}^+,$ ani  $\boldsymbol{OH}^-$ iontů, hodnota pH tedy není ovlivněna.

### 2.6 Pufry

## 3 Krystaly

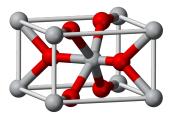
V elementární buňce rozlišujeme čtyři typy poloh:

- 1. Poloha uvnitř buňky, atom patří celý do jediné buňky
- 2. Poloha ve středu stěny, atom je sdílen dvěma buňkami. V konkrétní buňce je umístěna polovina atomu.
- 3. Poloha ve středu hrany, atom je sdílen čtyřmi buňkami. V konkrétní buňce je umístěna čtvrtina atomu.
- 4. Poloha ve vrcholu buňky, atom je sdílen osmi buňkami. V konkrétní buňce je umístěna osmina atomu.



Obrázek 1: Krystalová struktura chloridu cesného. 1

Např. chlorid cesný obsahuje cesný i<br/>on ve středu kubické buňky a osm chloridových aniontů v jejích vrcholech. Cesný kation patři do krystalové buňky celý a každý chlorid tam spadá  $\frac{1}{8}$ , tzn. vzorec je CsCl $_{8 \times \frac{1}{8}}$  = CsCl.



Obrázek 2: Krystalová struktura oxidu titaničitého.<sup>2</sup>

- 1. Ti: šedé,  $8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$
- 2. O: červené,  $2{\times}1\,+\,4{\times}\frac{1}{2}=4$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Zdroj: Benjah-bmm27/Commons

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Zdroj: Ben Mills/Commons