

1. Struktura atomů	15
1.1. Raný vývoj atomistického pojetí hmoty	15
1.2. Elektron	19
1.2.1. Specifický náboj katodových částic	21
1.2.2. Náboj elektronu	23
1.2.3. Hmota elektronu	24
1.2.4. Avogadrovo číslo	24
1.3. Jádro	25
1.3.1. Radioaktivita (a indikátory radioaktivního záření)	25
1.3.2. Rozptyl částic α a jaderný model atomu	28
1.3.3. Atomové číslo	29
1.3.4. Radioaktivní řady, isotopy	30
1.3.5. Hmotová spektrografie	33
1.3.6. Dělení isotopů	39
1.3.7. Umělá přeměna jader	42
1.3.8. Urychlovače nabitých částic	44
1.3.9. Detektory jaderného záření	46
1.3.10. Neutron	46
1.3.11. Positron	48
1.3.12. Neutrino	49
1.3.13. Proton-neutronový model jádra	49
1.3.14. Hmota a energie	51
1.3.14.1. Energetika jaderných reakcí	53
1.3.14.2. Stabilita jader — vazebná energie	55
1.3.14.3. Výtěžek jaderných reakcí	57
1.3.14.4. Typy jaderných přeměn	59
1.3.14.5. Umělá radioaktivita	61
1.3.14.6. Použití radioaktivních isotopů	65
1.3.14.7. Štěpení atomového jádra	67
1.3.14.8. Technické využití atomové energie	70
1.3.14.9. Transuranidy	71
1.3.14.10. Termonukleární reakce	72
1.3.15. Mesony a další elementární částice	73
1.3.16. Energetické stavy jader	77
1.3.17. Jaderný spin a magnetický moment jádra	79
1.3.18. Teorie jádra	82
1.4. Mimojaderná oblast atomu	83
1.4.1. Kvantový charakter záření	83
1.4.1.1. Světlo, elektromagnetické záření	83
1.4.1.2. Radiační zákony. Kvantová teorie	85

1.4.1.3.	Fotoelektrický jev	89
1.4.1.4.	Hmota fotonu	91
1.4.2.	Stacionární energetické stavy	92
1.4.2.1.	Spektrum vodíku	92
1.4.2.2.	Bohrův model vodíkového atomu	93
1.4.2.3.	Franckovy a Hertzovy pokusy. Ionizační potenciál	98
1.4.3.	Částice a vlny	99
1.4.3.1.	De Broglieovy vlny	99
1.4.3.2.	Experimenty svědčící o existenci de Broglieových vln	101
1.4.3.3.	Fázová a grupová rychlost de Broglieových vln	103
1.4.4.	Princip neurčitosti	105
1.4.5.	Kvantová mechanika	106
1.4.5.1.	Rovnice struny	107
1.4.5.2.	Schrödingerova rovnice	109
1.4.5.3.	Fyzikální interpretace funkce ψ	110
1.4.5.4.	Aplikace vlnové rovnice	112
a)	Volná částice	112
b)	Částice v krabici	113
	Jednorozměrná soustava	113
	Trojrozměrná soustava	114
c)	Lineární harmonický oscilátor	116
d)	Tuhý rotor	118
e)	Vodíkový atom	121
f)	Spin elektronu	124
1.4.6.	Pauliho princip. Uspořádání elektronů v atomech a periodická soustava prvků	125
1.4.7.	Spektra atomů.	130
1.4.7.1.	Spektra alkalických kovů	130
1.4.7.2.	Spektra atomů s více optickými elektrony	133
1.4.7.3.	Spektroskopické značení energetických hladin	134
1.4.7.4.	Zeemanův a Starkův efekt	134
Literatura		135
2.	Struktura molekul	137
2.1.	Chemická vazba	137
2.1.1.	Vývoj teorií chemické vazby	137
2.1.2.	Kvantové teorie chemické vazby	138
2.1.2.1.	Metoda valenční vazby	138
2.1.2.2.	Metoda molekulárních orbitů.	141
2.1.2.3.	Nasytitelnost chemické vazby	142
2.1.2.4.	Spinová valence	143
2.1.2.5.	Směr vazeb a hybridisace	144
2.1.2.6.	Lokalisované a nelokalisované vazby	145
2.1.2.7.	Resonance	146
2.1.2.8.	Vodíková vazba	147
2.2.	Elektrické vlastnosti molekul	149
2.2.1.	Dielektrická konstanta, polarisace a dipólový moment	149
2.2.2.	Clausiova-Mosottiho rovnice	150
2.2.3.	Debyeova teorie. Stanovení dipólového momentu z teplotní závislosti molární polarisace	152

2.2.4.	Molární refrakce	156
2.2.5.	Stanovení diplových momentů z indexů lomu a dielektrických konstant kapalných směsí	157
2.2.6.	Onsagerova a Kirkwoodova teorie	158
2.3.	Magnetické vlastnosti molekul	159
2.3.1.	Magnetická permeabilita, magnetická susceptibilita, molární magnetická susceptibilita	159
2.3.2.	Jaderná magnetická resonance	161
2.4.	Difrakce elektronů a rentgenových paprsků plynnými molekulami	161
2.5.	Molekulární spektra	164
2.5.1.	Úvod	164
2.5.2.	Rotační spektra. Výpočet mezijaderných vzdáleností	165
2.5.3.	Vibrační spektra	168
2.5.4.	Elektronická pásová spektra. Franckův-Condonův princip	169
2.5.5.	Ramanova spektra	170
2.5.6.	Mikrovlnná spektroskopie	171
2.5.7.	Molekulární spektroskopie a chemická konstituce	172
	Literatura	173
3.	Chemická statistika	175
3.1.	Úvod	175
3.2.	Kinetická teorie ideálního plynu	176
3.2.1.	Tlak plynu a hybnost molekul	176
3.2.2.	Teplota plynu a střední kinetická energie molekul	179
3.2.3.	Rozdělení molekulárních rychlostí	180
3.2.3.1.	Rozdělovací funkce a rychlostní prostor	180
3.2.3.2.	Rovnovážné rozdělení rychlostí	182
3.2.3.3.	Střední hodnoty molekulárních rychlostí	184
3.2.3.4.	Průměrná relativní rychlost molekul	185
3.2.3.5.	Měření molekulárních rychlostí — pokusné ověření Maxwelllova rozdělení rychlostí	186
3.2.4.	Rozdělení energie	187
3.2.5.	Mezimolekulární srážky	188
3.2.5.1.	Srážkový průměr a střední volná dráha	188
3.2.5.2.	Četnost mezimolekulárních srážek	190
3.2.6.	Transportní jevy	191
3.2.6.1.	Přenos molekulární veličiny	191
3.2.6.2.	Viskozita plynů	193
3.2.6.3.	Vedení tepla v plynech	195
3.2.6.4.	Difúze v plynech	197
3.2.6.5.	Molekulární efúze a transpirace	199
3.2.6.6.	Termodifúze	201
3.2.7.	Energie některých molekulárních modelů	201
3.2.7.1.	Ekvipartiční princip	201
3.2.7.2.	Tuhý rotor a harmonický oscilátor	202
3.2.7.3.	Molární tepla plynů a meze platnosti ekvipartičního principu	204
3.3.	Základy statistické mechaniky	206
3.3.1.	Termodynamický stav a možné kvantové stavy systému	206
3.3.2.	Ensembley a základní postuláty	207
3.3.3.	Kanonický ensemble	208

3.3.4.	Statistické analogy termodynamických funkcí	212
3.3.5.	Výpočet termodynamických vlastností ideálního plynu	218
3.3.5.1.	Translační partiční funkce	220
3.3.5.2.	Rotační partiční funkce	222
3.3.5.3.	Vibrační partiční funkce	223
3.3.6.	Výpočet termodynamických vlastností ideálního krystalu	228
3.3.6.1.	Einsteinova aproximace	228
3.3.6.2.	Debyeova aproximace	230
Literatura		233
4.	Elektrochemie	235
4.1.	Úvod	235
4.1.1.	Základní elektrochemické pojmy	235
4.1.2.	Faradayovy zákony	236
4.1.3.	Coulometry	238
4.1.3.1.	Coulometr na stříbro	238
4.1.3.2.	Coulometr na jod	239
4.1.3.3.	Coulometr na třaskavý plyn	239
4.2.	Elektrolytický převod	240
4.2.1.	Hittorfova převodová čísla	240
4.2.2.	Experimentální stanovení převodových čísel	243
4.2.2.1.	Hittorfova metoda	243
4.2.2.2.	Metoda pohyblivého rozhraní	244
4.2.3.	Hodnoty převodových čísel	245
4.2.4.	Hydratace (solvatace) iontů	245
4.2.5.	Převodová čísla a komplexní ionty	247
4.3.	Elektrolytická vodivost	247
4.3.1.	Definice a jednotky	247
4.3.2.	Měření elektrolytické vodivosti	248
4.3.3.	Ekvivalentová vodivost a Kohlrauschův zákon	250
4.3.4.	Klasická teorie elektrolytické disociace	252
4.3.5.	Pohyblivost iontů	255
4.3.6.	Závislost vodivosti roztoků elektrolytů na teplotě a tlaku	258
4.3.7.	Abnormální chování vodíkových a hydroxylových iontů	259
4.3.8.	Elektrolytická vodivost v nevodných prostředích	260
4.3.9.	Aplikace vodivostních měření	261
4.3.9.1.	Stanovení rozpustnosti	261
4.3.9.2.	Stanovení koncentrace vodíkových iontů v čisté vodě	262
4.3.9.3.	Použití v analytice — konduktometrická titrace	262
4.4.	Teorie meziiontového působení	264
4.4.1.	Iontová atmosféra	264
4.4.2.	Elektrický potenciál v okolí centrálního iontu	265
4.4.3.	Mezní zákon elektrolytické vodivosti	270
4.4.3.1.	Viskosní efekt	270
4.4.3.2.	Elektroforetický efekt	271
4.4.3.3.	Asymetrický (relaxační) efekt	272
4.4.3.4.	Debyeova, Hückelova a Onsagerova rovnice	273
4.4.4.	Vodivost roztoků elektrolytů při vysokém napětí a vysoké frekvenci	275
4.5.	Termodynamika roztoků elektrolytů	276
4.5.1.	Zředěný roztok jako referenční soustava	276

4.5.2.	Racionální, praktická a molaritní aktivita složky	277
4.5.3.	Aktivita a aktivitní koeficienty iontů	280
4.5.3.1.	Experimentální stanovení aktivitních koeficientů složek v roztocích elektrolytů	287
	a) Metoda snížení bodu tuhnutí	287
	b) Aktivitní koeficienty z měření rozpustnosti	292
4.5.3.2.	Iontová síla	294
4.5.3.3.	Aktivitní koeficienty iontů a teorie meziiontového působení	297
4.6.	Galvanické články	301
4.6.1.	Elektromotorická síla článku	301
4.6.2.	Měření elektromotorické síly článku	302
4.6.3.	Závislost elektromotorické síly článku na stavových proměnných	303
4.6.3.1.	Nernstova rovnice	303
4.6.3.2.	Závislost elektromotorické síly článku na tlaku a teplotě	309
4.6.4.	Potenciály elektrod	311
4.6.4.1.	Konvence o značení článků a o znaménku elektromotorické síly a elektrodových potenciálů	311
4.6.4.2.	Základní typy elektrod	315
4.6.5.	Rozdělení galvanických článků	320
4.6.5.1.	Koncentrační články	320
	a) Koncentrační články elektrodové	320
	b) Koncentrační články s převodem	321
	c) Difusní potenciál	322
	d) Koncentrační články bez převodu	324
4.6.5.2.	Články chemické	325
4.6.6.	Aplikace potenciometrických měření	327
4.6.6.1.	Určení změn termodynamických funkcí	327
4.6.6.2.	Určení součinu rozpustnosti	328
4.6.6.3.	Měření pH.	330
	a) Vodíková elektroda	331
	b) Chinhynonová elektroda	332
	c) Antimonová elektroda	334
	d) Skleněná elektroda	335
4.6.6.4.	Potenciometrické titrace	336
	a) Potenciometrické titrace srážecí	337
	b) Potenciometrické titrace neutralizační	337
	c) Potenciometrické titrace oxidačně redukční	339
4.7.	Rovnováhy v roztocích slabých elektrolytů	340
4.7.1.	Kyseliny a zásady	340
4.7.2.	Bronstedovo pojetí kyselin a zásad	341
4.7.2.1.	Protolytické reakce ve vodném a nevodném prostředí	342
4.7.2.2.	Neutralisace a hydrolysa	346
4.7.2.3.	Amfoterní elektrolyty	348
4.7.2.4.	Isoelektrický bod	350
4.7.3.	Tlumičí směsi (puřry)	351
4.7.4.	Indikátory	356
4.7.4.1.	Neutralizační indikátory	356
4.7.4.2.	Kolorimetrická stanovení pH.	360
4.7.4.3.	Speciální indikátory	360
4.8.	Polarisace, přepětí, pasivita	360

4.8.1.	Koncentrační polarisace	361
4.8.2.	Chemická polarisace, rozkladné napětí	362
4.8.3.	Akumulátory	364
4.8.3.1.	Olověný akumulátor	364
4.8.3.2.	Edisonův akumulátor	364
4.8.4.	Polarografie	365
4.8.5.	Přepětí	369
4.8.5.1.	Přepětí vodíku	370
4.8.5.2.	Přepětí kyslíku	372
4.8.6.	Pasivita	373
	Literatura	374
5.	Chemická kinetika	377
5.1.	Úvod	377
5.2.	Závislost reakční rychlosti na koncentraci reagujících látek	379
5.2.1.	Zákon o působení hmot	379
5.2.2.	Řád a molekularita reakce	381
5.2.3.	Reakce prvního řádu	382
5.2.4.	Reakce druhého řádu	384
5.2.5.	Přechod reakce druhého řádu na kinetiku prvního řádu	387
5.2.6.	Reakce třetího řádu	387
5.2.7.	Obecný případ a reakce necelistvých řádů	388
5.3.	Závislost reakční rychlosti na teplotě	389
5.3.1.	van't Hoffovo pravidlo	389
5.3.2.	Arrheniova rovnice	390
5.3.3.	Fyzikální výklad Arrheniovy rovnice	393
5.4.	Postup kinetické analýzy — určení řádu a rychlostní konstanty	394
5.4.1.	Experimentální uspořádání	394
5.4.2.	Zpracování dat získaných ve statickém uspořádání	396
5.4.2.1.	Reakce v uzavřených soustavách	396
5.4.2.2.	Určení řádu integrální metodou	396
5.4.2.3.	Určení řádu diferenciální metodou	398
5.4.2.4.	Určení řádu reakce z poločasu	400
5.4.2.5.	Řád reakce vzhledem k jednotlivým složkám	401
5.4.3.	Zpracování dat získaných v průtokovém uspořádání	402
5.4.3.1.	Hmotná bilance v průtokových soustavách	402
5.4.3.2.	Rovnice integrální přeměny v průtokových soustavách	403
5.4.3.3.	Určení řádu reakce integrální metodou	404
5.4.3.4.	Určení řádu reakce diferenciální metodou	407
5.4.4.	Přímé měření reakční rychlosti	407
5.4.4.1.	Diferenciální reaktor	408
5.4.4.2.	Průtokový reaktor míchaný	408
5.5.	Simultánní reakce	409
5.5.1.	Několik reakcí současně probíhajících	409
5.5.2.	Souběžné reakce	409
5.5.3.	Protisměrné reakce	413
5.5.4.	Následné reakce	418
5.5.5.	Řešení schémat s nestálými meziprodukty	424
5.6.	Teorie chemické kinetiky	426
5.6.1.	Úkol teorie chemické kinetiky	426

5.6.2.	Srážková teorie chemické kinetiky	426
5.6.3.	Reakční rychlost jako počet účinných srážek	427
5.6.4.	Pokusné ověření srážkové teorie	429
5.6.5.	Sterický faktor	430
5.6.6.	Teorie absolutních reakčních rychlostí	431
5.6.6.1.	Aktivovaný komplex	431
5.6.6.2.	Eyringova rovnice	432
5.6.6.3.	Energie a struktura aktivovaného komplexu	434
a)	Potenciální energie soustavy tří částic	434
b)	Semiempirická metoda	435
c)	Potenciálová plocha a reakční cesta	435
d)	Vlastnosti aktivovaného komplexu	437
5.6.6.4.	Transmisní koeficient	438
5.6.6.5.	Eyringovo odvození rovnice (5-164)	438
5.6.6.6.	Reakce mezi dvěma atomy: příklad výpočtu frekvenčního faktoru	441
5.6.6.7.	Reakce mezi dvěma molekulami: srovnání s kolísací teorií	442
5.6.6.8.	Termodynamika aktivacíního pochodu	443
5.7.	Jednoduché reakce molekul	445
5.7.1.	Bimolekulární reakce	445
5.7.2.	Trimolekulární reakce	448
5.7.3.	Monomolekulární reakce	450
5.7.3.1.	Lindemannův mechanismus	450
5.7.3.2.	Přenos energie mezi molekulami	452
5.7.3.3.	Aktivace v několika stupních volnosti	453
5.7.3.4.	Lokalisace aktivací energie	455
5.7.3.5.	Teorie absolutních reakčních rychlostí	455
5.8.	Reakční mechanismy	457
5.8.1.	Úvod	457
5.8.2.	Tvorba bromovodíku — příklad podrobného rozboru mechanismu	458
5.8.2.1.	Výsledky pokusů	459
5.8.2.2.	Návrh reakčního schématu	459
5.8.2.3.	Ověření mechanismu	460
5.8.2.4.	Rychlostní konstanty a aktivací energie elementárních kroků	461
5.8.3.	Zásada energeticky nejuvhodnější cesty — srovnání tvorby HBr a HJ	462
5.8.4.	Tvorba chlorovodíku — prototyp řetězové reakce	463
5.8.5.	Rozklad ethanu — Riceovy a Herzfeldovy mechanismy	465
5.8.6.	Experimentální vyšetření řetězových reakcí	467
5.9.	Reakce atomů a volných radikálů	469
5.9.1.	Zdroje atomů a volných radikálů	469
5.9.2.	Indikace a stanovení volných radikálů	472
5.9.2.1.	Reakce s kovovými zrcadly a s jinými látkami	472
5.9.2.2.	Para-ortho konverze vodíku	473
5.9.2.3.	Sledování radikálů fyzikálními metodami	473
5.9.3.	Uspořádání radikálových reakcí	474
5.9.3.1.	Metoda difusních plamenů	475
5.9.3.2.	Fotolytické metody — reakce methylradikálů	476
5.9.3.3.	Reakce v proudu toluenu	477
5.9.4.	Vazebné energie	477
5.9.4.1.	Termochemická data	478
5.9.4.2.	Fotobromace methanu	478

5.9.4.3.	Pyrolytické reakce	479
5.9.4.4.	Metoda elektronových rázů	479
5.9.4.5.	Termochemie volných radikálů	480
5.9.5.	Aktivační energie a frekvenční faktory některých radikálových reakcí	481
5.10.	Oxydace v plynné fázi	483
5.10.1.	Autooxydace	483
5.10.2.	Vznik explozí a tlakové meze výbušnosti	484
5.10.3.	Reakce mezi vodíkem a kyslíkem	485
5.10.4.	Koncentrační hranice zápalnosti	486
5.10.5.	Rychlost plamenů	487
5.10.6.	Detonace	489
5.10.7.	Teplota a záření plamenů	490
5.10.8.	Oxydace uhlovodíků	491
5.11.	Vliv prostředí na reakční rychlost	493
5.11.1.	Úvod	493
5.11.2.	Reakční rychlost a aktivitní koeficienty	494
5.11.3.	Aktivitní koeficienty dipólu	495
5.11.4.	Vliv iontové síly na reakční rychlost	496
5.11.5.	Vliv dielektrické konstanty na reakční rychlost	498
5.11.6.	Empirické korelace	501
5.11.6.1.	Lineární korelace aktivačních volných entalpií	501
5.11.6.2.	Aktivační entalpie a aktivační entropie	502
5.11.6.3.	Dvě hrubá empirická pravidla	503
5.11.7.	Vliv tlaku na reakční rychlost	504
5.12.	Vliv struktury na reakční rychlost	505
5.12.1.	Polární efekty	505
5.12.1.1.	Induktivní efekt	506
5.12.1.2.	Mesomerní efekt	506
5.12.1.3.	Induktomerní a elektromerní efekty	507
5.12.2.	Mechanistická klasifikace reakcí	508
5.12.3.	Kvantitativní výklad polárních efektů	510
5.12.4.	Korelace na základě podobnosti reakcí	511
5.12.4.1.	Lineární korelace volných entalpií	511
5.12.4.2.	Hammettova korelace	512
5.12.4.3.	Induktivní, rezonanční a sterické účinky substituentů	513
5.12.4.4.	Korelace nukleofilních a elektrofilních reakcí	515
5.13.	Homogenní katalýza	516
5.13.1.	Katalýza, katalysátor	516
5.13.2.	Mechanismus katalytické reakce	517
5.13.3.	Katalýza kyselinami a zásadami	520
5.13.3.1.	Specifická katalýza ionty H_3O^+ a OH^-	520
5.13.3.2.	Obecná kyselá a obecná zásaditá katalýza	522
5.13.3.3.	Katalytická aktivita a síla kyselin a zásad	524
5.13.3.4.	Solné efekty v acidobazické katalýze	526
5.13.3.5.	Směsná prostředí a funkce kyselosti	526
5.13.3.6.	Jiné funkce kyselosti	529
5.13.3.7.	Vliv acidity prostředí na reakční rychlost	530
5.13.4.	Oxydačně redukční katalýza	532
5.13.4.1.	Výměna elektronu mezi katalysátorem a substrátem	532
5.13.4.2.	Katalýza v řetězových reakcích	532

5.14. Heterogenní katalýza	534
5.14.1. Mechanismus reakcí plynných složek katalysovaných tuhým katalysátorem	534
5.14.1.1. Langmuirův model	535
5.14.1.2. Langmuirova adsorpční isoterma	535
5.14.1.3. Některé jednoduché příklady heterogenně katalysovaných plynných reakcí	538
5.14.2. Závislost rychlosti heterogenně katalysované reakce na teplotě	540
5.14.3. Aktivní centra, selektivita katalysátoru, promotory	541
5.14.4. Heterogenní katalýza v chemickém průmyslu	542
5.14.5. Enzymy	543
Literatura	543
 Dodatek 1	
Průměrná energie oscilátoru	545
 Dodatek 2	
Fázová a grupová rychlost	547
 Dodatek 3	
Komplexní číslo	548
 Dodatek 4	
Diferenciální rovnice $y'' + (a + b^2x^2)y = 0$	549
 Dodatek 5	
Parciální diferenciální rovnice $\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial y}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 y}{\partial \Phi^2} + \alpha y = 0$	553
 Dodatek 6	
Parciální diferenciální rovnice $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \Phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial \psi}{\partial \Theta} \right) + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$	557
 Dodatek 7	
Důkaz rovnice (2-30) $E_2 = \frac{1}{3} \frac{P}{\epsilon_0} = \frac{E}{3} (\kappa - 1)$	563
 Dodatek 8	
Langevinova funkce	565
 Dodatek 9	
Důkaz rovnice (3-30) $F(v^2) = Ae^{-av^2}$	566
 Dodatek 10	
Některé omezené integrály z kinetické teorie ideálního plynu	568
 Dodatek 11	
Důkaz platnosti ekvipartičního principu v klasických soustavách	569
 Dodatek 12	
Základní vztahy kombinatoriky	570

Dodatek 13	
Metoda maximálního členu	572
Dodatek 14	
Stirlingův vzorec.	573
Dodatek 15	
Termodynamické vlastnosti krystalu z Debyeovy funkce	574
Dodatek 16	
Vztahy mezi molárním zlomkem, molalitou a molaritou	575
Dodatek 17	
Tabulka atomových vah prvků	581
Dodatek 18	
Hodnoty fyzikálně chemických konstant ve fyzikální, chemické a sjednocené stupnici	583
Závěrečné poznámky	584
Rejstřík	585