

	str.
I. ÚVOD .....	3
II. ATOMOVÁ SPEKTROSKOPIE .....	8
II.1. Spektra a energetické hladiny atomů .....	8
II.1.1. Podstata atomových spekter .....	8
II.1.2. Energetické hladiny atomu vodíku a spektrum vodíku .....	8
II.1.3. Vlnová mechanika a kvantová čísla elektronů.....	11
II.1.4. Spin-orbitální interakce.....	14
II.1.5. Energetické hladiny atomů s více elektrony. Russellove - -Saundersovo schema a jj schema .....	15
II.1.6. Spektroskopické termy a jejich symbolika. Multiplicita termů..	18
II.1.7. Výběrová pravidla a dovolené přechody ve spektrech .....	20
II.1.8. Spektra některých atomů .....	22
II.1.8.1. Spektrum vodíku .....	22
II.1.8.2. Spektrum alkaliických kovů .....	23
II.1.8.3. Spektrum helia .....	24
II.1.9. Energetické hladiny a spektra atomů v přítomnosti magnetické- ho pole. Normální a anomální Zeemanův jev.....	26
II.1.10. Velmi jemné štěpení spektrálních čar .....	29
II.1.11. Šířka a intenzita spektrálních čar .....	29
II.2. Atomová optická spektrální analýza .....	31
II.2.1. Princip metody .....	31
II.2.2. Instrumentace při optické emisní spektrální analýze .....	32
II.2.3. Aplikace emisní spektrální analýzy .....	36
II.2.4. Flamenová emisní fotometrie .....	40
II.3. Atomová absorpční a fluorescenční spektrometrie .....	41
II.3.1. Princip atomové absorpční spektrometrie .....	41
II.3.2. Instrumentace atomové absorpční spektrometrie .....	42
II.3.3. Měření a vyhodnocování; aplikace atomové absorpční spektro- metrie .....	47
II.3.4. Atomová fluorescenční spektrometrie .....	48
III. MOLEKULOVÁ SPEKTROSKOPIE .....	50
III.1. Rozdělení metod .....	50
III.2. Absorpční spektroskopie v ultrafialové a viditelné oblasti .....	54
III.2.1. Podstata a charakter spekter v ultrafialové a viditelné oblasti .....	54
III.2.1.1. Molekulové orbitály .....	54
III.2.1.2. Symbolika a členění molekulových orbitalů .....	55
III.2.1.3. Multiplicita termů; elektronické stavy molekul ...	57
III.2.1.4. Typy elektronických přechodů v molekulách a jejich projevy ve spektrech .....	59
III.2.1.5. Chemická teorie barevnosti - chromofory a auxochromy .....	60
III.2.1.6. Tvar a vibrační struktura absorpčních pásů. Franckův - Condonův princip a vibronické přechody.....	61
III.2.1.7. Výběrová pravidla; intenzita absorpčních pásů .....	63
III.2.2. Elektronická spektra důležitých tříd látek .....	65
III.2.2.1. Alifatické nenasycené uhlovodíky .....	65
III.2.2.2. Deriváty alifatických uhlovodíků .....	69
III.2.2.3. Aromatické uhlovodíky, jejich heteroanaloga a substituční deriváty .....	71
III.2.2.4. Organická barviva .....	75
III.2.2.5. Anorganické ionty a komplexy kovů .....	76
III.2.2.6. Spektra přenosu náboje ( charge-transfer).....	77



III.2.3.	Vnitřní a vnější efekty ovlivňující elektronická spektra ...	78
III.2.3.1.	Ovlivnění spekter sterickými efekty .....	78
III.2.3.2.	Ovlivnění spekter tautomerními rovnováhami .....	79
III.2.3.3.	Vliv pH na elektronická spektra .....	79
III.2.3.4.	Vliv rozpouštědel na elektronická spektra .....	80
III.2.4.	Empirické výpočty elektronických spekter .....	81
III.2.5.	Instrumentace při spektroskopii v ultrafialové a viditelné oblasti .....	84
III.2.6.	Použití spektroskopie v ultrafialové a viditelné oblasti ...	86
III.2.6.1.	Určování struktury organických látek .....	86
III.2.6.2.	Kvalitativní analýza .....	86
III.2.6.3.	Kvantitativní analýza .....	87
III.2.6.4.	Sledování chemických rovnováh a kinetiky chemických reakcí .....	89
III.2.7.	Příklady .....	90
III.3.	Luminiscenční spektroskopie .....	93
III.3.1.	Podstata luminiscence .....	93
III.3.2.	Fluorescenční spektroskopie .....	94
III.3.2.1.	Teoretické principy .....	94
III.3.2.2.	Souvislost fluorescence s chemickou strukturou látek .....	97
III.3.2.3.	Instrumentace a pracovní technika při měření fluorescence .....	99
III.3.2.4.	Aplikace měření fluorescence .....	100
III.3.3.	Fosforescence a její měření .....	101
III.4.	Infračervená spektroskopie .....	102
III.4.1.	Podstata a charakter infračerveného spektra .....	102
III.4.1.1.	Molekulové vibrace a vznik vibračních spekter ...	102
III.4.1.2.	rotační hladiny molekul a rotační spektra .....	106
III.4.1.3.	Vznik rotačně-vibračních spekter v důsledku interakcí molekulových rotací a vibrací .....	108
III.4.1.4.	Výběrová pravidla a intenzita absorpčních pásů v infračervených spektrech .....	109
III.4.2.	Vibrační frekvence a vlastnosti molekul .....	110
III.4.3.	Faktory ovlivňující charakteristické vibrace .....	112
III.4.3.1.	Vliv skupenství a rozpouštědla .....	112
III.4.3.2.	Vliv vodíkové vazby .....	113
III.4.3.3.	Vliv hmotnosti atomů .....	114
III.4.3.4.	Elektrické vlivy .....	114
III.4.3.5.	Sterické vlivy, pnutí kruhu, konformace .....	115
III.4.3.6.	Vibrační interakce (vibrační spřažení) .....	116
III.4.4.	Infračervená spektra organických látek .....	117
III.4.5.	Instrumentace a pracovní technika při infračervené spektroskopii .....	123
III.4.5.1.	Přístroje .....	123
III.4.5.2.	Technika snímání spekter .....	126
III.4.6.	Vyhodnocování spekter a aplikace infračervené spektroskopie .....	129
III.4.7.	Příklady .....	127
III.5.	Ramanova spektroskopie .....	133
III.5.1.	Podstata a charakter Ramanových spekter .....	133
III.5.2.	Instrumentace, pracovní technika a použití Ramanovy spektroskopie .....	135
III.6.	Mikrovlnná spektroskopie .....	137
IV.	MAGNETICKÁ REZONANČNÍ SPEKTROSKOPIE .....	138
IV.1.	Spektroskopie nukleární magnetické rezonance .....	138



IV.1.1.	Podstata NMR - spekter .....	str. 138
IV.1.2.	Chemický posun .....	144
IV.1.3.	Intenzita rezonančních signálů .....	147
IV.1.4.	Štěpení NMR-signálů. NMR-spektra 1.řádu.....	148
IV.1.5.	Spinové systémy a NMR-spektra vyšších řádů .....	152
IV.1.6.	Zjednodušování složitých spekter vyšších řádů. Dvojnásobná rezonance .....	155
IV.1.7.	Vliv chemické výměny na NMR-spektra .....	156
IV.1.8.	Instrumentace a pracovní technika při NMR-spektroskopii .....	156
IV.1.9.	Vyhodnocování a interpretace $^1\text{H}$ NMR-spekter.....	158
IV.1.10.	NMR-spektra jader těžších atomů. $^{13}\text{C}$ NMR-spektroskopie .....	159
IV.1.11.	Použití NMR-spektroskopie .....	161
IV.2.	Spektroskopie elektronové paramagnetické rezonance (EPR) .....	163
IV.3.	Příklady.....	165
V.	HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE .....	168
V.1.	Princip hmotnostní spektrometrie .....	168
V.2.	Instrumentace při hmotnostní spektrometrii .....	168
V.2.1.	Analyzátory .....	169
V.2.1.1.	Rozlišovací schopnost hmotnostních spektrometrů .....	169
V.2.1.2.	Magnetické analyzátory s jednoduchou fokusací .....	169
V.2.1.3.	Přístroje s dvojitou fokusací .....	170
V.2.1.4.	Kvadruplové hmotnostní filtry .....	172
V.2.1.5.	Ostatní analyzátory .....	173
V.2.2.	Iontové zdroje .....	174
V.2.2.1.	Ionizace nárazem elektronu ( electron impact, EI )....	174
V.2.2.2.	Chemická ionizace ( chemical ionization, CI. ) .....	175
V.2.2.3.	Ostatní způsoby ionizace .....	175
V.2.3.	Zavádění vzorků do hmotnostního spektrometru .....	175
V.2.4.	Detekce a registrace separovaných iontů, normalizace a dokumentace registrovaných hmotnostních spekter.....	176
V.2.5.	Spojení hmotnostní spektrometrie s plynovou a kapalinovou chromatografií.....	178
V.3.	Fragmentace iontů .....	180
V.3.1.	Fragmentační mechanismy a způsoby jejich studia.....	180
V.3.2.	Fragmentace některých tříd organických sloučenin.....	181
V.4.	Interpretace hmotnostních spekter a využití hmotnostní spektrometrie..	182
V.4.1.	Stanovení molekulové hmotnosti; M+1 a M+2 píky.....	182
V.4.2.	Určení sumárního ( empirického ) vzorce látky z hmotnostních spekter .....	183
V.4.3.	Využití hmotnostních spekter pro identifikaci a strukturní analýzu organických látek.....	185
V.4.4.	Využití hmotnostních spekter v kvantitativní analýze a některé speciální aplikace hmotnostní spektrometrie .....	186
V.5.	Příklady .....	187
VI.	SPEKTRÁLNÍ METODY V OBLASTI RENTGENOVÉHO ZÁŘENÍ A ZÁŘENÍ $\gamma$ A METODY ZALOŽENÉ NA VYUŽITÍ ELEKTRONOVÝCH PAPSŘKŮ.....	190
VI.1.	Rozdělení metod .....	190
VI.2.	Rentgenová absorpční, emisní a fluorescenční analýza .....	191
VI.2.1.	Vznik rentgenového záření a rentgenové emisní spektrum.....	191
VI.2.2.	Absorpce rentgenového záření .....	193
VI.2.3.	Rentgenová fluorescenční spektrometrie .....	194
VI.2.3.1.	Princip metody .....	194
VI.2.3.2.	Experimentální technika, instrumentace .....	195
VI.2.3.3.	Použití rentgenové fluorescenční spektrometrie.....	199

	str.
VI.3. Elektronová mikroanalýza .....	199
VI.4. Fotoelektronová spektroskopie .....	201
VI.5. Augerova elektronová spektroskopie .....	204
VI.6. Mössbauerova spektrometrie .....	205
VI.6.1. Podstata Mössbauerova jevu a vznik Mössbauerových spekter.	205
VI.6.2. Experimentální technika při měření Mössbauerových spekter.	207
VI.6.3. Vztah Mössbauerova spektra ke struktuře látek .....	207
VI.6.4. Využití mössbauerovy spektrometrie .....	208
VII. PŘÍKLADY KOMPLEXNÍHO VYUŽITÍ SPEKTRÁLNÍCH METOD K URČOVÁNÍ	
STRUKTURY LÁTEK .....	209
TABULKY .....	214