

Obsah

1.	Vznik kvantové mechaniky	13
1.1.	Vývoj názorů na stavbu atomu	13
1.2.	Vznik kvantové teorie	15
1.3.	Dualistický charakter záření	16
1.4.	Bohrova teorie a její úpadek	18
1.5.	Hypotéza de Broglieho	20
1.6.	Jak popisovat stav elektronu?	22
1.7.	Vlnové funkce	26
2.	Atomy	32
2.1.	Model mnohaelektronového atomu. Atomové orbitály	32
2.2.	Kvantová čísla	34
2.3.	Orbitální energie	36
2.4.	Vlastnosti a symboly atomových orbitalů	37
2.5.	Elektronový spin	44
2.6.	Elektronové konfigurace lehkých atomů	46
2.7.	Elektronové slupky	50
2.8.	Elektronové konfigurace těžkých atomů	51
2.9.	Periodický systém prvků	54
3.	Dvouatomové molekuly	60
3.1.	Spojování atomů. Molekulové orbitály	60
3.2.	Vazebné a antivazebné molekulové orbitály	63
3.3.	Klasifikace molekulových orbitalů	67
3.4.	Elektronové konfigurace dvouatomových homonukleárních molekul	70
3.5.	Dvouatomové heteronukleární molekuly	78
3.6.	Vazba iontová a kovalentní	85

4.	Jednoduché molekuly o více atomech	89
4.1.	Lokalizované molekulové orbitály	89
4.2.	Čtyřvaznost atomu uhlíku	92
4.3.	Hybridizace atomových orbitalů	95
4.4.	Vlastnosti hybridních orbitalů	98
4.5.	Příklady použití hybridních orbitalů	101
5.	Komplexní ionty	108
5.1.	Proč jsou komplexní ionty stabilní	108
5.2.	Úloha elektronů d v komplexech	110
5.3.	Rozmístění elektronů d v oktaedrických komplexech	118
5.4.	Symetrie komplexů	122
5.5.	Vazby v komplexech	130
6.	π -elektronové molekuly	134
6.1.	Stavba jednoduchých organických molekul	134
6.2.	Konjugované dvojné vazby	138
6.3.	Jednoduché π -elektronové vazby	141
6.4.	Vlastnosti π -elektronových molekul	148
7.	Použití metod kvantové chemie v biologii	156
7.1.	Struktura bílkovin	156
7.2.	Struktura a funkce DNA	162
7.3.	Mutace	174
7.4.	Účinky léčiv	179
	Rejstřík	182