

---

# Obsah

PŘEDMLUVA . . . . .	9
JEDNOTKY SI . . . . .	11
1 STRUKTURNÍ TEORIE . . . . .	13
1.1 Struktura molekuly; geometrie a topologie . . . . .	13
1.2 Postup při stanovení struktury . . . . .	22
1.3 Symetrie molekuly a symetrie krystalové mřížky . . . . .	24
1.4 Problémy konstituce . . . . .	37
1.5 Problémy konfigurace . . . . .	47
1.6 Problémy konformace . . . . .	56
1.7 Elektronová struktura; rezonance a mezomerie . . . . .	65
1.8 Struktura látky a struktura fáze . . . . .	76
1.9 Stabilita a existence molekul a látek . . . . .	79
1.10 Úkoly strukturní teorie . . . . .	89
2 KLASIFIKACE FYZIKÁLNÍCH VLASTNOSTÍ . . . . .	92
2.1 Závislost fyzikálních vlastností na struktuře . . . . .	92
2.2 Přehled interakcí záření a hmoty . . . . .	95
3 VLASTNOSTI PODMÍNĚNÉ POLOHOU ATOMOVÝCH JADER . . . . .	102
3.1 Význam vazebných délek a úhlů . . . . .	102
3.2 Rentgenová strukturní analýza krystalů . . . . .	104
3.3 Neutronová difrakce . . . . .	108
3.4 Elektronová difrakce . . . . .	108
3.5 Mikrovlnná spektroskopie . . . . .	111
3.6 Vlastností molekuly jako celku . . . . .	115
4 VLASTNOSTI PODMÍNĚNÉ DISLOKACÍ ATOMOVÝCH JADER . . . . .	117
4.1 Vibrace jader a silové konstanty vazeb . . . . .	117
4.2 Vibrační spektra polyatomických molekul . . . . .	120
4.3 Infračervená spektroskopie . . . . .	126
4.4 Ramanova spektroskopie . . . . .	130
4.5 Tepelná kapacita a atomová polarizace . . . . .	132
4.6 Vazebná a disociační energie . . . . .	134
5 VLASTNOSTI PODMÍNĚNÉ POLOHOU ELEKTRONŮ . . . . .	137
5.1 Dipólový moment . . . . .	137

5.2	Kvadrupólový moment . . . . .	144
5.3	Magnetické vlastnosti molekul . . . . .	145
5.4	Magnetická susceptibilita . . . . .	150
5.5	Elektronová spinová rezonance . . . . .	151
5.6	Nukleární magnetická rezonance . . . . .	157
5.7	Nukleární kvadrupólová rezonance . . . . .	169
5.8	Mössbauerova spektroskopie . . . . .	171
6	<b>VLASTNOSTI PODMÍNĚNÉ ZMĚNAMI ELEKTRONOVÉ HUSTOTY</b>	173
6.1	Polarizovatelnost a molární refrakce . . . . .	173
6.2	Anizotropie polarizovatelnosti . . . . .	176
6.3	Ultrafialová a viditelná spektroskopie . . . . .	180
6.4	Fluorescence a fosforescence . . . . .	188
6.5	Optické jevy vyvolané polarizovaným světlem . . . . .	190
6.6	Optická aktivita . . . . .	192
6.7	Optická rotační disperze . . . . .	194
6.8	Cirkulární dichroismus . . . . .	197
6.9	Magnetooptické vlastnosti . . . . .	199
6.10	Ionizační energie a elektronová afinita . . . . .	201
6.11	Spektra přenosu náboje (spektra CT) . . . . .	202
6.12	Varianty fotoelektronové spektroskopie . . . . .	204
7	<b>VLASTNOSTI KAPALNÉ FÁZE</b> . . . . .	211
7.1	Polarita kapalin . . . . .	211
7.2	Hustota a ostatní mechanické vlastnosti . . . . .	212
7.3	Termické veličiny . . . . .	214
7.4	Optické veličiny . . . . .	215
7.5	Elektrické a magnetické veličiny . . . . .	216
7.6	Fyzikálně chemické veličiny . . . . .	217
8	<b>VLASTNOSTI KRYŠTALICKÉ FÁZE</b> . . . . .	218
8.1	Základní vlastnosti krystalů . . . . .	218
8.2	Bod tání . . . . .	218
8.3	Fyzikálně chemické veličiny . . . . .	222
9	<b>CHEMICKÉ VLASTNOSTI</b> . . . . .	223
9.1	Rovnovážné a rychlostní konstanty . . . . .	223
9.2	Disociační konstanty Brønstedových kyselin . . . . .	225
9.3	Lewisovy kyseliny . . . . .	236
9.4	Ostatní termodynamické veličiny . . . . .	237
9.5	Relaxační metody . . . . .	239
9.6	Jiné metody sledování reakcí . . . . .	241
9.7	Hmotnostní spektrometrie . . . . .	242
9.8	Elektrochemické veličiny . . . . .	250

10	STRATEGIE URČOVÁNÍ STRUKTURY . . . . .	255
10.1	Úkol a prostředky . . . . .	255
10.2	Identifikace známé látky . . . . .	256
10.3	Určování struktury neznámé látky . . . . .	257
10.4	Zpřesnění známé struktury . . . . .	262
LITERATURA . . . . .		263
REJSTRÍK . . . . .		268