7. listopadu 2024**AplM: 4 Matematika v chemii**

*Vlastimil Horálek, PřF UK, Deutsche Schule Prag*

### Krystalové mřížky a hustota

1. **Porovnání krystalových mřížek.** Představme si, že krystal dané látky celý rozdělíme do shodných rovnoběžnostěnů tak, aby měla každá buňka stejnou podobu; takový nejmenší rovnoběžnostěn nazveme *základní buňkou*. Může jí být např. krychle.

Ze základních buněk pak se skládají tzv. *krystalové mřížky*. Mezi geometricky nejjednodušší krystalové mřížky patří*kubická prostá* (atomy jsou ve vrcholech), *kubická prostorově centrovaná* (atom je i ve středu krychle) a *kubická plošně centrovaná* (atomy jsou i ve středech stěn); viz obrázek.

S pomocí obrázku pro tyto krystalové mřížky vypočítejte a porovnejte:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| název krystalové mřížky | (i) počet celých atomů na jednu buňku | (ii) poloměr atomu ku délce hrany krychle a0 | (iii) poměr zaplnění prostoru buňky atomy dané látky |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

1. **Určení hustoty ze znalosti krystalové mřížky.** Hustotu lze vypočítat ze vztahu níže, kde  je počet celých atomů na jednu buňku, je molární hmotnost (hmotnost jednoho molu),  je objem základní buňky a  je Avogadrova konstanta (udávající počet částic v jednom molu látky).
2. Rozmyslete si, jak je vzorec sestaven a jak funguje, a proveďte rozměrovou zkoušku.
3. Vypočítejte hustotu železa alfa, pokud víte, že , typ krystalové mřížky je kubická prostorově centrovaná a délka hrany krystalové mřížky je .
4. Vypočítejte hustotu dalších dvou modifikací železa, pokud víte, že γ-Fe má plošně centrovanou základní buňku s mřížovým parametrem a = 368 pm a β-Fe má prostorově centrovanou základní buňku s a = 290 pm, a výsledky porovnejte.
5. Lithium má hustotu 0,534, hrana délky elementární buňky je , . Určete jeho krystalovou mřížku a poloměr jeho atomu.
6. **Pro zájemce: Rovnoběžnostěny.** Geometricky méně symetrické a tedy na výpočet složitější jsou tzv. jednoklonné nebo trojklonné krystalové mřížky, jejichž základní buňkou je rovnoběžnostěn (daný šesti parametry, viz obrázek).
7. Vypočítejte objem základní buňky krystalu *β-*Ga2O3 s parametry a = 553 pm, b = 1220 pm, c = 580 pm, α = γ = 90o, β = 103,7o.
8. Cu(VO3)2 krystaluje v trojklonné soustavě, základní buňka jeho struktury má mřížové parametry a = 917 pm, b = 353 pm, c = 648 pm, α = 92,25o , β = 110,34o, γ = 91,88o. Hustota látky je 4,35  , molární hmotnost je 261,4 . Vypočítejte počet vzorcových jednotek (tj. proměnnou ) v základní buňce.

---

### Vztah pH a koncentrace kyselin a zásad

Pro výpočet pH platí tyto vztahy, kdy *c(*H+*)* je (velmi zjednodušeně) *a-*násobek koncentrace kyseliny, kdy *a* je počet atomů vodíků v molekulu (obdobně pro hydroxidy). Terminologické upozornění pro chemiky: zanedbáváme značení koncentrací (relativní vs. rovnovážná vs. …).

1. **Výpočet pH z molární koncentrace.** Vypočítejte pH následujících látek, které mají stejnou hodnotu molární koncentrace, a sice 0,01 :
2. HCl
3. H2SO4
4. NaOH
5. Ba(OH)2
6. **Výpočet molární koncentrace z pH.** Vypočítejte molární koncentraci následujících látek, pokud dané kyseliny mají pH = 1 a dané zásady mají pH = 13:
7. HCl
8. H2SO4
9. NaOH
10. Ba(OH)2
11. **Slabé kyseliny**. Vypočítejte a porovnejte pH kyseliny octové, pokud je její koncentrace a hodnota konstanty acidity
12. se zanedbáním disociace, tj.
13. bez zanedbání disociace, tj.

**Bonus**: Jaký musí být vztah mezi a koncentrací , aby se hodnota z obou výpočtů lišila o méně než libovolně zvolené ?