

<b>Obsah</b>		
1.	Úvodní poznámka, předmět a cíl této knihy	11
2.	Stručná poznámka k vývoji teorie chemické vazby	13
3.	Časově nezávislá Schrödingerova rovnice	14
3.1	Navození rovnice	14
3.2	Formulace Schrödingerovy rovnice u jednotlivých systémů	18
	3.2.1 Částice v jednorozměrné potenciálové jámě	18
	3.2.2 Částice při jednoduchém harmonickém pohybu	19
	3.2.3 Vodíkový atom	19
	3.2.4 Molekulový ion vodíku, $H_2^+$	20
3.3	Příklady řešení Schrödingerovy rovnice	20
	3.3.1 Volná částice	20
	3.3.2 Částice v potenciálové jámě; řešení a jeho důsledky	22
	3.3.3 Harmonický oscilátor	28
	3.3.4 Tuhý rotátor	34
	3.3.5 Vodíkový atom	36
	Literatura	46
4.	Matematický aparát a logická struktura kvantové mechaniky	47
4.1	Lineární operátory a některé jejich vlastnosti	47
4.2	Axiomatické základy kvantové mechaniky	50
4.3	Důsledky axiomatického systému a některé poznámky k němu	51
4.4	Konstanty pohybu (energie, moment hybnosti a spin). Pauliho princip	56
4.5	Maticová reprezentace operátoru a operace s maticemi	65
4.6	Přibližné řešení Schrödingerovy rovnice: variační a poruchová metoda	70
	Literatura	78
5.	Základní aproximace v teorii chemické vazby	79
5.1	Úvodní poznámky	79
5.2	Zanedbání neelektrostatických interakcí	80
5.3	Bornova–Oppenheimerova aproximace a adiabatické přiblížení	80

5.4	Metoda konfigurační interakce (CI)	86
5.5	Model nezávislých elektronů (jednoelektronové přiblížení)	91
5.6	Metoda molekulových orbitalů v podobě lineární kombinace atomových orbitalů (MO-LCAO)	98
	Literatura	99
6.	Symetrie v kvantové chemii	100
6.1	Úvodní poznámky	100
6.2	Symetrické transformace hamiltoniánu	102
6.3	Význačné grupy symetrie a jejich označení	107
6.4	Maticová reprezentace grup symetrie	110
6.5	Výběrová pravidla pro maticové elementy	120
6.6	Symetrické a hybridní orbitály	123
6.7	Spinová a prostorová symetrie víceelektronových systémů	131
6.8	Poruchový počet pro symetrické systémy	140
	Literatura	141
7.	Orbitály atomové (AO) a molekulové (MO)	142
7.1	Význam orbitalů vodíkového typu; atomové orbitály	142
7.2	Hybridizace	143
7.3	Molekulové orbitály	146
	Literatura	152
8.	Víceelektronové atomy	153
8.1	Jednoelektronové přiblížení pro atom a periodický systém prvků	153
8.2	Celkový moment hybnosti elektronů v atomu	157
	Literatura	160
9.	Dvojjatomové molekuly	161
9.1	Úvodní poznámky; molekulový ion $H_2^+$	161
9.2	Molekula $H_2$	165
9.3	Výpočet molekulových integrálů	169
9.4	Obecné dvojjatomové molekuly a korelační diagramy	175
	Literatura	179
10.	Metody výpočtů v teorii chemické vazby	180
10.1	Úvodní poznámky	180
10.2	Metody MO-LCAO, uvažující valenční elektrony	190
	10.2.1 Metody uvažující explicitně elektronovou repulzi	190
	10.2.2 Metody uvažující efektivního hamiltoniánu	197
10.3	$\pi$ -Elektronová teorie	198
	10.3.1 $\pi$ - $\sigma$ -Elektronová separace	198
	10.3.2 Poplova verze metody SCF pro $\pi$ -elektronové systémy	201
	10.3.3 Pariserova-Parrova metoda omezené konfigurační interakce	204
	10.3.4 Přehled semiempirických $\pi$ -elektronových metod	205

	10.3.5	Velmi jednoduché $\pi$ -elektronové verze metody molekulových orbitalů	211
	10.3.6	Poruchové metody na úrovni jednoduché metody molekulových orbitalů	221
10.4		Metoda FE-MO	227
10.5		Metoda valenčních struktur (metoda VB)	227
10.6		Teorie krystalového pole a ligandového pole	237
	10.6.1	Úvodní poznámky	237
	10.6.2	Elektrostatický model (krystalové pole)	239
	10.6.3	Teorie ligandového pole	245
		Literatura	246
11.		Využití řešení Schrödingerovy rovnice	249
11.1		Veličiny související s energií molekulového systému – celková elektronová energie, ionizační potenciál, elektronová afinita, excitační energie	249
11.2		Veličiny odvozené z vlnové funkce	257
	11.2.1	Úvodní poznámky	257
	11.2.2	Maticе hustoty	258
	11.2.3	Lokalizované orbitaly	263
	11.2.4	Elektronová distribuce v molekulách	267
	11.2.5	Dipólový moment	269
	11.2.6	Uzlové roviny molekulových orbitalů: Woodwardova–Hoffmannova pravidla	273
		Literatura	277
12.		Příklady studií polyatomických molekul	278
12.1		Úvodní poznámky	278
12.2		Anorganické sloučeniny	278
12.3		Organické sloučeniny	286
12.4		Příklady systémů studovaných v biochemii	291
		Literatura	293
13.		Molekulová spektroskopie	294
13.1		Fenomenologický popis	294
	13.1.1	Úvodní poznámky	294
	13.1.2	Jednotky a spektrální oblasti	295
	13.1.3	Absorpční a emisní spektra, populace excitovaných stavů	298
13.2		Excitace v rámci jediné elektronové hladiny	303
	13.2.1	Úvodní poznámky ke spektroskopii v radiofrekvenční oblasti	303
	13.2.2	Nukleární kvadrupólová rezonance (NQR)	305
	13.2.3	Elementární teorie magnetické rezonance	306
	13.2.4	Nukleární magnetická rezonance (NMR)	307
	13.2.5	Elektronová spinová rezonance (ESR)	313
	13.2.6	Čistá rotační spektra	320
	13.2.7	Vibrační spektroskopie	322
	13.2.8	Ramanova spektroskopie	325

13.3	Excitace v rámci několika elektronových hladin	327
	13.3.1 Absorpční spektra v ultrafialové a viditelné oblasti	327
	13.3.2 Luminiscenční jevy (fluorescence, fosforescence)	345
	13.3.3 Fotochemie	348
	Literatura	354
14.	Magnetické vlastnosti molekul	355
	Literatura	360
15.	Termochemické vlastnosti a stabilita molekul	361
15.1	Slučovací a atomizační tepla	361
15.2	Delokalizační energie konjugovaných sloučenin	363
15.3	Stabilizace koordinačních sloučenin	365
	Literatura	366
16.	Chemická reaktivita	368
16.1	Úvodní poznámky	368
16.2	Empirický přístup	370
16.3	Teoretický přístup	373
	16.3.1 Kvalitativní úvahy	373
	16.3.2 Kvantitativní úvahy. Výpočty absolutních hodnot rovnovážných a rychlostních konstant	386
16.4	Výpočty relativních rovnovážných a rychlostních konstant	393
16.5	Kompromisní přístup: kvantově chemické zpracování	394
	16.5.1 Substituční reakce konjugovaných sloučenin	394
	16.5.2 Substituční reakce komplexů přechodných prvků	409
	Literatura	411
17.	Slabé interakce	413
17.1	Úvodní poznámky	413
17.2	van der Waalsova interakce u dvojice lineárních oscilátorů	414
17.3	Různé způsoby výpočtu mezimolekulových interakčních energií	417
17.4	Uplatnění slabých interakcí z hlediska fyzikální chemie	420
	Literatura	423