

1 CHEMICKÉ OBJEKTY

Veličiny

Veličina =(číselná hodnota) × (meracia jednotka). Např. $m = 0,4 \text{ g}$; $n = 2,5 \text{ mmol}$, $p = 100 \text{ kPa}$	Extenzitná veličina =je úmerná množstvu látky. Např. m (hmotnosť), E (energia), V (objem), n (látkové množstvo), S (entropia), G (Gibbsova energia)	Intenzitná veličina =nezávisí od množstva látky. Např. T (teplota), p (tlak), ρ (hustota), η (viskozita), M (molová hmotnosť), c (koncentrácia)
Veličina [jednotka] -objem, $V [\text{m}^3]$ -entalpia, $H [\text{J}]$	Molová veličina =podiel extenzitnej veličiny a látkového množstva -molový objem, $V_m [\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}]$ -molová entalpia, $H_m [\text{J mol}^{-1}]$	Špecifická veličina =podiel extenzitnej veličiny a hmotnosti -špecifický objem, $v [\text{m}^3 \text{ kg}^{-1}]$ -špecifická entalpia, $h [\text{J kg}^{-1}]$

Mikroskopické objekty skúmania fyziky

Protón p ($q = +1 e$), tiež H^+	Neutrón n ($q = 0$)	Elektrón e^- ($q = -1 e$)
Nuklid =súbor atómov, ktoré majú rovnaké protónové číslo Z a rovnaké nukleónové číslo A . Např. ^{12}C ($^{12}_6\text{C}$), ^{14}N	Izotopy =nuklidy s rovnakým protónovým číslom, ale odlišným nukleónovým číslom. Např. ^1H , ^2H a ^3H ; ^{235}U a ^{238}U	Izobary =rôzne nuklidy s rovnakým nukleónovým číslom, ale odlišným protónovým číslom. Např. $^{40}_{18}\text{Ar}$, $^{40}_{19}\text{Kr}$ a $^{40}_{20}\text{Ca}$

Mikroskopické objekty skúmania chémie

Atóm =neutrálna mikročastica zložená z atómového jadra a elektrónového obalu. Např. H , O , Na , Al , Cl	Ionizácia =dej odobratia elektrónu. $\text{Na} \rightarrow \text{Na}^+ + e^-$, $\Delta E = E_{\text{ion}}$ [eV] $\text{Ca}^+ \rightarrow \text{Ca}^{2+} + e^-$, $\Delta E = E_{\text{ion},2}$ [eV]	Elektrónová afinita =dej prijatia elektrónu. $\text{Cl} + e^- \rightarrow \text{Cl}^-$, $\Delta E = E_{\text{eg}}$ [eV] $\text{S}^- + e^- \rightarrow \text{S}^{2-}$, $\Delta E = E_{\text{eg},2}$ [eV]
Ión =častica odvodená od atómu, v ktorej je nerovnaký počet elektrónov v obale a počet protónov v jadre.	Katión =druh iónu s prevyšujúcim kladným nábojom Např. Na^+ , Ba^{2+} , Al^{3+}	Anión =druh iónu s prevyšujúcim záporným nábojom Např. Cl^- , O^{2-} , P^{3-}
Molekula =neutrálna mikročastica zložená z viacerých atómových jadier a elektrónového obalu. Např. H_2O , H_2SO_4 , NH_3	Molekulový katión =mikročastica odvodená od molekuly s prevyšujúcim kladným nábojom. Např. H_3O^+ , $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	Molekulový anión =mikročastica odvodená od molekuly s prevyšujúcim záporným nábojom. Např. OH^- , N_3^- , SO_4^{2-}

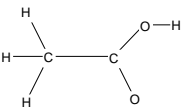
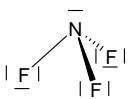
1 eV = $1,602 \cdot 10^{-19}$ J, $(1 \text{ eV})N_A = 96\,485 \text{ J mol}^{-1}$

2 ATÓMOVÁ STAVBA LÁTOK

Prvky a chemické látky

Prvok =súbor atómov s rovnakým protónovým číslom Z . Např. ${}_6\text{C}$, ${}_7\text{N}$, ${}_8\text{O}$	Jednoduchá látka =zložená z atómov jedného prvku. Např. $\alpha\text{-C}$ (diamant), $\beta\text{-C}$ (grafit), C_{60} -fullerén, O_2 , O_3	Zlúčenina =zložená z atómov viacerých prvkov. Např. CO_2 , H_2O , H_2O_2 , NO , N_2O_5
Polymorfia =jav existencie látky toho istého zloženia v rôznych kryštalických formách. $\alpha\text{-ZnS}$ (sfalerit), $\beta\text{-ZnS}$ (wurtzit) $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (korund), $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ $\alpha\text{-SiO}_2$ (α -kremeň), $\beta\text{-SiO}_2$ (β -kremeň), $\alpha\text{-SiO}_2$ (α -tridymit)	Alotropia =polymorfia pri jednoduchých látkach. $\alpha\text{-C}$ (diamant) a $\beta\text{-C}$ (grafit) $\alpha\text{-Fe}$ a $\gamma\text{-Fe}$ P_4 (biely) a $\alpha\text{-P}$ (čierny) $\alpha\text{-Sn}$ (šedý) a $\beta\text{-Sn}$ (biely)	Izoméria =existencia zlúčenín s rovnakým chemickým zložením, ale rozdielnou štruktúrou. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ (n -bután) a $(\text{CH}_3)_3\text{CH}$ (i -bután) l -glukóza a d -glukóza cis - a $trans$ - $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$

Chemické vzorce

Funkčný vzorec =zoradenie atómov do funkčných skupín. CH_3COOH (kyselina octová) CH_2O (metanal, formaldehyd) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ (diamid karbonylu) P_4O_{10} (oxid tetrafosforečný) NH_4NO_2 (dusitan amónny)	Molekulový vzorec =skutočný počet atómov v molekule. $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ CH_2O $\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$ P_4O_{10} $\text{H}_4\text{N}_2\text{O}_2$	Stechiometrický vzorec =najjednoduchší pomer atómov. CH_2O CH_2O $\text{CH}_4\text{N}_2\text{O}$ P_2O_5 H_2NO
Štruktúrny vzorec =vyjadrenie rozmiestnenia atómov v priestore. 	Elektrónový štruktúrny vzorec =vyjadrenie rozdelenia valenčných elektrónov (popri rozmiestnení atómov v priestore). 	Koordinačno-substančný (Niggliho) vzorec =vyjadrenie obklopenia atómov (iónov) susednými partnermi v tvare zlomku v tuhej látke. Např. $\{\text{CaF}_{8/2}\}$, $\{\text{NaCl}_{6/6}\}$, $\{\text{CsCl}_{8/8}\}$, $\{\text{ZnS}_{4/4}\}$

Elektronegativita a jej využitie

Elektronegativita =odpor častice voči zmene počtu elektrónov. $\chi = -dE/dN$, [eV] -podľa Mullikena: $\chi_M = (E_{\text{ion}} - E_{\text{eg}})/2$, [eV] Např. $\chi_M(\text{Na}) = 1,30$ eV; $\chi_M(\text{Cl}) = 8,71$ eV -podľa Paulinga: Např. $\chi_P(\text{Na}) = 0,9$; $\chi_P(\text{H}) = 2,1$; $\chi_P(\text{F}) = 4,0$ $\chi(\text{C}) < \chi(\text{N}) < \chi(\text{O}) < \chi(\text{F})$ $\chi(\text{I}) < \chi(\text{Br}) < \chi(\text{Cl}) < \chi(\text{F})$	Oxidačné číslo =výsledok myšlieného procesu pri ktorom zdieľané valenčné elektróny sú úplne priradené väzbovému partnerovi s väčšou elektronegativitou. $\text{Sr}^{\text{II}}\text{H}^{\text{I}}\text{P}^{\text{V}}\text{O}^{\text{II}}_4$ (hydrogenfosforečnan strontnatý) $\text{Sr}^{\text{II}}\text{P}^{\text{V}}\text{H}^{\text{I}}\text{O}^{\text{II}}_3$ (hydridotrioxofosforečnan strontnatý) $\text{Ra}^{\text{II}}\text{Mn}^{\text{VI}}\text{O}^{\text{II}}_4$ (mangánan rádnatý) $\text{Cs}^{\text{I}}\text{Mn}^{\text{VII}}\text{O}^{\text{II}}_4$ (manganistan cézny) $\text{Na}^{\text{I}}_2(\text{S}_5)^{\text{II}-}$ (pentasulfid sodný)	Efektívny náboj =vyjadrenie prebytku alebo deficitu náboja v určitom mieste molekuly. $\text{H}^{\delta+}\text{-O}^{\delta-}\text{-H}^{\delta+}$ $\text{N}^{\delta+}\text{F}^{\delta-}_3$ $\text{N}^{\delta-}\text{H}^{\delta+}_3$ $\text{C}^{\delta+}\text{O}^{\delta-}_2$
--	--	---

Klasifikácia chemickej väzby

Kovalentná väzba	Kovová väzba	Iónová väzba
<p>$\chi(A) \approx \chi(B)$ – veľká</p> <p>-smerový charakter, násobný charakter, nasýtitelnosť; štruktúra 0D, 1D, 2D, aj 3D</p> <p>-polárna: NH_3, CH_3OH, H_2SO_4</p> <p>-nepolárna: HO-OH, N_2, $\text{H}_2\text{N-NH}_2$</p> <p>Látky s 3D štruktúrou sú tvrdé, majú vysoké teploty topenia a varu, sú nerozpustné.</p> <p>Napr. diamant</p>	<p>$\chi(A) \approx \chi(B)$ – malá</p> <p>-strata smerového charakteru a násobnosti, vysoké koordinačné čísla, trojrozmerná delokalizácia; 3D štruktúra</p> <p>-v kovoch: Cu(s), Mg(s), W(s), $\alpha\text{-Po(s)}$</p> <p>-v zliatinách a intermetalických zlúčeninách: AuAg</p> <p>Látky majú kovový lesk (nepriehľadnosť), kujnosť, ťažnosť, elektrickú a tepelnú vodivosť, sú nerozpustné.</p> <p>Napr. Al</p>	<p>$\chi(A)$ – veľká \gg $\chi(B)$ – malá</p> <p>-strata smerového charakteru a násobnosti, vysoké koordinačné čísla; 3D štruktúra</p> <p>-medzi jednoduchými iónmi: $\{\text{NaCl}_{6/6}\}$, $\{\text{ZnS}_{4/4}\}$, $\{\text{CaF}_{8/2}\}$</p> <p>-medzi zložitými iónmi: CaCO_3, $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$</p> <p>Látky sú krehké, pomerne tvrdé, majú vysoké teploty topenia a varu, rozpustné sú v polárnych rozpúšťadlách.</p> <p>Napr. KCl</p>

3 LÁTKOVÉ BILANCIE

Chemické sústavy

Zmes =pozostáva z viacerých chemických látok. Např. vzduch, piesok, minerálka	Čistá látka =tvorená jedinou chemickou látkou. Např. N ₂ (g), H ₂ O(l), KCl(s)	Jedinec =chemicky a štruktúrne nezávislá entita. Např. P ₄ , Au, KCl
Sústava =časť priestoru oddelená od okolia rozhraním. Např. kadička s roztokom HCl	Homogénna sústava =pozostáva z jednej fázy. Např. vzduch, roztok HCl	Heterogénna sústava =pozostáva z viacerých fáz. Např. mlieko, káva, topiaci sa ľad
Fáza =chemicky a fyzikálne homogénna časť sústavy. Např. 2: NH ₄ Cl(s) a zmes (NH ₃ + HCl)(g)	Konštituent =chemická látka prítomná v sústave. Např. 3: NH ₄ Cl, NH ₃ a HCl	Zložka =chemicky nezávislý konštituent sústavy. Např. 1: NH ₄ Cl
Disperzná sústava =disperzná časť (nesúvislá) rozptýlená v disperznom prostredí (súvislom)	Makroheterogénna sústava Např. voda + olej, minerálka	Mikroheterogénna sústava Např. pena, tuhá pena, aerosól, emulzia, gél, dym, lyosól, tuhý gél
Hrubá disperzia =častice nad 500 nm. Např. káva	Koloidná disperzia (koloid) =častice 1 – 500 nm. Např. mlieko	Roztok (analytická disperzia) =častice pod 1 nm. Např. vodný roztok HCl

Množstvo čistej látky

Hmotnosť m [kg], [g]	Objem V [m ³], [dm ³], [cm ³]	Hustota $\rho = m/V$ [kg m ⁻³], [g cm ⁻³]
Látkové množstvo n [mol]	Počet častíc $N = N_A \cdot n$ [-]	Avogadrova konštanta $N_A = 6,022 \times 10^{23}$ mol ⁻¹
Molová hmotnosť $M = m/n$ [kg mol ⁻¹], [g mol ⁻¹]	Molový objem $V_m = V/n = M/\rho$ [m ³ mol ⁻¹]	Molový počet častíc $N_A = N/n$ [mol ⁻¹]

Zloženie zmesi

Koncentrácia $c = n/V$ [mol dm ⁻³], [M]	Relatívna koncentrácia $c_r = c/c^\ominus$ [-]	Molalita $b(L) = n(L)/m(S)$ [mol kg ⁻¹]
Hmotnostný zlomok $w_i = m_i/m$ [-] $c(L) = w(L) \cdot \rho / M(L)$	Molový zlomok $x_i = n_i/n$ [-] $x(L) = c(L) \cdot V / n$	Objemový zlomok $\phi_i = V_i/V$ [-] $w(L) = x(L) \cdot M(L) \cdot n / m$

Chemické reakcie

Chemická reakcia Např. syntéza amoniaku	Reaktanty (A, B, ...) N ₂ , H ₂	Produkty (P, R, ...) NH ₃
Chemická rovnica $aA + bB + \dots \rightarrow pP + rR + \dots$ N ₂ (g) + 3H ₂ (g) → 2NH ₃ (g)	Stechiometrické koeficienty ($\nu_i = a, b, \dots, p, r, \dots$) $a = 1, b = 3, p = 2$	Rozsah chemickej reakcie $\xi = \Delta n_i / \nu_i$ [mol] $\xi = n(\text{H}_2)/3 = n(\text{NH}_3)/2$

Zákony zachovania (ZZ)

ZZ hmotnosti $\Delta m = 0$	ZZ energie $\Delta E = 0$	ZZ elektrického náboja $\Delta q = 0$
Hmotnosť m [kg], miera zotrvačnosti objektu	Energia E [J], miera pohybu objektu	Elementárny náboj $e = 1,622 \cdot 10^{-19}$ As

4 BILANCIA ENERGIE

Vnútorná energia

Kinetická energia, E_k, T [J] =miera postupného pohybu častice (objektu).	Potenciálna energia, E_p, V [J] =vyjadruje polohovú energiu v silovom poli.	Vnútorná energia $U = E_k + E_p$ [J]
Izolovaná sústava $\Delta q = \Delta w = \Delta m = 0$	Uzavretá sústava $\Delta q \neq 0, \Delta w \neq 0, \Delta m = 0$	Otvorená sústava $\Delta m \neq 0$
Stavová veličina =jej hodnota je určená iba stavom, v ktorom sa sústava nachádza. Např. T, p, V, U, H, S, G	Procesová veličina =závisí aj od priebehu deja, ktorým sa sústava dostala do daného stavu. Např. w, q	1. zákon termodynamiky $\Delta U = U_2 - U_1 = q + w$ $dU = dq - p \cdot dV$
Práca, w [J] =rovná sa energii vymenenej usmerným pohybom.	Tepló, q [J] =rovná sa vymenenej energii v dôsledku toho, že teplota sústavy sa nerovná teplote okolia.	Štandardný stav: $T^\ominus = 298,15$ K, $p^\ominus = 100$ kPa, $a^\ominus(L) = 1$, najstálejšia modifikácia látky
Mechanická práca $dw = \vec{F} \cdot d\vec{r}$	Elektrická práca $w = q \cdot E, E$ – elektr. potenciál	Objemová práca $dw = -p \cdot dV$
Vratný proces =možno ho obrátiť a sústavu vrátiť do pôvodného stavu. Např. topenie ľadu	Nevratný proces =nemožno ho obrátiť. Např. horenie dreva	Termodynamická rovnováha =makroskopické vlastnosti sústavy sa nemenia. Např. nasýtený roztok

Entalpia

Definícia entalpie $H = U + p \cdot V$ [J] $dH = dq + V \cdot dp$	Endotermický dej $\Delta H = H_2 - H_1 > 0$	Exotermický dej $\Delta H = H_2 - H_1 < 0$
Vlastnosť pri konštantnom tlaku $\Delta H = q$ [$p = \text{const}$]	Molová entalpia $H_m = H/n$ [J mol ⁻¹]	
Entalpia pri zohrievaní $\Delta H = H_2 - H_1 > 0$	Entalpia topenia, $\Delta_f H > 0$ Entalpia fázovej premeny 1. rádu v tuhej látke, $\Delta_{\text{trs}} H > 0$	Entalpia varu, $\Delta_b H > 0$ Entalpia fázovej premeny 2. rádu v tuhej látke, $\Delta_{\text{trs}} H = 0$

Reakčná entalpia a termochémia

Reakčná entalpia =zmena entalpie pri chemickej reakcii $\Delta_r H =$ $H(\text{produkty}) - H(\text{reaktanty})$	1. zákon termochémie (Laplaceov-Lavoisierov) =reakčná entalpia priamej a protismernej reakcie majú opačné znamienko $\Delta_r \vec{H} = -\Delta_r \vec{H}$	2. zákon termochémie (Hessov) =reakčná entalpia nezávisí od spôsobu uskutočnenia reakcie; ak reakcia (3) = a (1) + b (2) $\Delta_r H(3) = a \cdot \Delta_r H(1) + b \cdot \Delta_r H(2)$
Štandardná tvorná entalpia, $\Delta_f H^\ominus$ [kJ mol⁻¹] =zmena entalpie pri tvorbe 1 mol látky z najstálejších modifikácií jednoduchých látok pri štandardných podm.	Zloženie reakčnej entalpie $\Delta_r H = \sum_j \nu_j \Delta_f H(\text{produkty}) - \sum_i \nu_i \Delta_f H(\text{reaktanty})$	Mriežková entalpia, $H_L^\ominus > 0$ [kJ mol⁻¹] =zmena entalpie pri rozložení 1 mol kryštalickej látky na izolované ióny $\{AB\}(s) \rightarrow A^{q+}(g) + B^{q-}(g), \Delta H_L$
Atomizačná entalpia, $\Delta_{\text{at}} H^\ominus > 0$ [kJ mol ⁻¹] =entalpia premeny 1 mol chemickej látky na izolované atómy v plynnom skupenstve.	Disociačná entalpia, $\Delta_{\text{di}} H^\ominus > 0$ [kJ mol ⁻¹] =entalpia disociácie 1 mol látky na radikály v plynnom skupenstve.	Spaľovacia entalpia, $\Delta_c H^\ominus < 0$ [kJ mol ⁻¹] =entalpia spálenia 1 mol látky.
Bornov-Haberov cyklus =postup výpočtu neznámej hodnoty termochemickej veličiny pomocou zákonov termochémie.		

5 SAMOVOĽNOSŤ DEJOV

Entropia

Entropia, S [J K⁻¹] =miera neusporiadanosti sústavy a nevratnosti dejov.	Vratný dej $dS = dq_{rev} / T$	Nevratný dej $dS > dq_{irev} / T$
Molová entropia $S_m = S/n$ [J K ⁻¹ mol ⁻¹]	2. zákon termodynamiky =teplo neprechádza samovoľne z telesa chladnejšieho na teplejšie.	3. zákon termodynamiky $S = 0$ pri $T = 0$
Izolovaná sústava $\Delta q = \Delta w = \Delta m = 0$	-podmienka samovoľnosti deja $\Delta S > 0, S < S_{max}$	-podmienka rovnováhy $\Delta S = 0, S = S_{max}$
Entropia pri zohrievaní $\Delta S = S_2 - S_1 > 0$	Entropia topenia $\Delta_p S > 0$	Entropia varu $\Delta_b S > 0$
Možná zmena $\Delta S \geq 0, [q = 0]$ $S(s) < S(l) < S(g)$	Entropia fázovej premeny 1. rádu v tuhej látke $\Delta_{trs} S > 0$	Entropia fázovej premeny 2. rádu v tuhej látke $\Delta_{trs} S = 0$

Gibbsova energia

Definícia Gibbsovej energie $G = H - T \cdot S$ [J] $dG = dH - T \cdot dS = V \cdot dp - S \cdot dT$	Endergonický dej $\Delta G = G_2 - G_1 > 0$	Exergonický dej $\Delta G = G_2 - G_1 < 0$
Uzavretá sústava $\Delta q \neq 0, \Delta w \neq 0, \Delta m = 0$	-podmienka samovoľnosti deja $\Delta G < 0, G > G_{min}$	-podmienka rovnováhy $\Delta G = 0, G = G_{min}$
Prírastok G =maximálna neobjemová práca pri $[T, p = \text{const}]$	Možná zmena $\Delta G \leq 0, [T, p]$	Pri rovnováhe $\Delta H = T \cdot \Delta S$
Štandardná tvorná Gibbsova energia, $\Delta_r G^\ominus$ [kJ mol⁻¹] =zmena Gibbsovej energie pri tvorbe 1 mol látky z najstálejších modifikácií jednoduchých látok.	Reakčná Gibbsova energia =zmena Gibbsovej energie pri chemickej reakcii $\Delta_r G =$ $G(\text{produkty}) - G(\text{reaktanty})$ $\Delta_r G = \Delta_r H - T \cdot \Delta_r S$	Zloženie reakčnej Gibbsovej energie $\Delta_r G = \sum_j \nu_j \Delta_f G(\text{produkty}) - \sum_i \nu_i \Delta_f G(\text{reaktanty})$
Molová Gibbsova energia $G_m = G/n$ [J mol ⁻¹]	Entropicky riadený dej -pri $\Delta H > 0$ a $\Delta S > 0$ dej prebieha samovoľne nad kritickou teplotou $T_c = \Delta H / \Delta S$	Entalpicky riadený dej -pri $\Delta H < 0$ a $\Delta S < 0$ dej prebieha samovoľne pod kritickou teplotou $T_c = \Delta H / \Delta S$

Chemický potenciál

Chemický potenciál $\mu = dG / dn$ [J mol ⁻¹] =zmena Gibbsovej energie pri zmene látkového množstva; intenzitná veličina	-pre čistú látku A $\mu_A = (\partial G / \partial n_A) = G_m, [T, p]$ $dG = \mu_A \cdot dn_A, [T, p]$ -pre ideálny plyn $\mu = \mu^\ominus + RT \ln(p / p^\ominus)$	-pre dvojjložkovú sústavu parciálna molová Gibbsova energia $\mu_A = (\partial G / \partial n_A), \mu_B = (\partial G / \partial n_B)$ $dG = \mu_A \cdot dn_A + \mu_B \cdot dn_B, [T, p]$
---	--	--

6 PLYNY A KVAPALINY

Plyny

Plyn =voľnosť pohybu častíc, nestály tvar (pohyblivosť) a objem (rozpínanosť).	Ideálny plyn =medzimolekulové interakcie a vlastný objem možno zanedbať. Např. H_2 , p – malý, T – veľká	Reálny plyn =medzimolekulové interakcie a vlastný objem sú nie sú zanedbateľné. Např. CO_2 , p – veľký, T – malá
Stavová rovnica $V = f(p, T)$	Stavová rovnica ideálneho plynu $pV = nRT$	van der Waalova rovnica $p = \frac{nRT}{V - nb} - a \left(\frac{n}{V} \right)^2$
Plynová konštanta $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	Parciálny tlak $p_i = x_i p_s$ [Pa] Daltonov zákon $p = p_1 + p_2 + \dots$	Parciálny objem $V_i = x_i V$ [m ³] Amagatov zákon $V = V_1 + V_2 + \dots$

Kvapaliny

Kvapalina =pohyblivosť, nestály tvar, stály objem, cybotaktické štruktúry.	Povrchové napätie $\gamma = d\vec{F} / d\vec{l}$ [N m ⁻¹]	Povrchová energia, σ [J m ⁻²] =práca potrebná na zväčšenie povrchu o plošnú jednotku.
Viskozita =vnútorné trenie kvapaliny	Dynamická viskozita η [Pa s]	Povrchová práca $dw = \sigma \cdot dS$ [J]
Tlak pary látky A =tlak, ktorý má para látky A za rovnováhy so svojou kvapalinou, p_A [Pa], p_A^* – pre čistú zložku	Raoultov zákon $p_A = p_A^* \cdot x_A$	Ideálny roztok =riadi sa Raoultovým zákonom $\Delta p = p_s^* - p_s = p_s^* \cdot x_L$
Henryho konštanta $K_L \neq p_L^*$, [Pa]	Henryho zákon $p_L = K_L \cdot x_L$	Ideálne zriedený roztok =riadi sa Henryho zákonom.
Aktivita rozpúšťadla S $a_s = p_s / p_s^*$ $a_s = \gamma_s \cdot x_s$ γ_s – aktivitný koeficient	Aktivita rozpustenej látky L $a_L = p_L / K_L$ $a_L = \gamma_L \cdot x_L$ γ_L – aktivitný koeficient	Reálny roztok =riadi sa Henryho zákonom s aktivitou $p_L = K_L \cdot a_L$

Prechodné stavy medzi tuhú látkou a kvapalinou

Prechodný stav =čiastočne usporiadaná štruktúra (1D, 2D).	Nematická fáza =orientácia molekúl tyčinkovitého tvaru v jednom smere.	Smektická fáza =zoskupenie molekúl tyčinkovitého tvaru do definovaných vrstiev, v každej vrstve iným spôsobom.
Tuhá látka =trojrozmerné periodická štruktúra, alebo usporiadanie na dlhú vzdialenosť, stály tvar aj objem. Např. Fe(s), NaCl(s)	Sklo =usporiadanie na krátku vzdialenosť, nie však na dlhú vzdialenosť. Např. tabuľové sklo	Amorfna látka =bez usporiadania na krátku vzdialenosť. Např. sírny kvet, červený fosfor

7 FYZIKÁLNE PREMENY

Skupenské zmeny a fázové premeny

Topenie/tuhnutie L(s) → L(l) Teplota topenia T_f [K], f, fus – „fusion“ Entalpia topenia $\Delta_{fus}H$ [kJ mol ⁻¹]	Vyparovanie L(l) → L(g) pri $T < T_b$ vap – „vaporisation“ Entalpia vyparovania $\Delta_{vap}H$ [kJ mol ⁻¹]	Var/kondenzácia L(l) → L(g) v celom objeme. Teplota varu T_b [K], b – „boiling“ Entalpia varu $\Delta_{vap}H(T_b)$ [kJ mol ⁻¹]
Fázový prechod 1. rádu $\Delta_{trs}H \neq 0, \Delta_{trs}S \neq 0$ Např. P ₄ (biely) → P(červený) Monotropná premena (nevratná) β -C(grafit) → α -C(diamant)	Fázový prechod 2. rádu $\Delta_{trs}H = 0, \Delta_{trs}S = 0$ Např. α -Fe(feromagnet) → β -Fe(paramagnet) Enantiomorfná premena (vratná) α -Sn(sivý) ↔ β -Sn(biely)	Sublimácia L(s) → L(g) bez účasti kvapaliny Např. P ₄ , I ₂ , NH ₄ Cl, FeCl ₃ , HgCl ₂ , P ₄ O ₁₀ , CO ₂ Entalpia sublimácie $\Delta_{sub}H = \Delta_{fus}H + \Delta_{vap}H$ [kJ mol ⁻¹]
Trojité bod =bod fázového diagramu $p = f(T)$, v ktorom sa stretávajú tri fázy.	Kritický bod =bod fázového diagramu $p = f(T)$, nad ktorým existuje iba plynná fáza.	Kritická teplota =hraničná teplota, nad ktorou sa plyn nedá skvapalniť.

Tuhé látky

Tuhá látka =s trojrozmernou periodickou štruktúrou, stály tvar a objem.	3D-štruktúra -skeletová: α -ZnS(s), α -C(s)	2D-štruktúra -vrstevnatá: CdCl ₂ (s), β -C(s)
Anizotropia =rôzne fyzikálne vlastnosti v rôznych smeroch.	1D-štruktúra -reťazcová: AgCl(s), Se(s)-sivý	0D-štruktúra -molekulová: CO ₂ (s), I ₂ (s)
Kryštál =teleso pravidelného geometrického tvaru prislúchajúce tuhej látke.	Kryštálová štruktúra =vyjadrenie vnútornej stavby kryštálov.	Kryštalografická sústava =klasifikácia základnej bunky podľa mriežkových konštánt ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$) do 7 tried.

Roztoky

Zvýšenie teploty varu $\Delta_{vap}T = T_b - T_b^* = K_b \cdot b(L)$ Ebulioskopická konštanta K_b [kg K mol ⁻¹]	Zníženie teploty tuhnutia $\Delta_{fus}T = T_f^* - T_f = K_f \cdot b(L)$ Kryoskopická konštanta K_f [kg K mol ⁻¹]	Molalita, b , [mol kg ⁻¹] $b(L) = m(L) / [M(L) \cdot m(S)]$
Polarita rozpúšťadla Relatívna permitivita $\epsilon_r = \epsilon / \epsilon_0$ [-] =zmenšenie Coulombovskej sily medzi iónmi vplyvom prostredia. $\epsilon_r(\text{benzén}) < \epsilon_r(\text{etanol}) < \epsilon_r(\text{H}_2\text{O})$	Permitivita vákua $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ A}^2 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3} \text{ s}^4$	Donorové číslo rozpúšťadla =DN, entalpický efekt adičnej komplexotvornej reakcie $\text{SbCl}_5 + \text{S}(l) \rightarrow [\text{S}-\text{SbCl}_5]$ $\Delta_r H = -\text{DN}$ $\text{DN}(\text{C}_6\text{H}_6) < \text{DN}(\text{H}_2\text{O}) < \text{DN}(\text{DMSO})$
Zmiešavanie (mix – „mixing“) =vzájomné rozpúšťanie kvapalných látok. Zmiešavacia entalpia čisté látky → zmes, $\Delta_{mix}H$	Rozpúšťanie (sol – „solubility“) =prechod tuhej látky do roztoku. Rozpúšťacia entalpia L(s) → L(solv), $\Delta_{sol}H$	Rozrušenie kryštálu =myslený dej prechodu na ióny v plynnej fáze. Mriežková entalpia $\{\text{AB}\}(s) \rightarrow \text{A}^{q+}(g) + \text{B}^{q-}(g), \Delta H_L$
Solvatácia (solv – „solvation“) =obaľovanie častíc molekulami rozpúšťadla. Solvatačná entalpia $\text{X}^\pm(g) \rightarrow \text{X}^\pm(\text{solv}), \Delta_{solv}H$	Hydratácia (hyd – „hydration“) =solvatácia molekulami vody. Hydratačná entalpia $\text{X}^\pm(g) \rightarrow \text{X}^\pm(\text{aq}), \Delta_{hyd}H$	Saturácia (sat – „saturation“) =nasýtenie roztoku keď už ďalšie rozpúšťanie neprebíha. Saturačná entalpia $\text{L}(s) \rightarrow \text{nasýtený roztok}, \Delta_{sat}H$ $(\partial \ln K / \partial T)_p = \Delta_{sat}H / RT^2$

<p>Nasýtený roztok =roztok takého zloženia, v ktorom sa dosiahla rovnováha medzi rozpúšťanou látkou a jej roztokom.</p>	<p>Rozpustnosť = údaj o zložení nasýteného roztoku s_1, s_2, alebo s_3</p>	<p>Kryštalizácia =dej vylúčenia tuhej látky zloženia w_K z nasýteného roztoku pri T_1 (w_1) ochladením na T_2 (w_2)</p> $m_K = m_1(w_1 - w_2)/(w_K - w_2)$ <p>(prípadne odparením rozpúšťadla)</p>
<p>s_1 (v g L/100 g roztoku)</p> $s_1 = 100w$ $w = s_1/100$	<p>s_2 (v g L/100 g rozpúšťadla)</p> $s_2 = 100w/(1 - w)$ $w = s_2/(100 + s_2)$	<p>s_3 (v g hydrátu $L \cdot nH_2O$/100 g rozpúšťadla)</p> $s_3 = 100w/(w_K - w)$ $w = s_3w_K/(100 + s_3)$
<p>Rozpúšťacia entalpia $\Delta_{sol}H(L)$ [kJ mol⁻¹]</p> <p>=zmena entalpie pri rozpustení 1 mol látky L v rozpúšťadle za vzniku roztoku s definovaným zložením; závisí od zloženia výsledného roztoku.</p>	<p>Rozpúšťacia Gibbsova energia $\Delta_{sol}G(L)$ [kJ mol⁻¹]</p> <p>=zmena Gibbsovej energie pri rozpustení 1 mol látky L v rozpúšťadle za vzniku roztoku s definovaným zložením; $\Delta_{sol}G = \Delta_{sol}H - T\Delta_{sol}S$</p>	<p>Zloženie rozpúšťacej entalpie $\Delta_{sol}H = \Delta_1H + \Delta_{solv}H$ $\Delta_{sol}H = \Delta_1H + \Delta_{hyd}H$ $\{AB\}(s) \rightarrow A(g) + B(g)$, $\Delta_1H = \Delta_{HL}, \Delta_aH, \Delta_{sub}H$</p>
<p>Nasýtená para =para, ktorá je v rovnováhe so svojou kvapalinou.</p>	<p>Kryštalohydrát =tuhá látka kryštalizujúca s určitým množstvom molekúl vody. Např. $CuSO_4 \cdot 5H_2O$</p>	<p>Rozkladný tlak =tlak vodnej pary pri rovnováhe nad kryštalohydrátom.</p>
<p>Diagram varu =grafická závislosť teploty varu kvapaliny T_b od zloženia zmesi (krivka „l“) a zloženia pár nad vriacou kvapalinou pri každej teplote varu (krivka „g“)</p>	<p>Azeotrop =kvapalný roztok, pri ktorom je zloženie pár nad roztokom zhodné so zložením kvapaliny. Vrie pri konštantnej teplote a nedá sa frakčnou destiláciou rozdeliť na čisté zložky. Např. zmes etanol/voda; vodný roztok $w_a(HNO_3) = 0,68$, $T_b(a) = 393,7$ K</p>	<p>Destilácia =spôsob delenia kvapalnej zmesi na základe rôznej prchavosti zložiek.</p>
<p>Diagram tuhnutia =grafická závislosť teploty topenia (tuhnutia) kvapalnej zmesi voči jej zloženiu (krivka „s“) a zloženia kvapaliny pri každej teplote topenia (krivka „l“).</p>	<p>Eutektikum =zmes takého zloženia, pri ktorom sú obidve tuhé zložky v rovnováhe s taveninou konštantného zloženia. Např. vzájomne nemiešateľná zmes Bi/Cd, $w(Cd) = 0,60$, $T_f(e) = 417$ K</p>	<p>Kryohydrát =vodné eutektikum. Např. $H_2SO_4 \cdot 2H_2O$, $2NH_3 \cdot H_2O$</p>

8 CHEMICKÁ ROVNOVÁHA

Reakčná Gibbsova energia

Reakčná Gibbsova energia (RGE) [J mol⁻¹] =zmena Gibbsovej energie podľa rozsahu reakcie pri konštantnej teplote a tlaku $\Delta_r G = (\partial G / \partial \xi)$, [T, p =const]	Jednoduchá reakcia A → P $\Delta_r G = \mu_p - \mu_A$, [T, p=const] =rozdiel chemických potenciálov	Všeobecná reakcia $aA + bB + \dots \rightarrow pP + rR + \dots$ $\Delta_r G$ = $(p\mu_p + r\mu_r + \dots)$ [T, p=const] - $(a\mu_A + b\mu_B + \dots)$ =vážený rozdiel chemických potenciálov
RGE $\Delta_r G = \sum_i \nu_i \mu_i$	Štandardná RGE $\Delta_r G^\ominus = \sum_i \nu_i \mu_i^\ominus$	Posuv RGE $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus = \sum_i \nu_i (\mu_i - \mu_i^\ominus)$
Ideálny plyn $(\mu_i - \mu_i^\ominus) = RT \ln(p_i / p^\ominus)$ $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus$ = $RT \sum_i \nu_i \ln(p_i / p^\ominus)$ = $RT \ln \prod_i (p_i / p^\ominus)^{\nu_i}$	Ideálny roztok $(\mu_i - \mu_i^\ominus) = RT \ln(c_i / c^\ominus)$ $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus$ = $RT \sum_i \nu_i \ln(c_i / c^\ominus)$ = $RT \ln \prod_i (c_i / c^\ominus)^{\nu_i}$	Reálny roztok $(\mu_i - \mu_i^\ominus) = RT \ln(a_i)$ $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus$ = $RT \sum_i \nu_i \ln(a_i)$ = $RT \ln \prod_i (a_i)^{\nu_i}$

Reakčný kvocient Q

-tlakový Q_p $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus = RT \ln Q_p$ $Q_p = \prod_i (p_i / p^\ominus)^{\nu_i}$ $Q_p = \frac{(p_P / p^\ominus)^p (p_R / p^\ominus)^r \dots}{(p_A / p^\ominus)^a (p_B / p^\ominus)^b \dots}$	-koncentračný Q_c $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus = RT \ln Q_c$ $Q_c = \prod_i (c_i / c^\ominus)^{\nu_i}$ $Q_c = \frac{(c_P / c^\ominus)^p (c_R / c^\ominus)^r \dots}{(c_A / c^\ominus)^a (c_B / c^\ominus)^b \dots}$	-aktivitný Q_a $\Delta_r G - \Delta_r G^\ominus = RT \ln Q_a$ $Q_a = \prod_i (a_i)^{\nu_i}$ $Q_a = \frac{(a_P)^p (a_R)^r \dots}{(a_A)^a (a_B)^b \dots}$
---	--	---

Rovnovážna konštanta K = reakčný kvocient za rovnováhy

-tlaková K_p $-\Delta_r G^\ominus = RT \ln K_p$ $K_p = \left\{ \frac{(p_P / p^\ominus)^p (p_R / p^\ominus)^r \dots}{(p_A / p^\ominus)^a (p_B / p^\ominus)^b \dots} \right\}_{\text{eq}}$ -rovnovážna konštanta zloženia vyjadrená molovými zlomkami $K_x = \left\{ \frac{(x_P)^p (x_R)^r \dots}{(x_A)^a (x_B)^b \dots} \right\}_{\text{eq}}$ -z Daltonovho zákona $p_i = x_i p$ $K_p = K_x \cdot (p / p^\ominus)^{p+r+\dots-(a+b+\dots)}$ $\Delta_r G = RT \ln(Q_p / K_p)$	-koncentračná K_c $-\Delta_r G^\ominus = RT \ln K_c$ $K_c = \left\{ \frac{(c_P / c^\ominus)^p (c_R / c^\ominus)^r \dots}{(c_A / c^\ominus)^a (c_B / c^\ominus)^b \dots} \right\}_{\text{eq}}$ -skrátenejší zápis $K_c = \frac{[P]^p [R]^r \dots}{[A]^a [B]^b \dots}$ $\Delta_r G = RT \ln(Q_c / K_c)$	-aktivitná K_a $-\Delta_r G^\ominus = RT \ln K_a$ $K_a = \left\{ \frac{(a_P)^p (a_R)^r \dots}{(a_A)^a (a_B)^b \dots} \right\}_{\text{eq}}$ -vyhodnotenie zo štandardných tvorných Gibbsových energií $\Delta_r G^\ominus = \sum_j \nu_j \Delta_f G^\ominus (\text{produkty})$ $-\sum_i \nu_i \Delta_f G^\ominus (\text{reaktanty})$ $\Delta_r G = RT \ln(Q_a / K_a)$
$K < 1$ [A] > c ₀ (A) [P] < c ₀ (P)	$K = 1$ [A] = c ₀ (A) [P] = c ₀ (P)	$K > 1$ [A] < c ₀ (A) [P] > c ₀ (P)
Teplotná závislosť $\ln K = -\left(\frac{\Delta_r H^\ominus}{R}\right) \frac{1}{T} + \left(\frac{\Delta_r S^\ominus}{R}\right)$ $\ln(K_2 / K_1)$ = $-(\Delta_r H^\ominus / R)(T_2^{-1} - T_1^{-1})$	Van't Hoffov vzťah -teplotná zmena rovnovážnej konštanty $\left(\frac{\partial(\ln K)}{\partial T}\right)_p = \frac{\Delta_r H^\ominus}{RT^2}$	Tlaková závislosť $\left(\frac{\partial(\ln K_x)}{\partial p}\right)_T = -\frac{\Delta v}{p}$ $\Delta v = p + r + \dots - (a + b + \dots)$

9 RÝCHLOSŤ CHEMICKÝCH REAKCIÍ

Rýchlosť reakcie

Rýchlosť reakcie, J $J = d\xi / dt, [\text{mol s}^{-1}]$ $J = -\frac{1}{a} \frac{dn(A)}{dt} = -\frac{1}{p} \frac{dn(P)}{dt}$	Rýchlosť v jednotkovom objeme $\frac{J}{V} = -\frac{1}{a} \frac{dc(A)}{dt} = -\frac{1}{p} \frac{dc(P)}{dt}$	Rýchlosť zmeny koncentrácie látky (produktu P) $\bar{v}(P) = dc(P) / dt$
Molekulovosť, M =počet častíc zúčastňujúcich sa na danom elementárnom deji. ($M = 1, 2, 3$)	Mechанизmus reakcie =časová postupnosť elementárnych chemických dejov.	Rýchlostná rovnica =empirická rovnica $\bar{v}(P) = \bar{k} \cdot c^x(A) \cdot c^y(B)$
Rýchlostná konštanta, k =rýchlosť reakcie pri jednotkových koncentráciách reaktantov. [Jednotka k závisí od tvaru rýchlostnej rovnice.]	Čiastkové poriadky $\sigma(A) = x, \sigma(B) = y, \dots$ – necelé čísla. Např. 0,3 alebo 1,6	Celkový poriadok $\bar{v} = \bar{k} c^x(A) c^y(B) \dots$ $\sigma = x + y + \dots$
Rýchlosť určujúci krok reakcie =najpomalší elementárny chemický dej v mechanizme chemickej reakcie	Zákon účinku hmotnosti (Guldbergov-Waageho) =rýchlosť prírastku koncentrácie produktu chemickej reakcie je priamo úmerná súčinu koncentrácií reagujúcich látok. [Neplatí univerzálne.]	Zloženie rovnovážnej konštanty $\bar{v} = \bar{k} c^a(A) c^b(B) \dots$ $\bar{v} = \bar{k} c^p(P) c^r(R) \dots$ $K_c = \frac{[P]^p [R]^r \dots}{[A]^a [B]^b \dots} = \frac{\bar{k}}{\bar{k}}$
Rýchlosť substitúcie ligandov $[M(\text{H}_2\text{O})_n]^q + \text{H}_2\text{O}^* = [M(\text{H}_2\text{O})_{n-1}(\text{H}_2\text{O}^*)]^q + \text{H}_2\text{O}$	Kineticky inertný komplex -pomalá substitúcia ligandov $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}, [\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ $k = 10^6 - 10^8 \text{ s}^{-1}$	Kineticky labilný komplex -rýchla substitúcia ligandov $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}, [\text{Rh}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$ $k = 10^{-7} - 10^{-6} \text{ s}^{-1}$

Aktivácia

Reakčná koordináta =zovšeobecnená súradnica vyjadrujúca prechod reaktantov na produkty cez aktívovaný komplex.	Aktívovaný komplex =nestála, zložená častica, ktorá sa nachádza v rovnováhe s reaktantmi aj produktmi rýchlosť určujúceho kroku.	Intermediát =izolovateľná častica, ktorá má energetické bariéry pre prechod ako k reaktantom, tak k produktom reakcie.
Aktivačná energia E^\ddagger [kJ mol⁻¹] =minimálna energia ktorú musia mať reagujúce častice, aby mohla nastať chemická premena.	Arrheniov vzťah $k = A \cdot e^{-E^\ddagger / RT}$ $A = P \cdot Z$, kde P – pravdepodobnostný faktor, Z – zrážkový faktor	Dôsledky Arrheniovho vzťahu $\ln(k / A) = -E^\ddagger / RT$ $\ln(k_2 / k_1) = -(E^\ddagger / R)(T_2^{-1} - T_1^{-1})$
Energetický profil reakcie =grafická závislosť celkovej energie reagujúcej sústavy od reakčnej koordináty.	Tranzitný stav =stav zodpovedajúci maximu v energetickom profile reakcie.	Zloženie reakčnej entalpie $\Delta_r H = \bar{E}^\ddagger - \bar{E}^\ddagger$

Katalýza

Katalyzátor =látka, ktorá výrazne ovplyvňuje (zvyšuje) rýchlosť reakcie avšak nie je zahrnutá v stechiometrii reakcie.	Inhibitor =látka, ktorá znižuje rýchlosť chemickej reakcie. (Tiež negatívny katalyzátor.)	Promótor =látka zvyšujúca účinnosť katalyzátora.
Homogénna katalýza =katalyzátor je v tej istej fáze, ako sú reaktanty.	Heterogénna katalýza =katalyzátor je v inej fáze, ako sú reaktanty.	Enzýmová katalýza =katalyzátorom je prírodný enzým.

10 ELEKTROLYTY, ZRÁŽACIE REAKCIE

Elektrolyty

Elektrolyt =látka disociovaná v roztoku (v tavenine). (Sila elektrolytu nesúvisí s jeho rozpustnosťou.)	Silný elektrolyt =látka úplne disociovaná. Např. HCl(aq), K ₂ SO ₄ (aq), BaSO ₄ (aq), NaCl(l)	Slabý elektrolyt =látka neúplne disociovaná. Např. H ₂ O(l), HF(aq), NH ₃ (aq), HgCl ₂ (aq), HIO ₃ (aq)
Stupeň disociácie (ionizácie) $\alpha = \frac{n_{\text{dis}}(\text{L})}{n(\text{L})} = \frac{c_{\text{dis}}(\text{L})}{c(\text{L})} \quad [-]$	Ostwaldov zried'ovací zákon pre binárny elektrolyt AB(aq) ↔ A ⁺ (aq) + B ⁻ (aq) $K = c \frac{\alpha^2}{1 - \alpha}$ α ≈ 1 pri všetkých c	$\alpha = \frac{-K + \sqrt{K^2 + 4Kc}}{2c}$ α → 1 pri veľmi malej c
Iónové číslo i [-] =počet iónov pripadajúcich na vzorcovú jednotku elektrolytu.	i(K ₂ SO ₄) = 3	i(HIO ₃) = 1,33
Vodivosť R ⁻¹ = G = κA/l, [S = Ω ⁻¹]	Konduktivita κ – koeficient úmernosti pri priereze A a dĺžke l vzorky [S m ⁻¹]	Molová vodivosť Λ _m = κ / c [S m ² mol ⁻¹]

Zrážacie reakcie

Metatetická reakcia =podvojná záměna: vzájomná výměna kationov a anionov solí v roztoku. NaCl(aq) + NH ₄ HCO ₃ (aq) = NaHCO ₃ (aq) + NH ₄ Cl(aq)	Vylučovacia reakcia =jeden z produktov je v inej fáze ako reaktanty. Na ₂ CO ₃ (aq) + 2 HCl(aq) = 2 NaCl(aq) + H ₂ O(l) + CO ₂ (g)	Zrážacia reakcia =vylučovanie tuhej látky z roztoku. AgNO ₃ (aq) + KCl(aq) = AgCl(s) + KNO ₃ (aq)
Súčin rozpustnosti, K_s =aktivitná (koncentračná) rovnovážna konštanta pre reakciu rozpúšťania elektrolytu.	Jednoduchý binárny elektrolyt AB(s) $\xrightleftharpoons{\text{H}_2\text{O}}$ A ⁺ (aq) + B ⁻ (aq) $K_a = a(\text{A}^+) \cdot a(\text{B}^-)$ $K_c = [\text{A}^+] \cdot [\text{B}^-]$ $c = (K_s)^{1/2}$	Zložitý binárny elektrolyt A _m B _n (s) $\xrightleftharpoons{\text{H}_2\text{O}}$ m A ⁿ⁺ (aq) + n B ^{m-} (aq) $K_a = a(\text{A}^{n+})^m \cdot a(\text{B}^{m-})^n$ $K_c = [\text{A}^{n+}]^m \cdot [\text{B}^{m-}]^n$ $c = [K_s / (m^m n^n)]^{1/(n+m)}$
Soľ =tuhá látka pozostávajúca z kationov a anionov, ktorá vzniká neutralizáciou kyseliny a zásady.	Jednoduchá soľ KHSO ₄ , Ca ₃ (PO ₄) ₂ , CuCl ₂	Komplexná soľ K ₄ [Fe(CN) ₆], NH ₄ [Fe(H ₂ O) ₆](SO ₄) ₂

11 PROTOLYTICKÉ REAKCIE

Brönstedove kyseliny a zásady

Kyselina =častica uvoľňujúca protón (donor protónu). Napr. HCl, H ₂ SO ₄ , HNO ₃	Zásada =častica prijímajúca protón (akceptor protónu). Napr. NH ₃ , Cl ⁻ , HSO ₄ ⁻	Konjugovaný pár =kyselina (k ₁ = AH) a jej zásaditá forma (z ₁ = A ⁻). Napr. HCl a Cl ⁻ , NH ₄ ⁺ a NH ₃
Protolytická reakcia =konjugované dvojice reagujú tak, že si vymieňajú protón.	Amfiprotná látka (častica) =vystupuje aj ako Brönstedova kyselina, aj ako Brönstedova zásada. Napr. H ₂ O, HSO ₄ ⁻ , H ₂ PO ₄ ⁻	Amfotérna látka =môže reagovať aj s kyselinou, aj so zásadou. Napr. ZnO, Al(OH) ₃
Autoprotolýza =protolytická reakcia medzi dvoma molekulami amfiprotnej látky v roztoku za vzniku kyseliny a zásady. N ₂ H ₄ (l) + N ₂ H ₄ (l) ⇌ N ₂ H ₅ ⁺ (solv) + N ₂ H ₃ ⁻ (solv)	Konštanta autoprotolýzy $K_{ap}(N_2H_4) = [N_2H_5^+] \cdot [N_2H_3^-]$ Iónový súčin vody $K_{ap}(H_2O) = [H_3O^+] \cdot [OH^-] = K_w$ $K_w = 1,0 \cdot 10^{-14}$ (pri $\theta = 24$ °C) -s teplotou sa zväčšuje	Tepelný efekt autoprotolýzy $\Delta_{ap}H^\ominus(H_2O) = +55,9 \text{ kJ mol}^{-1}$ K_w sa s teplotou sa zväčšuje
Neutralizácia =protolytická reakcia oxóniových katiónov a hydroxidových aniónov za vzniku málo ionizovaných molekúl vody. H ₃ O ⁺ (aq) + OH ⁻ (aq) ⇌ 2 H ₂ O(l), $c_r(H_3O^+) \cdot c_r(OH^-) > K_w$	Vodíkový exponent $pH = -\log [H_3O^+]$ $pOH = -\log [OH^-]$ $pH + pOH = 14$ $pH(H_2O) = 7$ (pri $\theta = 24$ °C) =s teplotou sa znižuje	Tepelný efekt neutralizácie –neutralizačné teplo $\Delta_{neut}H^\ominus(H_2O) = -55,9 \text{ kJ mol}^{-1}$ [Poznámka: aj reakcia NH ₄ ⁺ + OH ⁻ = H ₂ O + NH ₃ sa považuje za neutralizáciu]
Ionizácia		
Ionizácia kyseliny =správanie sa látky k vode ako Brönstedova kyselina HA(aq) + H ₂ O(l) ⇌ H ₃ O ⁺ (aq) + A ⁻ (aq) $K_a(HA) = \frac{[H_3O^+] \cdot [A^-]}{[HA]}$	Silná kyselina -veľká konštanta kyslosti $K_a \gg 1$ Napr. HCl, HBr, HI, HNO ₃ , H ₂ SO ₄ , H ₂ SeO ₄ , HClO ₄ , HNCS, H[PF ₃], H[BF ₄]	Slabá kyselina -malá konštanta kyslosti $K_a \ll 1$ Napr. HF, H ₂ CO ₃ , H ₃ BO ₃ , HClO, HClO ₂ , HNO ₂ , H ₂ SO ₃ , HCN $K_a = \frac{x^2}{c - x}$, $x = [H_3O^+]$
Ionizácia zásady =správanie sa látky k vode ako Brönstedova zásada B(aq) + H ₂ O(l) ⇌ OH ⁻ (aq) + HB ⁺ (aq) $K_b(B) = \frac{[HB^+] \cdot [OH^-]}{[B]}$	Silná zásada -veľká konštanta zásaditosti $K_b \gg 1$ Napr. LiOH, NaOH, KOH, RbOH, CsOH, Ca(OH) ₂ , Sr(OH) ₂ , Ba(OH) ₂ , La(OH) ₃ , TlOH	Slabá zásada -malá konštanta zásaditosti $K_b \ll 1$ Napr. NH ₃ , N ₂ H ₄ , PH ₃ , imidazol, pyrazol, pyridín, močovina $K_b = \frac{y^2}{c - y}$, $y = [OH^-]$
Stupeň ionizácie =miera ionizácie v roztoku $\alpha = c(HA)_{ion} / c(HA)$	Ostwaldov zriedňovací zákon pre slabé elektrolyty $\alpha = [-K + \sqrt{K^2 + 4Kc}] / 2c$	Závislosť od koncentrácie $\alpha \rightarrow 1$ pri veľmi malej c
Vytesňovanie =uvoľnenie zo soli	-slabšej kyseliny silnejšou Y ⁻ + HX ⇌ HY + X ⁻ $K_c = K_a(HX) / K_a(HY)$	-slabšej zásady silnejšou HY ⁺ + X ⇌ Y + HX ⁺ $K_c = K_b(X) / K_b(Y)$

Hydrolyza

Hydrolyza =protolytická reakcia medzi molekulou vody a iónom slabej kyseliny alebo zásady, za vzniku málo ionizovaného produktu.	Hydrolyza aniónu $A^-(aq) + H_2O(l) \rightleftharpoons HA(aq) + OH^-(aq)$ $K_{hydr}(A^-) = \frac{[HA] \cdot [OH^-]}{[A^-]}$ <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; width: fit-content; margin: 5px auto;"> $K_{hydr}(A^-) \cdot K_a(HA) = K_w$ </div>	Hydrolyza kationu $HB^+(aq) + H_2O(l) \rightleftharpoons B(aq) + H_3O^+(aq)$ $K_b(HB^+) = \frac{[B] \cdot [H_3O^+]}{[HB^+]}$ <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; width: fit-content; margin: 5px auto;"> $K_{hydr}(HB^+) \cdot K_b(B) = K_w$ </div>
Solvolýza =protolytická reakcia medzi molekulami protického rozpúšťadla a iónu slabej kyseliny alebo zásady, za vzniku málo ionizovaného produktu.	Napr. $CN^-(aq) + H_2O(l) \rightleftharpoons HCN(aq) + OH^-(aq)$ a podobne CO_3^{2-} , F^- , NO_2^- pH > 7	Napr. $NH_4^+(aq) + H_2O(l) \rightleftharpoons NH_3(aq) + H_3O^+(aq)$ a podobne $[Al(H_2O)_6]^{3+}$, PH_4^+ pH < 7
Tlmivý roztok =roztok určitého zloženia, ktorý protolytickými reakciami redukuje účinok prídavku kyseliny alebo zásady tak, že nenastáva výrazná zmena pH roztoku.	Redukcia účinku iónov -prípad slabej kyseliny a jej soli $AH + H_2O \rightleftharpoons A^- + H_3O^+$ $A^- + H_2O \rightleftharpoons AH + OH^-$ Napr. zmes CH_3COOH a CH_3COONa	Redukcia účinku iónov -prípad slabej zásady a jej soli $B + H_2O \rightleftharpoons BH^+ + OH^-$ $BH^+ + H_2O \rightleftharpoons B + H_3O^+$ Napr. zmes $NH_3(aq)$ a NH_4Cl
Acidobázický indikátor =látka, ktorá sa v ionizovanej a neionizovanej forme farebne líši.	Ionizácia indikátora $H_2O + HInd \rightleftharpoons H_3O^+ + Ind^-$ $K_{Ind} = \frac{[H_3O^+][Ind^-]}{[HInd]}$	Závislosť farebnej zmeny od pH $pH = pK_{Ind} + \log \frac{[Ind^-]}{[HInd]}$

12 REDOXNÉ REAKCIE

Redoxný potenciál

Oxidovadlo (ox, o) =častica prijímajúca elektrón (akceptor elektrónu), oxidovaná forma. Např. Fe^{3+} , Cl_2 , Au^{3+} , KMnO_4 , Ba^{2+}	Redukovadlo (red, r) =častica uvoľňujúca elektrón (donor elektrónu), redukovaná forma. Např. Fe^{2+} , Cl^- , Au , Mn^{2+} , Ba	Redoxný pár (o_1/r_1) =tvorený oxidovanou formou o_1 a jemu odpovedajúcou redukovanou formou r_1 . Např. $\text{Fe}^{3+} + \text{e}^- \rightleftharpoons \text{Fe}^{2+}$
Polreakcia =reakcia v tvare redukcie $\text{o}_1 + n_1 \cdot \text{e}^- \rightleftharpoons \text{r}_1$, $\Delta_r G^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1)$ $\text{o}_2 + n_2 \cdot \text{e}^- \rightleftharpoons \text{r}_2$, $\Delta_r G^\ominus(\text{o}_2/\text{r}_2)$	Redoxná reakcia $\text{o}_1 + \text{r}_2 (+ n\text{e}^-) \rightleftharpoons \text{r}_1 + \text{o}_2 (+ n\text{e}^-)$ $n_2 \cdot \text{o}_1 + n_1 \cdot \text{r}_2 \rightleftharpoons n_2 \cdot \text{r}_1 + n_1 \cdot \text{o}_2$	Reakčná Gibbsova energia $\Delta_r G^\ominus =$ $n_2 \cdot \Delta_r G^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1) - n_1 \cdot \Delta_r G^\ominus(\text{o}_2/\text{r}_2)$
Prevod na elektrické veličiny $\Delta_r G^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1) = -n_1 F E^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1)$ = maximálna neobjemová (elektrická) práca.	Štandardný redoxný potenciál $E^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1)$ [volt = $\text{J A}^{-1} \text{s}^{-1}$]	Faradayova konštanta =absolútna hodnota náboja 1 mol elektrónov $F = e N_A = 96\,485 \text{ A s mol}^{-1}$
Zloženie reakčnej Gibbsovej en. $-\Delta_r G^\ominus =$ $n F [E^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1) - E^\ominus(\text{o}_2/\text{r}_2)]$ $-\Delta_r G^\ominus =$ $n_2 \cdot n_1 F [E^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1) - E^\ominus(\text{o}_2/\text{r}_2)]$	Exergonická reakcia, $\Delta_r G^\ominus < 0$ ak $E^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1) > E^\ominus(\text{o}_2/\text{r}_2)$	Endergonická reakcia, $\Delta_r G^\ominus > 0$ ak $E^\ominus(\text{o}_1/\text{r}_1) < E^\ominus(\text{o}_2/\text{r}_2)$
Rovnovážna konštanta $-\Delta_r G^\ominus = RT \ln K$ $\Delta_r G = \Delta_r G^\ominus + RT \ln Q$	Rovnováha posunutá v smere produktov $K > 1$	Rovnováha posunutá v smere reaktantov $K < 1$
Zloženie reakčnej Gibbsovej en. $\Delta_r G^\ominus(\text{M}/\text{M}^{n+}) = \Delta_{\text{at}} G^\ominus(\text{M})$ $+ E_{\text{ion}}(\text{M}/\text{M}^{n+}) + \Delta_{\text{hyd}} G^\ominus(\text{M}^{n+})$	Disproporciónácia =rozklad stredného oxid. čísla. Např. $4 \text{KClO}_3 = 3 \text{KClO}_4 + \text{KCl}$	Synproporciónácia =zloženie stredného oxid. čísla. Např. $\text{Cu}^{2+} + \text{Cu} = 2\text{Cu}^+$
Elektródy		
Elektróda 1. druhu =kovové teleso ponorené do roztoku iónov vlastného druhu. Např. $\text{Cu} + \text{Cu}^{2+}(\text{aq})$	Vodíková elektróda =konštrukcia pozostávajúca z prívodu H_2 do roztoku iónov $[\text{H}_3\text{O}^+]$ v ktorom je ponorený platinový pliešok pokrytý platinovou čerňou.	Štandardná vodíková elektróda =vodíková elektróda pracujúca pri štandardných podmienkach. [Pri T^\ominus , p^\ominus a $a^\ominus(\text{H}_3\text{O}^+)$ je $E^\ominus(\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2) = 0$.]
Elektrochemický článok =dve elektródy spojené kovovým vodičom, ktoré sú v kontakte s elektrolytom.	Anóda =elektróda, na ktorej prebieha oxidácia.	Katóda =elektróda, na ktorej prebieha redukcia.
Galvanický článok =prebieha samovoľná redoxná reakcia, katóda má kladnejší potenciál. Např. Daniellov článok	Anodický dej -elektróny sa vylučujú na anóde (v mieste oxidácie), např. Zn $\text{Zn}(\text{s}) \rightarrow \text{Zn}^{2+}(\text{aq}) + 2 \text{e}^-$	Katodický dej -elektróny sa odoberajú z katódy (v mieste redukcie), např. Cu $\text{Cu}^{2+}(\text{aq}) + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{Cu}(\text{s})$
Elektrolytický článok =prebieha vynútená redoxná reakcia v dôsledku zapojenia vonkajšieho elektrického zdroja.	Anodický dej -na anóde (kladne nabitej) sa vylučujú (oxidujú) anióny. Např. $2\text{Cl}^- - 2 \text{e}^- \rightarrow \text{Cl}_2$	Katodický dej -na katóde (záporne nabitej) sa vylučujú (redukujú) kationy. Např. $\text{Fe}^{2+} + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{Fe}(\text{s})$
Elektrochemický rad napätia =podľa $E^\ominus(\text{M}^{n+}/\text{M})$ kovov	Neušľachtilé kovy $E^\ominus(\text{M}^{n+}/\text{M}) < 0$ Např. Na , Mg , Al , Zn , Fe , Sn	Ušľachtilé kovy $E^\ominus(\text{M}^{n+}/\text{M}) > 0$ Např. Cu , Ag , Au

Rovnice

Nernstova rovnica =závislosť redoxného potenciálu od aktivity iónov kovového prvku v roztoku	Všeobecný tvar $E(M^{n+}/M) = E^{\ominus}(M^{n+}/M) + (RT/nF) \cdot \ln a(M^{n+})$	Pri štandardnej teplote $E(M^{n+}/M)/V = E^{\ominus}(M^{n+}/M)/V + (0,0592/n) \cdot \log[M^{n+}]$
Nernstova-Petersova rovnica = závislosť redoxného potenciálu od aktivity iónov $E(o/r) =$ $= E^{\ominus}(o/r) - (RT/nF) \cdot \ln Q$	Všeobecný tvar $E(o_1/r_1) = E^{\ominus}(o_1/r_1) + (RT/n_1F) \cdot \ln \left(\frac{a(o_1)\dots}{a(r_1)\dots} \right)$	Pri štandardnej teplote $E(o_1/r_1)/V = E^{\ominus}(o_1/r_1)/V + (0,0592/n_1) \cdot \log \left(\frac{a(o_1)\dots}{a(r_1)\dots} \right)$
Lutherov vzťah =zloženie redoxného potenciálu $(n_1 + n_2)E^{\ominus}(A/C)$ $= n_1E^{\ominus}(A/B) + n_2E^{\ominus}(B/C)$	$A + n_1 e^- \rightarrow B$ $B + n_2 e^- \rightarrow C$ $A + n_3 e^- \rightarrow C$	Frostov diagram =závislosť hodnoty nE^{\ominus} pre redoxný pár X^{n+}/X^0 od oxidačného čísla prvku N_0
Elektrolýza =redoxná reakcia vynútená zapojením vonkajšieho zdroja do roztoku elektrolytu. (Rozklad elektrolytu elektrickým prúdom.)	1. Faradayov zákon =hmotnosť chemicky premenenej látky je úmerná elektrickému náboju q, ktorý prešiel elektrolytom $m(L) = A(L) \cdot q$	2. Faradayov zákon =na premenu jedného <i>valu</i> látky, $n_v = n/z$, treba vždy rovnaký náboj F. Spojením: $A(L) = M(L) / zF$

13 ELEKTRÓNOVÝ OBAL ATÓMU

Elektromagnetické žiarenie

Elektromagnetické pole =druh fyzikálneho poľa, ktoré prenáša energiu prostredníctvom elektromagnetického žiarenia	Elektromagnetické žiarenie =charakteristickou vlastnosťou elektromagnetického žiarenia je vlnenie: <i>postupný periodický pohyb spojený s kmitmi vektora elektrického a magnetického poľa</i>	Kvantum elektromagnetického poľa -fotón γ
Vlnová dĺžka, λ [m], [nm] =úsek dráhy, po ktorom sa kmity opakujú.	Frekvencia vlnenia, ν [s ⁻¹] =počet kmitov za časovú jednotku.	Vlnočet (vlnové číslo) $\tilde{\nu}$ [m ⁻¹], [cm ⁻¹] =prevrátená hodnota vlnovej dĺžky, $\tilde{\nu} = 1/\lambda$
Rýchlosť elektromagnetického vlnenia $c = \nu \cdot \lambda$	Rýchlosť svetla vo vákuu $c = 2,997 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$	Viditeľné svetlo 360 nm < λ < 720 nm
Planckov vzťah $E_\gamma = h \nu$	Planckova konštanta $h = 6,026 \cdot 10^{-34} \text{ J s}^{-1}$	Redukovaná Planckova konštanta $\hbar = h/2\pi$
Einsteinov vzťah pre fotón $E_\gamma = m_\gamma c^2$	Hybnosť fotónu $\lambda = h/p_\gamma$	Vlnová hypotéza =s každou hmotnou mikročasticou je spojený periodický dej vyjadrený šírením fázovej vlny $\lambda = h/p$

Kvantová mechanika

Vlnová funkcia =funkcia súradníc a času $\psi = f(x, y, z, t)$ [bezrozmerná]	Vlastnosti vlnovej funkcie -je spojitá a má spojité derivácie -je konečná -je kvadraticky integrovateľná $I = \int_{(V)} (\psi^* \psi) dV$	1. postulát kvantovej mechaniky =stav mikroobjektu je úplne charakterizovaný vlnovou funkciou $\psi = f(x, y, z, t)$.
Hustota pravdepodobnosti =pravdepodobnostná funkcia $P_V = (\psi^* \psi) dV$	Operátor \hat{o} =funkcia definovaná na množine funkcií, $\hat{o}f(x) = g(x)$	Charakteristická rovnica $\hat{o}\psi = c \cdot \psi$ c – vlastná hodnota operátora
Operátor súradnice $\hat{x} = x$	Operátor hybnosti $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$	Hamiltonov operátor (hamiltonián) =operátor celkovej energie $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$
Operátor potenciálnej energie $\hat{V} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{z_1 z_2}{r_{12}}$	Operátor kinetickej energie $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$	Schrödingerova rovnica $\hat{H}\psi = E \cdot \psi$ -pôsobenie hamiltoniánu na vlnovú funkciu dáva vlastnú hodnotu energie vynásobenú vlnovou funkciou.
Základný stav =stav častice s najnižšou možnou hodnotou energie E_0 .	Excitovaný (vzбудený) stav =stav častice s energiou E_m vyššou, než je energia základného stavu, $E_m > E_0$	Degenerované stavy =rôzne fyzikálne stavy častice, ktoré majú rovnakú hodnotu energie $E_m = E_n$, ale $\psi_m \neq \psi_n$

Moment hybnosti

Moment hybnosti \vec{l} [kg m² s⁻¹] $\vec{l} = \vec{p} \times \vec{r}$ (vektorový súčin) Zákon zachovania momentu hybnosti $\sum_i \vec{l}_i = \text{const}$	Kvantovanie momentu hybnosti $\vec{l}^2 = l(l+1)\hbar^2$ Kvantové číslo momentu hybnosti $l = 0, 1, 2, \dots$	Kvantovanie projekcie momentu hybnosti $l_z = m_l \hbar$ Kvantové číslo projekcie momentu hybnosti $-l \leq m_l \leq +l$
Spin, \vec{s} [kg m² s⁻¹] =vnútorný moment hybnosti mikročastice. Skladanie spinu $\vec{S} = \sum_i \vec{s}_i$	Kvantovanie spinu $\vec{s}^2 = s(s+1)\hbar^2$ Kvantové číslo spinu -pre elektrón $s = 1/2$	Kvantovanie projekcie spinu $s_z = m_s \hbar$ Kvantové číslo projekcie spinu $-s \leq m_s \leq +s$ pre elektrón $m_s = -1/2$ a $+1/2$

Atóm vodíka

Orbitál, nX =jednoelektrónová vlnová funkcia (komplexná) $\psi_{n,l,m_l}(\rho, \theta, \phi) = R(\rho) \cdot Y(\theta, \phi)$ ρ, ϑ, φ – polárne súradnice	Druhy atómových orbitálov s ($l=0$), p ($l=1$), d ($l=2$), f ($l=3$) podľa uhlovej časti $Y(\theta, \phi)$	Nodálna (uzlová) rovina =množina bodov v priestore, v ktorých je vlnová funkcia nulová (mení znamienko); počet pre radiálnu časť orbitálu: $n - l - 1$
Kvantovanie energie $E_n = -(1/2n^2)E_h$ Hlavné kvantové číslo $n = 1, 2, 3, \dots$	Kvantovanie momentu hybnosti $ \vec{l} = \sqrt{l(l+1)}\hbar$ Vedľajšie (azimutálne) kvantové číslo $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$	Kvantovanie projekcie momentu hybnosti $l_z = m_l \hbar$ Magnetické kvantové číslo $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$
Atómová jednotka energie <i>hartree</i> , $E_h = (e^2 / 4\pi\epsilon_0) / a_0 = 27,21 \text{ eV}$	Atómová jednotka dĺžky <i>bohr</i> , $a_0 = (\hbar^2 / m_e) / (e^2 / 4\pi\epsilon_0) = 52,9 \text{ pm}$	Základný stav $\psi_0(\rho) = Ne^{-r/a_0}$, $E_0 = -(1/2)E_h$

Viacielektrónové atómy

Výstavbový princíp =systematický trend zvyšovania energie atómových orbitálov v atóme $(1s)(2s)(2p)(3s)(3p)(4s)(3d)(4p)(5s)(4d)(5p)(6s)(4f)(5d)(6p)(7s)(5f)(6d)(7p)$	Pauliho vylučovací princíp =každý elektrón vo viacielektrónovej častici sa musí nachádzať v inom kvantovom stave (n, l, m_l, m_s).	Hundovo pravidlo maximálnej multiplicity =na energeticky degenerovaných orbitáloch sa preferuje maximálna spinová multiplicita.
Spárené elektróny, $\uparrow\downarrow$ =dvojica elektrónov, ktorým prislúcha rovnaký orbitál (n, l, m_l), líšia sa v kvantovom čísle projekciu spinu m_s .	Nespárený elektrón, \uparrow =nemá partnera líšiaceho sa iba v kvantovom čísle m_s .	Spinová multiplicita =násobnosť spinového stavu, (počet projekcií spinu) $m = 2S + 1 = k + 1$ k – počet nespárených el.
Elektrónová konfigurácia =vyjadrenie obsadenia atómových orbitálov elektrónmi. Napr. ${}_8\text{O}: 1s^2 2s^2 2p^4$ Skrátenejší zápis valenčnej vrstvy Napr. ${}_{16}\text{S}: [\text{Ne}]^{10} 3s^2 3p^4$	-pre anión elektróny sa pridávajú tak, aby sa uplatnila elektrónová konfigurácia atómu s rovnakým počtom elektrónov. Periodický zákon =vlastnosti prvkov sú periodickou funkciou ich protónového čísla Z .	-pre kation elektróny sa odoberajú z atómov v poradí f-, d-, p- a s- každej vrstvy ($n, n-1$, atď). Napr. ${}_{22}\text{Ti}^{2+}: [\text{Ar}]^{18} 3d^2$ Koopmansova teoréma =ionizačná energia sa rovná obrátenej hodnote orbitálnej energie, $E_{\text{ion},i} = -\epsilon_i$

14 KOVALENTNÁ VÄZBA

Chemická väzba

Chemická väzba =druh stabilizačnej interakcie medzi atómami tvoriacimi molekulu, molekulový ión alebo chemickú látku; príčina jestvovania molekúl.	Znaky chemickej väzby: -chemická individualita -časticová štruktúra -vlastnosť nasýtenia	Medzimolekulové interakcie =príčina jestvovania kondenzovanej fázy (s), (l), -slabé interakcie elektrostatickej povahy
Kovalentná väzba =tvorí sa medzi atómami s vysokou elektronegativitou: -má smerový charakter, -má násobnosť -má nodalitu (σ , π , δ)	Kovalentný polomer, $r_c(A)$ [pm] =empiricky zistené číslo, používané na odhad medzijadrových vzdialeností v molekulách $r(AB) = r_c(A) + r_c(B)$	Energia väzby, $E(AB)$ [kJ mol ⁻¹] =stredná hodnota disociačných energií v molekulách AB _n $E(AB) = (\sum_{i=1}^n E_{di,i}) / n$
Nepolárna väzba =tvorí sa medzi párom ekvivalentných atómov, (rovnomé rozdelenie valenčných elektrónov medzi atómami).	Polárna väzba =tvorí sa medzi párom neekvivalentných atómov.	Ionizačná energia molekuly, $E_{ion>i}$ [eV] =energia potrebná na ionizáciu molekuly (odtrhnutie elektrónu).
Elektrónový pár =dvojica elektrónov s opačným spinom. Elektrónový štruktúrny vzorec =vyjadruje rozdelenie valenčných elektrónov na väzbové elektrónové páry, voľné elektrónové páry a nespárené elektróny v molekule.	Voľný elektrónový pár =elektrónový pár valenčnej vrstvy, ktorý sa nezúčastňuje na chemickej väzbe a patrí len jednému atómu. Oktetové pravidlo =atóm p-prvku v molekule preferuje zdieľanie 8 valenčných elektrónov .	Viriálna teoréma =stredná hodnota celkovej energie viazaného systému sa rovná zápornej strednej hodnote kinetickej energie a súčasne polovici strednej hodnoty potenciálnej energie; $E = -T = V/2$ 18-elektrónové pravidlo =centrálny atóm koordinačnej zlúčeniny preferuje zdieľanie 18 valenčných elektrónov.

MO metóda

Molekulový orbitál (MO) =jednoelektrónová vlnová funkcia v molekule.	LCAO metóda =vyjadrenie molekulového orbitálu v tvare lineárnej kombinácie všetkých valenčných atómových orbitálov; $\phi_i = \sum_k^{všetky\ atomy} c_{ik} \psi_k$	Elektrónová konfigurácia molekuly =vyjadrenie elektrónovej štruktúry molekuly v podobe postupnosti obsadených molekulových orbitálov od najnižšej hodnoty energie k najvyššej.
Prekryvový integrál =rozsah, v akom dva atómové orbitály ψ_A a ψ_B zaberajú rovnaký priestor; $S_{AB} = \int \psi_A^* \psi_B dV$	Efektívny prekryv =postavenie atómových orbitálov v molekule, ktorých prekryvový integrál je nenulový, $S_{AB} \neq 0$.	Neefektívny prekryv =postavenie atómových orbitálov v molekule, ktorých prekryvový integrál je nulový, $S_{AB} = 0$.

<p>Orbitál „sigma“ =molekulový orbitál v dvojatómovej molekule, ktorý sa tvorí pozdĺž spojnice jadier.</p> <p>Napr. σ_g v molekule H_2</p>	<p>Orbitál „pi“ =molekulový orbitál v dvojatómovej molekule, ktorý sa tvorí mimo spojnice jadier z p-orbitálov (prípadne d-orbitálov) a má uzlovú rovinu prechádzajúcu spojnicou jadier.</p> <p>Napr. π_g v molekule N_2</p>	<p>Orbitál „delta“ =molekulový orbitál v dvojatómovej molekule, ktorý sa tvorí mimo spojnice jadier z d-orbitálov a má dve uzlové roviny prechádzajúce spojnicou jadier.</p> <p>Napr. δ_g v molekule Au_2</p>
<p>Väzbový orbitál (bonding) =molekulový orbitál, ktorého hustota pravdepodobnosti sa v medzijadrovej oblasti zväčšuje.</p>	<p>Protiväzbový orbitál (antibonding) =molekulový orbitál, ktorého hustota pravdepodobnosti sa v medzijadrovej oblasti znižuje na nulu; má uzlovú rovinu kolmú na spojnicu jadier.</p>	<p>Neväzbový orbitál (nonbonding) =molekulový orbitál, ktorý neprispieva do väzbového poriadku molekuly.</p>
<p>Párny orbitál, g = gerade =molekulový orbitál, ktorý je párnou funkciou vzhľadom na stred inverzie molekuly. Napr. σ_g v H_2</p>	<p>Nepárny orbitál, u = ungerade =molekulový orbitál, ktorý je nepárnou funkciou vzhľadom na stred inverzie molekuly. Napr. σ_u v H_2</p>	<p>Väzbový poriadok, $N(A-B)$ [-] =vyjadrenie násobnosti chemickej väzby v dvojatómovej molekule číslom, ktoré je polovicou rozdielu počtu elektrónov na väzbových orbitáloch (n_b) a protiväzbových orbitáloch (n_a); $N = (n_b - n_a)/2$</p>

15 CHEMICKÁ ŠTRUKTÚRA

<p>Teória VSEPR = model predpovedajúci rozmiestnenie elektrónových párov okolo centrálneho atómu v molekule typu AB_n na základe minimalizácie ich vzájomného elektrostatického odpudzovania.</p>	<p>Tvar častice =časť mnohostena (polyédra) tvoreného väzbovými elektrónovými párami v modeli VSEPR. Např. trojuholníková pyramída pre NH₃</p>	<p>Hybridizácia =spôsob konštrukcie ekvivalentných jednocentrových orbitálov so smerovými vlastnosťami.</p>
<p>Hybridné orbitály (HO), χ_j =utvárajú sa lineárnou kombináciou valenčných atómových orbitálov s rôznym kvantovým číslom l na danom atóme $\chi_j = \sum_k^{atóm} a_{jk} \psi_k$</p>	<p>Ekvivalentné HO =majú rovnaké pomerné zastúpenie atómových orbitálov. Např. SP, SP², SP³, SP³D, SP³D²</p>	<p>Neekvivalentné HO =líšia sa pomerným zastúpením atómových s-, p- a d-orbitálov. Např. v H₂O, NH₃</p>
<p>Lokalizované orbitály (LO), ϕ_i =jednoelektrónové vlnové funkcie, ktorých hustota pravdepodobnosti $\phi_i ^2$ sa koncentruje do oblasti medzi dvoma jadrami.</p>	<p>Konštrukcia LO =v tvare lineárnej kombinácie dvoch proti sebe orientovaných hybridných orbitálov $\phi_i^{LO} = c_1 \chi_1^A + c_2 \chi_2^B$</p>	<p>Rovnovážna geometria =priestorová konfigurácia molekuly zodpovedajúca minimu celkovej energie</p>
<p>Rigídna štruktúra =zvyčajná geometrická konfigurácia molekuly v ktorej atómové jadrá vibrujú okolo rovnovážnej polohy. Např. CH₄</p>	<p>Nerigídna štruktúra =druh geometrického správania sa určitej molekuly vykonávajúcej vnútorné pohyby, ktorými sa mení jej geometria v čase od jednej štruktúrnej formy k inej bez vonkajšieho vplyvu. Např. inverzia NH₃, PF₅</p>	<p>Izoméria =jav existencie zlúčenín s rovnakým chemickým zložením, ale rozdielnou štruktúrou a rozdielnymi vlastnosťami. Např. <i>cis</i>-[Pt(NH₃)₂Cl₂] a <i>trans</i>-[Pt(NH₃)₂Cl₂]</p>

16 CHEMICKÁ VÄZBA V TUHÝCH LÁTKACH

Iónová väzba

Iónová väzba =druh chemickej väzby, ktorá sa tvorí medzi kationmi kovových prvkov (s malou elektronegativitou) a aniónmi nekovových prvkov (s veľkou elektronegativitou).	Znaky iónovej väzby: -nezávisí od kvality atómov, -nemá smerový charakter, -nemá násobný charakter, -väčší počet najbližších väzbových partnerov (6, 8, 12)	Vlastnosti látok s iónovou väzbou: -tvrdosť, krehkosť, izolatory, priehľadnosť, vyššie teploty topenia a varu, rozpustnosť v polárnych rozpúšťadlách.
Madelungova konštanta A_M [-] =geometrický faktor elektrostatickej energie v iónovom kryštále, ktorý vyjadruje mieru stesnanosti štruktúry.	Madelungova energia, V_M [J] =elektrostatická časť energie iónového kryštálu, $V_M = A_M (e^2 / 4\pi\epsilon_0) z_1 z_2 / r$	Bornov-Mayerov potenciál V_r [J] =zvyčajný tvar odpudivého potenciálu v iónovom kryštále uplatňujúci sa pri krátkych medziiónových vzdialenostiach, $V_r = b e^{-r/c}, c = 30 \text{ pm}$
Mriežková energia U_L [kJ mol⁻¹] =zloženie z prít'azlivej (Madelungovej) energie V_M , odpudivého potenciálu V_r a korekcií Δ $U_L = V_M + V_r + \Delta$	Iónový polomer, r_i [pm] =empiricky stanovená veličina, ktorá vyjadruje veľkosť iónu v iónovom kryštále.	Zloženie vzdialenosti z r_i $r(A^+B^-) = r_i(A^+) + r_i(B^-)$
Fajansove pravidlá pre r_i 1. pre izoelektrónové ióny sa r_i znižuje so zväčšovaním kladného náboja; 2. pre kationy toho istého prvku sa r_i znižuje so zväčšovaním kladného náboja; 3. pre kationy d-prvkov a f-prvkov s rovnakým nábojom sa r_i znižuje so zväčšovaním Z .	Deformovateľnosť iónu =schopnosť elektrónového obalu podvoliť sa účinku vonkajšieho elektrostatického poľa. (Vyjadruje ju elektrická polarizovateľnosť, α).	Polarizačný účinok iónu =vyjadrenie prít'ahovania valenčných elektrónov aniónu kationom; schopnosť deformovať elektrónový obal aniónu. Stúpa s intenzitou elektrického poľa kationu (so zväčšovaním náboja kationu a znižovaním jeho objemu).
Kovová väzba		
Kovová väzba =vytvára sa pri tesnom usporiadaní atómov s nízkou hodnotou elektronegativity.	Znaky kovovej väzby: -je trojrozmerné delokalizovaná, -nemá smerový charakter, -nemá násobný charakter, -uplatňujú sa vysoké koordinačné čísla (12, 8+6)	Vlastnosti kovov: -kovový lesk, kujnosť, ťažnosť, vedenie tepla a vedenie elektrického prúdu, nerozpustnosť.
Atomizačná entalpia, $\Delta_{at}H^\ominus$ [kJ mol⁻¹] =entalpia premeny 1 mol kovu na izolované atómy v plynnom skupenstve $M(s) \rightarrow M(g), \Delta_{at}H^\ominus$	Kohézna energia, E_c [kJ mol⁻¹] =práca potrebná na rozloženie kovu na voľné kationy (atómové zvyšky) a voľné elektróny $M(s) \rightarrow M^{n+}(g) + ne^-, \Delta U = E_c$	Kovový polomer, r_m [pm] =empiricky stanovená veličina, ktorá vyjadruje veľkosť atómov v kryštále kovu $r(M-M) = 2r_m(M)$
Elektrónový (Fermiho) plyn =model valenčných elektrónov kovu pohybujúcich sa nezávisle v potenciálovom poli atómových zvyškov.	Hustota stavov, $\rho(E)$ [J⁻¹], [eV⁻¹] = spojité funkcia vyjadrujúca počet energetických stavov P v kovovom kryštále na interval energie dE , $\rho(E) = dP / dE = C \cdot V \sqrt{E}$	Fermiho hladina, E_F [eV] =najvyššia obsadená energetická hladina v kovovom kryštále pri nulovej teplote ($T = 0 \text{ K}$).

Pásová teória tuhých látok

Polymérne (3D) kryštály =látky s tesnou skeletovou štruktúrou propagovanou v troch smeroch.	Znaky väzby v tuhých látkach: -je trojrozmerné delokalizovaná (Blochove kryštálové orbitály) -tvorí s-pásky, sp-pásky, d-pásky	Vlastnosti 3D kryštálov: -tvrdosť, vysoká teplota topenia a varu, nerozpustnosť.
Energetický pás, E_g =interval husto natesnaných energetických hladín v tuhej látke. Charakterizovaný je svojou polohou v energetickej škále a šírkou. Např. s-pás, p-pás	Valenčný pás =energetický pás vytvorený z interagujúcich valenčných atómových orbitálov, ktorý je úplne obsadený elektrónovými pármí. Např. sp-pás v Si	Vodivostný pás =energetický pás čiastočne zaplnený alebo neobsadený elektrónmi. Např. s-pás v Na
Zakázaný pás =interval energie v tuhej látke bez výskytu dovolených energetických hladín.	Vodič 1. druhu =tuhá látka majúca iba čiastočne obsadený vodivostný pás. Účinkom elektrického potenciálu sú elektróny vynášané na vyššie energetické hladiny a transportované cez celú tuhú látku. Např. Na(s), Cu(s)	Vodič 2. druhu =tuhá látka majúca zaplnený valenčný s-pás a neobsadený vodivostný p-pás. Pri prekryve pásov elektróny z valenčného pásu prechádzajú do vodivostného pásu a zúčastňujú sa transportných javov. Např. Mg(s)
Vlastný polovodič =tuhá látka s malou šírkou zakázaného pásu E_g oddeľujúceho elektróny v zaplnenom valenčnom pásu a v prázdnom vodivostnom pásu. Např. Ge(s)	Izolátor =tuhá látka s príliš veľkou šírkou zakázaného pásu. Např. diamant, NaCl(s)	Supravodič =tuhá látka, ktorá pod teplotou prechodu stráca elektrický odpor ($\rho = 0$) a súčasne sa stáva ideálne diamagnetickou ($\chi = -1$) Např. Hg pod $T_c = 4,19$ K
Prímesový polovodič =tuhá látka majúca v zakázanom pásu ďalšie energetické hladiny pochádzajúce od atómov prímesí. Např. Si(s) dopovaný P alebo Ga	Dierový polovodič =druh prímesového polovodiča, v ktorom dopanty s nedostatkom elektrónov spôsobujú dierovú vodivosť (vodivosť p-typu). Např. Si:Ga	Elektrónový polovodič =druh prímesového polovodiča, v ktorom dopanty s nadbytočnými elektrónmi spôsobujú elektrónovú vodivosť (vodivosť n-typu). Např. Si:P

17 MEDZIMOLEKULOVÉ INTERAKCIE

Elektrické momenty

<p>Dipól</p> <p>=dvojica rovnako veľkých nesúhlasných elektrických nábojov umiestnených v určitej vzdialenosti. Např. dva atómy tvoriace polárnu kovalentnú väzbu.</p>	<p>Dipólový moment $\vec{\mu}$ [C m], [aC pm]</p> <p>=elektrický moment 1. rádu: súčin náboja q v ťažisku a vektora vzdialenosti \vec{r} medzi ťažiskami nesúhlasných nábojov, $[\vec{\mu} = q\vec{r}]$.</p> <p>Smer vektora je od ťažiska záporného ku ťažisku kladného náboja.</p>	<p>Kvadrupólový moment \bar{Q} [C m²]</p> <p>=elektrický moment 2. rádu: $Q_{ij} = (1/2) \sum_k q_k (3r_{ki}r_{kj} - r_k^2 \delta_{ij})$ i, j (=x, y, z) sú kartézske zložky tenzora 2. rádu.</p>
<p>Dipólový moment kovalentnej väzby, $\vec{\mu}_v$</p> <p>=miera príspevku dipólu chemickej väzby k dipólovému momentu molekuly. Orientovaný je od atómu s väčšou k atómu s menšou elektronegativitou.</p>	<p>Dipólový moment voľného elektrónového páru, $\vec{\mu}_l$</p> <p>=miera príspevku dipólu elektrónového páru k dipólovému momentu molekuly. Orientovaný je od ťažiska hybridného orbitálu ležiaceho mimo jadra smerom k jadrú.</p>	<p>Zloženie dipólového momentu v molekule</p> <p>$\vec{\mu} = \sum_k q_k \vec{r}_k$</p> <p>-súčet cez väzby a voľné el. páry</p> <p>$\vec{\mu} = \sum_v^{\text{väzby}} \vec{\mu}_v + \sum_l^{\text{VEP}} \vec{\mu}_l$</p>

Medzimolekulové interakcie (MI)

<p>Medzimolekulové interakcie</p> <p>= interakcie elektrostatickej povahy medzi časticami, ktorých vlnové funkcie sa málo prekrývajú, a tak nevedú k zmene chemickej individuality.</p>	<p>van der Waalsov polomer r_{vdw} [pm]</p> <p>=empirický parameter používaný k vyčísleniu geometrie medzimolekulových kontaktov $r_{vdw} = r_c + 80[\text{pm}]$</p>	<p>van der Waalsove sily</p> <p>=slabé MI medzi elektricky neutrálnymi molekulami: coulombické, indukčné, disperzné</p>
<p>Coulombické interakcie =druh MI medzi permanentnými elektrickými momentmi.</p> <p>-energia interakcie závisí od teploty $E_{\text{cou}} = -(1/4\pi\epsilon_0)^2 [2q^2\mu^2/3kTR^4 + 2q^2Q^2/20kTR^6 + 2\mu^4/3kTR^6]$ $k = R/N_A$ – Boltzmannova konštanta</p>	<p>Indukčné interakcie =druh MI medzi molekulami a nepolárnymi molekulami, v ktorých sa indukujú dipólové momenty.</p> <p>-energia interakcie nezávisí od teploty $E_{\text{ind}} = -(1/4\pi\epsilon_0)^2 [\alpha q^2/R^4 + 2\alpha\mu^2/R^6]$ α –elektrická polarizovateľnosť</p>	<p>Disperzné interakcie = druh MI, ktoré sa uplatňujú medzi molekulami všetkých látok. Súvisia s čiastočnou penetráciou elektrónových obalov molekúl.</p> <p>-energia interakcie nezávisí od teploty $E_{\text{dis}} = -(1/4\pi\epsilon_0)^2 [3\alpha^2 \bar{E}_{\text{exc}}/4R^6]$ \bar{E}_{exc} –stredná excitačná energia molekúl nahradená ionizačnou energiou E_{ion}</p>
<p>Vodíková väzba =osobitný druh chemickej väzby tvoriaci sa medzi donorm protónu (A) a akceptorom protónu (B) prostredníctvom atómu H: $A-H\cdots B$. Např. $H_2O\cdots H_2O$</p>	<p>Účastníci vodíkovej väzby =atómy F, O a Cl, v menšej miere N a zriedkavo S a P.</p> <p>Najčastejšie sa tvoria vodíkové väzby typu $O-H\cdots O$, $O-H\cdots N$, $N-H\cdots O$ a $N-H\cdots H$.</p>	<p>Druhy vodíkovej väzby -vnútromolekulová -medzimolekulová</p> <p>Typicky $E_h = 20 \text{ kJ mol}^{-1}$</p>

18 ELEKTRICKÉ A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI LÁTOK

Elektrické vlastnosti

Intenzita elektrického poľa \vec{E} [V m ⁻¹] =základná charakteristika elektrického poľa.	Indukovaný dipólový moment, \vec{p}_i [C m] =dipólový moment molekuly vyvolaný účinkom elektrického poľa; $\vec{p}_i = \alpha \cdot \vec{E}$	Elektrická polarizovateľnosť, α [Cm/Vm ⁻¹] =miera indukcie dipólového momentu účinkom elektrického poľa v látke, $\bar{\alpha} = d\vec{p}_i / d\vec{E}$
Dielektrikum =látka neprepúšťajúca elektrický prúd.	Lineárne dielektrikum - α je konštanta nezávislá od intenzity elektrického poľa	Nelineárne dielektrikum - α je funkciou intenzity elektrického poľa, $\alpha = f(E)$
Polarizácia dielektrika =dva deje prebiehajúce v polárnych molekulách umiestnených do elektrického poľa: 1. vznik indukovaných dipólov 2. orientácia dipólov do smeru poľa.	Molová polarizácia, P_m [m ³ mol ⁻¹] =miera polarizácie molekúl v elektrickom poli; Clausiova-Mosottiho rovnica: $P_m = [(\epsilon_r - 1)/(\epsilon_r + 2)]M_r / \rho$	Zložky polarizácie -indukovaná polarizácia, P_i (nezávisí od teploty) -orientačná polarizácia, P_o (závisí od teploty) $P_m = P_i + P_o = (N_A / 3\epsilon_0)(\alpha + \mu^2 / 3kT)$
Permitivita, ϵ [A ² kg ⁻¹ m ⁻³ s ⁴] =veličina charakterizujúca interakciu nábojov v dielektriku.	Relatívna permitivita $\epsilon_r = \epsilon / \epsilon_0$ [-] $\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12}$ A ² kg ⁻¹ m ⁻³ s ⁴	Elektrostriktia =deformácia štruktúry látky účinkom elektrického poľa.

Spontánna polarizácia

Spontánna polarizácia =veličina vyjadrujúca usporiadanie permanentných dipólových momentov v tuhom dielektriku; $\vec{P}_s = \sum_i \vec{\mu}_i$	Elektrická doména =časť kryštálu s paralelnou orientáciou dipólových momentov majúca nenulovú spontánnu polarizáciu.	Pyroelektrický efekt =závislosť spontánnej polarizácie (pyroelektrík, feroelektrík a antiferoelektrík) od teploty.
Pyroelektrikum =tuhá látka so spontánnou polarizáciou (paralelná orientácia permanentných dipólov), ktorú nemožno preorientovať elektrickým poľom. Např. Li ₂ SO ₄ ·H ₂ O, sacharóza – C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁ , vínan draselný – K ₂ C ₄ H ₄ O ₆ ·1/2 H ₂ O	Feroelektrická látka =tuhá látka so spontánnou polarizáciou (paralelná orientácia permanentných dipólov), ktorú možno preorientovať elektrickým poľom. Např. BaTiO ₃ , KH ₂ PO ₄ , (NH ₄) ₂ SO ₄ , NaNO ₂ , LiNbO ₃ , SbSi, BaNiF ₄	Antiferoelektrická látka =tuhá látka so spontánnou polarizáciou (antiparalelná orientácia permanentných dipólov), ktorú možno preorientovať elektrickým poľom. Např. NH ₄ H ₂ PO ₄ , RbNO ₃ , Cu(HCOO) ₂ ·4H ₂ O
Paraelektrická fáza tuhá látka s neusporiadanými dipólovými momentmi.		

Magnetické vlastnosti

Magnetická indukcia, \vec{B} [J A ⁻¹ m ⁻²], [T] – tesla =základná charakteristika magnetického poľa, magnetický tok na jednotku plochy; $\vec{B} = d\vec{\Phi} / dS$	Intenzita magnetického poľa, \vec{H} [A m ⁻¹] =magnetizačná sila $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$ $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ J A ⁻² m ⁻¹ – permeabilita vákua	Magnetický moment (magnetický dipól), \vec{m} [A m ²] a) súčin prúdu a vektora plochy ním obtekanej; $\vec{m} = I\vec{S}$, b) zmena energie na jednotku magnetickej indukcie $\vec{m} = dE / d\vec{B}$
---	--	---

Magnetizácia, \vec{M} =magnetický moment látky vztiahnutý na jednotku množstva látky.	Druhy magnetizácie: 1. objemová magnetizácia $\vec{M} = \vec{m} / V, [\text{A m}^{-1}]$ 2. hmotnostná magnetizácia $\vec{M}_\rho = \vec{m} / m = \vec{M} / \rho, [\text{J T}^{-1} \text{kg}^{-1}]$ 3. molová magnetizácia $\vec{M}_m = \vec{m} / n = \vec{M} \cdot M_r / \rho,$ $[\text{J T}^{-1} \text{mol}^{-1}]$	Druhy susceptibility: 1. objemová susceptibilita $\chi = d\vec{M} / d\vec{H} = \mu_0 d\vec{M} / d\vec{B}, [-]$ 2. hmotnostná susceptibilita $\chi_\rho = \chi / \rho, [\text{m}^3 \text{kg}^{-1}]$ 3. molová susceptibilita $\chi_m = \chi_\rho \cdot M_r = \chi \cdot M_r / \rho,$ $[\text{m}^3 \text{mol}^{-1}]$
Magnetická susceptibilita, χ zmena magnetizácie pri zmene magnetického poľa (magnetizačná rýchlosť).	Lineárne magnetikum =magnetická susceptibilita je konštanta nezávislá od magnetického poľa.	Nelineárne magnetikum =magnetická susceptibilita závisí od veľkosti magnetického poľa, $\chi = f(H)$.
Diamagnetická látka =látka so zápornou hodnotou magnetickej susceptibility. Vzorka je vytlačaná z nehomogénneho magnetického poľa do oblasti menšej intenzity poľa. Jej susceptibilita je teplotne nezávislá. Napr. $\text{N}_2, \text{BaSO}_4$	Paramagnetická látka =látka s kladnou hodnotou magnetickej susceptibility. Vzorka je vťahovaná v nehomogénnom magnetickom poli do oblasti vyššej intenzity poľa. Napr. $\text{O}_2, \text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	Efektívny magnetický moment μ_{eff} / μ_B =charakteristika paramagnetika; vystupuje vo vzťahu pre magnetickú susceptibilitu paramagnetika: $\chi_{\text{para}} = \mu_0 N_A \mu_{\text{eff}}^2 / 3kT$ $\mu_B = e\hbar / 2m_e = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$ – Bohrov magnetón
Curieho zákon $\chi_{\text{para}} = C / T$ C – Curieho konštanta	Curieho-Weissov zákon $\chi_{\text{para}} = C / (T - \Theta)$ Θ – Weissova konštanta	Pre Curieho paramagnet: $\mu_{\text{eff}} / \mu_B = g [S(S+1)]^{1/2}$ g – spektroskopický faktor (=2)
<i>Spontánna magnetizácia</i>		
Spontánna magnetizácia =veľičina vyjadrujúca usporiadanie permanentných magnetických momentov v tuhej látke bez prítomnosti poľa, $\vec{M}_s = \sum_i \vec{m}_i$	Magnetická doména =časť kryštálu s usporiadaním magnetických momentov (so spontánnou magnetizáciou).	
Feromagnetická kátka =tuhá látka so spontánnou magnetizáciou (paralelná orientácia magnetických momentov). Napr. Fe, Co, Ni, Gd.	Antiferomagnetická látka = tuhá látka so spontánnou magnetizáciou (antiparalelná orientácia magnetických momentov), navonok nemagnetická. Napr. MnO, Cr, Mn, NiO, MnF ₂	Ferimagnetická látka =látka s čiastočne skompenzovanými magnetickými momentmi dvoch kryštálových podmriežok, ktorých výsledné magnetické momenty majú rôznu veľkosť. Napr. Fe ₃ O ₄
Usporiadanie magnetických momentov =proces zarovnania magnetických momentov častíc do smeru magnetického poľa.	Magnetizačná krivka =závislosť magnetizácie látky od magnetickej indukcie pri konštantnej teplote; $M = f(B) [T = \text{const}]$	Magnetická hysterézia =jav pri ktorom magnetizačná krivka pri poklese poľa sleduje inú cestu ako mala pri náraste poľa; pri nulovom poli pretrváva remanentná magnetizácia M_r .

19 OPTICKÉ A TERMICKÉ VLASTNOSTI LÁTOK

Lom svetla

Lom svetla =zmena dráhy svetelného lúča pri zmene prostredia.	Index lomu, n_{12} [-] =pomer sínusov uhla dopadu (α) a uhla lomu (β) svetelného lúča meraných vzhľadom na kolmicu na rozhranie prostredí; $n_{12} = \sin \alpha / \sin \beta$	Snellov zákon $n_{12} = c_1 / c_2$ c_i – rýchlosť svetla v prostredí
---	---	---

Optická aktivita

Lineárne polarizované svetlo =kmity vektora elektrického poľa sa uskutočňujú v jednej rovine.	Polarizačná rovina =rovina preložená smerom šírenia svetla kolmo na smer kmitov.	Optická aktivita =schopnosť otáčať polarizačnú rovinu lineárne polarizovaného svetla.
Pravootáčavá látka, <i>d</i>-forma (dexter, +) =otáča polarizačnú rovinu v smere pohybu hodinových ručičiek.	Ľavootáčavá látka, <i>l</i>-forma (laevus, -) =otáča polarizačnú rovinu proti smeru pohybu hodinových ručičiek.	Racemická zmes =pozostáva z rovnakých množstiev pravo- a ľavootáčavých foriem opticky aktívnej látky (nemá vplyv na polarizované svetlo).
Enantioméry (optické antipódy) =dve látky líšiace sa len smerom otáčania polarizačnej roviny.	Chiralita (točivosť) =geometrická vlastnosť v dôsledku ktorej sa objekt neprekrýva so svojim zrkadlovým obrazom. Chirálny útvar nemá ani rovinu súmernosti ani stred súmernosti.	Asymetrický uhlík C* =atóm uhlíka, na ktorom sú viazané štyri rozdielne substituenty, čím sú umožnené dva optické izoméry (optické antipódy, enantioméry).

Spektrá

Spektrum =záznam intenzity elektromagnetického žiarenia vzhľadom k jeho vlnovej dĺžke, alebo energii.	Emisné spektrum =vzniká rozložením žiarenia vychádzajúce priamo zo zdroja.	Reflexné spektrum =vzniká rozložením žiarenia, ktoré sa odrazilo od povrchu vzorky.
Absorpčné spektrum =vzniká rozložením žiarenia, ktoré prešlo cez vrstvu určitej látky.	Absorbancia $A = \log(I_0/I)$ I_0 – pôvodná intenzita, I – intenzita prepusteného žiarenia	Lambertov-Beerov zákon $A = \varepsilon l c(L)$ l – hrúbka absorbujúcej vrstvy [cm]
Molový absorpčný koeficient $\varepsilon [M^{-1} \text{ cm}^{-1}]$	Transmitancia $T = I/I_0$	Absorpčná krivka =závislosť ε od vlnovej dĺžky λ , prípadne od vlnočtu $\tilde{\nu}$.

Kryštalohydráty

Kryštalohydrát =tuhá látka kryštalizujúca s určitým množstvom molekúl vody. Napr. $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$.	Rozkladný tlak =tlak vodnej pary pri rovnováhe nad kryštalohydrátom.
Zvetrávanie =prechod kryštalohydrátu na látku s menším obsahom vody, ak je jeho rozkladný tlak väčší, než je tlak vodnej pary v atmosfére.	Hygroskopičnosť =prijímanie vodnej pary kryštalohydrátom, ak je tlak vodnej pary v atmosfére vyšší než rozkladný tlak.

20 ŠTRUKTÚRA TUHÝCH LÁTOK

Kryštalografia

Kryštalová štruktúra =vyjadrenie vnútornej stavby kryštálov.	Osový kríž =sústava kryštalografických osí, ktoré sa pretínajú v strede kryštálu.	Parametre plochy kryštálu =úseky a_i , b_i a c_i ; vytnuté kryštalovou plochou na osovom kríži.
Zákon stálosti hrán =dve susedné plochy kryštálu určitej látky zvierajú vždy ten istý uhol.	Zákon racionality parametrov =dvojité pomery parametrov dvoch ľubovoľných kryštalových plôch sú určené pomerom racionálnych čísiel (koeficientov racionality); $(a_i/a_i):(b_i/b_i):(c_i/c_i) = m:n:p$	Millerove indexy, h, k, l =prevrátené hodnoty koeficientov racionality m, n a p : $h = 1/m, k = 1/n, l = 1/p$
Kryštalová mriežka =sústava bodov pravidelne rozmiestnených v priestore.	Uzly kryštalovej mriežky =body kryštalovej mriežky, ktoré majú v kryštalovej štruktúre rovnaké okolie.	Základná bunka, ZB (elementárna bunka) =rovnoobežnosten zostrojený z troch vektorov základných translácií ($\vec{a}_0, \vec{b}_0, \vec{c}_0$).
Bravaisove podmienky ZB 1) základná bunka má takú istú súmernosť, ako celá kryštalová štruktúra; 2) počet pravých uhlov v základnej bunke je maximálny; 3) pri splnení prvých dvoch podmienok objem základnej bunky je minimálny.	Centrovanosť ZB =výskyt uzlov v základnej bunke: P – primitívna I – priestorovo centrovaná C – bázičky centrovaná, F – plošne centrovaná	Kryštalografická sústava =klasifikácia základnej bunky podľa mriežkových konštánt ($a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$) do 7 tried: 1) kocková (kubická) 2) romboedrická (trigonálna) 3) šesťuholníková (hexagonálna) 4) štvorcová (tetragonálna) 5) kosoštvorcová (ortorombická) 6) jednoklonná (monoklinická) 7) trojklonná (triklinická)
Tetraéder =pravidelný štvorsten. Má 4 vrcholy, 6 hrán a 4 steny tvaru rovnostranného trojuholníka.	Oktaéder =pravidelný osemsten. Má 6 vrcholov, 12 hrán a 8 stien tvaru rovnostranného trojuholníka.	Kocka =pravidelný šesťsten so stenami tvaru štvorca. Má 8 vrcholov a 12 hrán. Uhly medzi priľahlými hranami sú 90° .
Tetraedrická dutina =miesto, kam možno vpísať tetraéder. Napr. do 8 miest vo vnútri plošne centrovanej kocky.	Oktaedrická dutina =miesto, kam možno vpísať oktaéder. Napr. do stredu plošne centrovanej kocky.	Koordináčne číslo N_k =počet častíc, ktoré v kryštalovej štruktúre bezprostredne obklopujú určitú časticu.
Kubická plošne centrovaná mriežka (<i>fcc</i> ; typ A1) =druh základnej bunky vzniknutý uložením vrstiev gúl motívom A-B-C-A-B-C-. $N_k = 12$. Např. Cu	Kubická priestorovo centrovaná mriežka (<i>bcc</i> ; typ A2) =druh základnej bunky, $N_k = 8 + 6$. Např. W	Hexagonálna mriežka (<i>hcp</i> ; typ A3) =druh základnej bunky vzniknutý uložením vrstiev gúl motívom A-B-A-B-. $N_k = 12$. Např. Mg
<i>Reálne kryštály</i>		
Porucha (defekt) kryštálu =odchýlka od ideálnej kryštalovej štruktúry pri reálnych tuhých látkach (bodové, čiarové, priestorové).	Bodová porucha =druh lokalizovanej poruchy kryštálu (Frenkelova, Schottkyho, prímesová).	Čiarová porucha (dislokácia)

<p>Frenkelova porucha =druh bodovej poruchy kryštálu, ktorý vznikne posunom častíc (iónov alebo atómov) z uzlov mriežky do intersticiálnych (medzimriežkových) polôh. Vede k vzniku vakancie a intersticiálnej častice.</p>	<p>Schottyho porucha =druh bodovej poruchy kryštálu, ktorý vznikne posunom častíc z uzlov mriežky spravidla na povrch kryštálu. Vede k vzniku vakancie v uzle kryštálovej mriežky.</p>	<p>Prímesová porucha =druh bodovej poruchy kryštálu, ktorý vznikne náhradou častice v uzle kryštálovej mriežky inou časticou (atómom, iónom iného druhu).</p>
<p>Izomorfia =schopnosť látok podobnej chemickej štruktúry vytvárať kryštály takmer zhodného tvaru, ktoré patria do rovnakej kryštalografickej sústavy. Např. $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ a $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$</p>	<p>Zmesový kryštál =kryštál tvorený dvojicou izomorfných látok zastúpených v takmer ľubovoľnom pomere.</p>	<p>Nestechiometrická zlúčenina (bertolít) =látka ktorej zloženie je v istom pomere premenlivé (nie je v súlade so zákonom stálych zlučovacích pomerov).</p>