

Matematika pro chemiky

Adam Jaroš

Pedagogická fakulta Univerzity Karlovy

ZS 2024/2025



PEDAGOGICKÁ
FAKULTA
Univerzita Karlova

- 1 Základní operace
- 2 Operátory
- 3 Zlomky
- 4 Zaokrouhlování, platné číslice
- 5 Algebra
- 6 Rovnice
- 7 Funkce
- 8 Procvičování

1 Základní operace

2 Operátory

3 Zlomky

4 Zaokrouhlování, platné číslice

5 Algebra

6 Rovnice

7 Funkce

8 Procvičování

Operace

Operace	Reprezentace	Pořadí operací
Součet	$a + b$	$a + b = b + a$
Rozdíl	$a - b$	$a - b \neq b - a$
Součin	$a \times b$	$a \times b = b \times a$
Podíl	$\frac{a}{b}$	$\frac{a}{b} \neq \frac{b}{a}$

Distribuce, faktorizace, záporná čísla

- Sčítání a násobení je distributivní

$$a \times (b + c) = (a \times b) + (a \times c)$$

- Faktorizace

$$y = (8x + 12) = 4(2x + 3)$$

- Sčítání a odečítání záporných čísel

$$x + y = 4 + (-3) = 4 - 3 = 1$$

$$x - y = 4 - (-3) = 4 + 3 = 7$$

Výpočet molární hmotnosti modré skalice

$$\begin{aligned} & \text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O} \\ &= 64 + 32 + (16 \times 4) + 5 \times ((1 \times 2) + 16) \\ &= 64 + 32 + 64 + 5 \times (2 + 16) \\ &= 64 + 32 + 64 + 5 \times 18 \\ &= 64 + 32 + 64 + 90 \\ &= 250 \end{aligned}$$

1 Základní operace

2 Operátory

3 Zlomky

4 Zaokrouhlování, platné číslice

5 Algebra

6 Rovnice

7 Funkce

8 Procvičování

Operátory

- Δ - Značení změny činitele

$$\Delta A = A_f - A_i$$

i = initial, f = final

Pozitivní hodnota znamená nárůst, negativní pokles

- Σ - Součet několika činitelů

$$\sum_{i=1}^n X_i = X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_n$$

- Π - Součin několika činitelů

$$\prod_{i=1}^n X_i = X_1 \times X_2 \times X_3 \times \dots \times X_n$$

Použití operátorů v chemii

- Výpočet reakční enthalpie

$$\Delta H_{reaction} = H_{products} - H_{reactants}$$

- Směšovací rovnice

$$\sum_i w_i m_i = w_1 m_1 + w_2 m_2 + w_3 m_3 = w m$$

- Celkový výtěžek reakce

$$\prod_i yield_i = yield_1 \times yield_2 \times yield_3 = overall\ yield$$

1 Základní operace

2 Operátory

3 Zlomky

4 Zaokrouhlování, platné číslice

5 Algebra

6 Rovnice

7 Funkce

8 Procvičování

Zlomky

- Zlomky se používají k vyjádření poměrů a jsou ekvivalentní podílu
- $a \div b = \frac{a}{b}$
a - čitatel, b - jmenovatel

- Součin zlomků

$$\frac{a}{b} \times \frac{c}{d} = \frac{ac}{bd}$$

$$\frac{a}{b} \times \frac{a}{c} = \frac{a \times a}{b \times c} = \frac{a^2}{bc}$$

$$\frac{a}{b} \times \frac{b}{c} = \frac{a \times b}{b \times c} = \frac{a}{c}$$

- Podíl zlomků

$$\frac{\frac{a}{b}}{c} = \frac{a}{b} \times \frac{d}{c} = \frac{ad}{bc}$$

Procenta

- Kvantita vyjádřená jako zlomek setiny

$$\textit{procenta} = \frac{x}{y} \times 100\%$$

$$\frac{1}{4} = 25\%$$

Zlomky v chemii

- Hmotnostní zlomek

$$w = \frac{m_i}{m} = \frac{25\text{g}}{125\text{g}} = 0,2 = 20\%$$

- Výtěžek reakce

$$\text{yield} = \frac{2,6\text{g}}{4,2\text{g}} = 61,9\%$$

- 1 Základní operace
- 2 Operátory
- 3 Zlomky
- 4 Zaokrouhlování, platné číslice**
- 5 Algebra
- 6 Rovnice
- 7 Funkce
- 8 Procvičování

Zaokrouhlování, platné číslice

- Zaokrouhlování
Na druhé desetinné místo
 $0,314 \doteq 0,31$
 $0,315 \doteq 0,32$
 $0,316 \doteq 0,32$
- Platné číslice
1,06 na jednu platnou číslici
 $1,06 \doteq 1$
1,06 na dvě platné číslice
 $1,06 \doteq 1,1$
1,06 na tři platné číslice
 $1,06 \doteq 1,06$

Platné číslice v chemii

- Látkové množství 3 g stříbra ($M = 107,87$)
$$n = \frac{m}{M} = \frac{3}{108} = 0,03 \text{ mol}$$
- Látkové množství 3,0000 g stříbra ($M = 107,87$)
$$n = \frac{3,0000}{107,87} = 0,027811 \text{ mol}$$

- 1 Základní operace
- 2 Operátory
- 3 Zlomky
- 4 Zaokrouhlování, platné číslice
- 5 Algebra**
- 6 Rovnice
- 7 Funkce
- 8 Procvičování

Mocniny a odmocniny

- x^n
 x - základ mocniny, n = exponent

- $x^{-n} = \frac{1}{x^n}$

- $x^1 = x, x^0 = 1$

- Operace s mocninami

$$x^a \times x^b = x^{a+b}$$

$$\frac{x^a}{x^b} = x^{a-b}$$

$$(x^a)^b = x^{a \times b}$$

$$\sqrt[n]{x^n} = x$$

$$x^{\frac{1}{n}} = \sqrt[n]{x}$$

Exponenciály a logaritmy

- $y = a^x$, $\log_a y = x$
 $\log_a(a^x) = x$, $a^{\log_a x} = x$
- Dekadický logaritmus, $a = 10$
 $y = 10^x$, $\log_{10} y = x$
- Přirozený logaritmus, $a = e$
 $y = e^x$, $\log_e y = \ln y = x$
- Operace s logaritmy
 $\log_a(x \times y) = \log_a x + \log_a y$
 $\log_a\left(\frac{x}{y}\right) = \log_a x - \log_a y$
 $\log_a(x^b) = b \log_a x$

Mocniny a logaritmy v chemii

- Součín rozpustnosti

$$K_s = [A^+][B^-] = [A^+]^2$$

$$[A^+] = \sqrt{K_s}$$

- Arrheniova rovnice

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

$$\ln\left(\frac{k}{A}\right) = -\frac{E_a}{RT}$$

$$\ln(k) - \ln(A) = -\frac{E_a}{RT}$$

- Výpočty pH

$$\text{pH} = -\log[\text{H}_3\text{O}^+]$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 10^{-\text{pH}}$$

- Rovnovážná konstanta

$$\Delta G = RT \ln K$$

$$K = e^{\frac{\Delta G}{RT}}$$

- 1 Základní operace
- 2 Operátory
- 3 Zlomky
- 4 Zaokrouhlování, platné číslice
- 5 Algebra
- 6 Rovnice**
- 7 Funkce
- 8 Procvičování

Rovnice

- Algebraické úpravy vedou k vyjádření požadované kvantity z rovnice
- Úprav dosahujeme inverzními operacemi

Sčítání

Násobení

Umocňování

Umocňování (ale jinak, jakoby)

odčítání

dělení

odmocňování

logaritmování

Soustavy rovnic a příklad z chemie

- Stejná kvantita ve dvou rovnicích - lze dosazovat z jedné do druhé

$$E_k = \frac{1}{2}mv^2$$

$$E_k = \frac{3}{2}kT$$

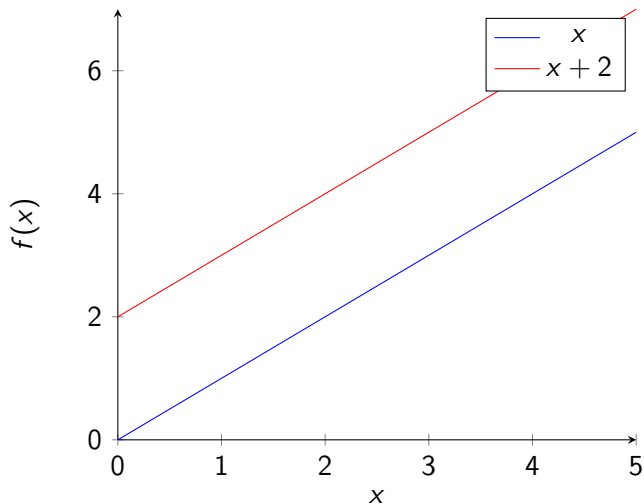
$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}kT$$

- 1 Základní operace
- 2 Operátory
- 3 Zlomky
- 4 Zaokrouhlování, platné číslice
- 5 Algebra
- 6 Rovnice
- 7 Funkce**
- 8 Procvičování

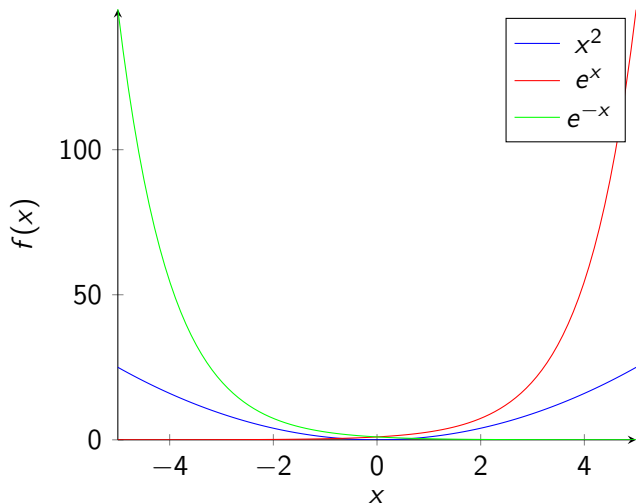
Funkce

- Funkce popisují vztah mezi dvěma kvantitami
 $y = f(x)$ - funkce f přiřazuje y hodnotu x
- lineární funkce:
 $y = ax + b$
- exponenciální funkce:
 $y = a^x$
 $y = e^x, e = 2,718$

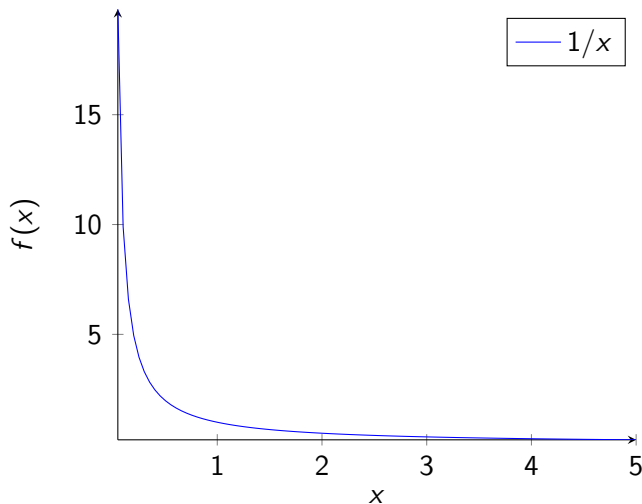
Grafy funkcí - lineární funkce



Grafy funkcí - exponenciální funkce



Grafy funkcí - lomená funkce



Funkce v chemii

- Rovnice ideálního plynu (a jakékoliv další)

$$pV = nRT$$

- Chemická kinetika, Arrheniova rovnice

$$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Derivace a integrály (BUBUBU)

- Derivace a integrace provádíme s funkcemi
- Derivace jsou užitečné k popisu malých (okamžitých) změn funkce
- Integrace naopak poskytují informaci o delším úseku funkce

BUBUBU v chemii

- Kinetika reakcí

$$r = k[A] = -\frac{d[A]}{dt}$$

$$-kdt = \frac{[A]}{d[A]}$$

$$-k \int_0^t dt = \int_{[A]_0}^{[A]} \frac{[A]}{d[A]}$$

$$-k(t - 0) = \ln[A] - \ln[A]_0$$

$$-kt = \ln \frac{[A]}{[A]_0}$$

$$e^{-kt} = \frac{[A]}{[A]_0}$$

$$[A] = [A]_0 e^{-kt}$$

- 1 Základní operace
- 2 Operátory
- 3 Zlomky
- 4 Zaokrouhlování, platné číslice
- 5 Algebra
- 6 Rovnice
- 7 Funkce
- 8 Procvičování**

Příklady

- 1 Vyjádřete rovnicí vztah počtu částic a hmotnosti dané látky
- 2 Vyjádřete rovnicí vztah mezi látkovou a hmotnostní koncentrací
- 3 Vyjádřete rovnicí vztah látkové koncentrace a hmotnosti rozpuštěné látky

Příklady

- 1 Vyjádřete rovnicí vztah počtu částic a hmotnosti dané látky

$$n = \frac{m}{M} = \frac{N}{N_A}$$

$$N = N_A \frac{m}{M}$$

- 2 Vyjádřete rovnicí vztah mezi látkovou a hmotnostní koncentrací

$$c = \frac{n}{V}$$

$$c_m = \frac{m}{V}$$

$$n = \frac{m}{M} \rightarrow \frac{1}{M} = \frac{n}{m}$$

$$V = \frac{n}{c} = \frac{m}{c_m}$$

$$nc_m = mc$$

$$c_m = cM$$

- 3 Vyjádřete rovnicí vztah látkové koncentrace a hmotnosti rozpuštěné látky

$$n = cV$$

$$m = cVM$$

Příklady

- 4 Vyjádřete rovnicí vztah koncentrace rozpuštěných iontů látky a jejího součinu rozpustnosti (předpokládejte rozpad na dva kationy a jeden anion)
- 5 Vyjádřete rovnicí vztah tlaku a ostatních veličin ze stavové rovnice ideálního plynu
- 6 Vyjádřete rovnicí vztah molární plynové konstanty a ostatních veličin ze stavové rovnice ideálního plynu

Příklady

- 4 Vyjádřete rovnicí vztah koncentrace rozpuštěných iontů látky a jejího součinu rozpustnosti (předpokládejte rozpad na dva kationy a jeden anion)

$$K_s = [A]^2[B] = (2x)^2x = 4x^3$$

$$x = \sqrt[3]{\frac{K_s}{4}}$$

- 5 Vyjádřete rovnicí vztah tlaku a ostatních veličin ze stavové rovnice ideálního plynu

$$pV = nRT$$

$$p = \frac{nRT}{V}$$

- 6 Vyjádřete rovnicí vztah molární plynové konstanty a ostatních veličin ze stavové rovnice ideálního plynu

$$R = \frac{pV}{nT}$$

Příklady

- 7 Proveďte rozměrovou analýzu z výše odvozené rovnice pro molární plynovou konstantu a odvoďte její jednotky za použití vztahů pro tlak a práci
- 8 Vyjádřete rovnicí vztah molárního absorpčního koeficientu a ostatních veličin z Lambertova–Beerova zákona

Příklady

- 7 Proveďte rozměrovou analýzu z výše odvozené rovnice pro molární plynovou konstantu a odvoďte její jednotky za použití vztahů pro tlak a práci

$$Pa = \frac{N}{m^2}$$

$$J = Nm$$

$$R = \frac{Pa \times m^3}{mol \times K}$$

$$R = \frac{\frac{N}{m^2} \times m^3}{mol \times K}$$

$$R = \frac{\frac{N}{\cancel{m}} \times \cancel{m}}{mol \times K}$$

$$R = \frac{J}{mol \times K}$$

- 8 Vyjádřete rovnicí vztah molárního absorpčního koeficientu a ostatních veličin z Lambertova–Beerova zákona

$$A = \varepsilon cl$$

$$\varepsilon = \frac{A}{cl}$$

Příklady

- 9 Proveďte rozměrovou analýzu z výše odvozené rovnice pro molární absorpční koeficient a určete tak jeho jednotky
- 10 Vyjádřete rovnicí vztah teploty a rovnovážné konstanty/reakční Gibbsovy energie/molární plynové konstanty
- 11 Vyjádřete rovnicí vztah koncentrace hydroxidových iontů a pH

Příklady

- 9 Proved'te rozměrovou analýzu z výše odvozené rovnice pro molární absorpční koeficient a určete tak jeho jednotky

$$\varepsilon = \frac{1}{\text{mol} \times \text{dm}^{-3} \times \text{cm}}$$
$$\varepsilon = \text{mol}^{-1} \times \text{dm}^3 \times \text{cm}^{-1}$$

- 10 Vyjádřete rovnicí vztah teploty a rovnovážné konstanty/reakční Gibbsovy energie/molární plynové konstanty

$$\Delta G = RT \ln K$$

$$T = \frac{\Delta G}{R \ln K}$$

- 11 Vyjádřete rovnicí vztah koncentrace hydroxidových iontů a pH

$$\text{pOH} = -\log[\text{OH}] = 14 - \text{pH}$$

$$[\text{OH}] = 10^{\text{pH}-14}$$

Grafy

- 1 Nakreslete závislost látkové koncentrace na látkovém množství
- 2 Nakreslete závislost látkové koncentrace na objemu roztoku
- 3 Nakreslete závislost tlaku na teplotě ze stavové rovnice ideálního plynu
- 4 Nakreslete závislost tlaku na objemu plynu ze stavové rovnice ideálního plynu
- 5 Nakreslete závislost rychlostní konstanty na aktivační energii z Arrheniovy rovnice
- 6 Nakreslete závislost absorbance na koncentraci z Lambertova–Beerova zákona
- 7 Nakreslete závislost rychlosti reakce na koncentraci reaktantu, který se řídí kinetikou nultého řádu

Grafy

- 1 Nakreslete závislost látkové koncentrace na látkovém množství
→ lineární funkce $c \simeq n$
- 2 Nakreslete závislost látkové koncentrace na objemu roztoku
→ lomená funkce $c \simeq \frac{1}{V}$
- 3 Nakreslete závislost tlaku na teplotě ze stavové rovnice
ideálního plynu → lineární funkce $p \simeq T$
- 4 Nakreslete závislost tlaku na objemu plynu ze stavové rovnice
ideálního plynu → lomená funkce $p \simeq \frac{1}{V}$
- 5 Nakreslete závislost rychlostní konstanty na aktivační energii z
Arrheniovy rovnice → klesající exponenciála $k \simeq e^{-E_a}$
- 6 Nakreslete závislost absorbance na koncentraci z
Lambertova–Beerova zákona → lineární funkce $A \simeq c$
- 7 Nakreslete závislost rychlosti reakce na koncentraci reaktantu,
který se řídí kinetikou nultého řádu → konstanta $r = k$