

Předmluva	7
I. ÚVOD	9
II. SYMETRIE MOLEKUL	11
II.1 Prvky a operace symetrie konečných útvarů	11
II.2 Ekvivalentní prvky symetrie a ekvivalentní atomy	14
II.3 Prvky a operace symetrie prostorově neohrazených útvarů ..	15
II.4 Algebraický popis operací symetrie	16
III. ZÁKLADY TEORIE GRUP	19
III.1 Základní pojmy a axiomy teorie grup	19
III.2 Multiplikační tabulky	21
III.3 Podgrupy	21
III.4 Konjugované prvky	22
IV. BODOVÉ GRUPY SYMETRIE	23
IV.1 Operace symetrie jako prvky bodových grup	23
IV.2 Součiny operací symetrie	23
IV.3 Konjugované prvky v bodových grupách symetrie	24
IV.4 Systematika bodových grup	24
IV.5 Algoritmus pro stanovení bodové grupy symetrie	31
IV.6 Maticové reprezentace bodových grup symetrie	31
IV.7 Tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací	33
IV.8 Sestavení a redukce redukovatelných reprezentací	34
IV.9 Direktní součin neredukovatelných reprezentací	36
IV.10 Korelační vztahy	37
V. PROSTOROVÉ GRUPY SYMETRIE	39
V.1 Symetrie řetězovitých polymerů	39
V.1.1 Přímkové grupy symetrie	39
V.1.2 Translační grupy	41
V.1.3 Faktorové grupy	42
V.1.4 Určení symetrie polymerního řetězce - příklady	43
V.2 Symetrie vrstevnatých polymerů	45
V.2.1 Plošné mřížky	45
V.2.2 Rovinné grupy symetrie	47
V.3 Symetrie krystalů	49
V.3.1 Prostorové mřížky a krystalové soustavy	49
V.3.2 Bravaisovy mřížky	50
V.3.3 Krystalografické třídy	51
V.3.4 Prostorové grupy symetrie	57
V.3.5 Polohy atomů, iontů a molekul v základní bunce	57
V.3.6 Orientačně neuspořádané struktury	58
VI. CHEMICKÁ VAZBA A STRUKTURA MOLEKUL	60
VI.1 Princip vzniku a typy kovalentní vazebné interakce	60
VI.2 Elektronová struktura volných atomů a iontů	61
VI.3 Symetrické vlastnosti atomových orbitalů	64
VI.4 Elektronegativita	67
VI.5 Vazebné parametry	69
VI.5.1 Vazebné energie	69
VI.5.2 Vazebné délky	69
VI.5.3 Silové konstanty	70
VI.5.4 Vazebný řád	70
VI.6 Iontový charakter kovalentní vazby	71
VII. VALENČNĚ VAZEBNÁ TEORIE KOVALENTNÍ CHEMICKÉ VAZBY	72
VII.1 Valenční stavy atomů, hybridizace	72
VII.2 Hybridizační schemata pro σ -orbitály	73
VII.3 Hybridizační schemata pro π -orbitály	75
VII.4 Hybridní orbitály jako lineární kombinace atomových orbitalů ..	76
VII.5 Sekundární hybridizace, složený charakter orbitalových hybridů ..	79
VII.6 Aplikační možnosti valenčně vazebné teorie	80

VIII.4.1	Spektrální vlastnosti	99
VIII.4.2	Magnetické vlastnosti	102
VIII.4.3	Iontové poloměry	103
VIII.4.4	Termodynamické důsledky štěpení d-orbitalů krystalovým polem	107
VIII.4.5	Kinetické důsledky štěpení d-orbitalů krystalovým polem	109
TEORIE MOLEKULOVÝCH ORBITALŮ		109
IX.1	Energie molekulových orbitalů	112
IX.2	LCAO-MO metoda popisu organických π -systémů	112
IX.2.1	Homocyklické π -systémy (CH) _n	117
IX.2.2	Řetězovité organické π -systémy	120
IX.3	Vazba v komplexech z hlediska teorie molekulových orbitalů	125
IX.4	Třicenterní vazba	125
IX.4.1	Otevřená třicenterní vazba	129
IX.4.2	Uzavřená třicenterní vazba	130
IX.5	Srovnání aplikačních možností jednotlivých vazebných teorií	132
IZOMERIE A KONFORMACE		132
X.1	Strukturní izomerie	133
X.1.1	Vazebná izomerie	134
X.1.2	Polohová izomerie	135
X.1.3	Strukturní izomerie koordinačních sloučenin	136
X.1.3.1	Vazebná izomerie	136
X.1.3.2	Ionizační izomerie	137
X.1.3.3	Koordinační izomerie	137
X.1.3.4	Polymerační izomerie	137
X.2	Prostorová izomerie	137
X.2.1	Geometrická izomerie	138
X.2.1.1	Geometrická izomerie na dvojně vazbě	139
X.2.1.2	Geometrická izomerie u cyklických sloučenin	141
X.2.1.3	Geometrická izomerie u koordinačních sloučenin	144
X.2.2	Optická izomerie	144
X.2.2.1	Symetrie a optická aktivita	146
X.2.2.2	Diastereoizomerie	148
X.2.2.3	Absolutní konfigurace	149
X.2.2.4	Optická izomerie u komplexních sloučenin	151
X.2.2.5	Absolutní konfigurace komplexních sloučenin	153
X.2.2.6	Cottonův efekt	156
X.3	Konformace	156
X.3.1	Konformace acyklických sloučenin	161
X.3.2	Konformace cyklických sloučenin	168
KONFIGURACE MOLEKUL		168
XI.1	Odpuzování elektronových párů ve valenční sféře a tvar molekul	169
XI.1.1	Lokalizované molekulové orbitály a uspořádání elektronových párů	170
XI.1.2	Důsledky neekvivalentnosti elektronových párů ve valenční sféře	170
XI.1.2.1	Volné elektronové páry ve valenční sféře a geometrie molekul	173
XI.1.2.2	Vliv rozdílné elektronegativity substituentů	175
XI.1.2.3	Geometrie molekul s násobnými vazbami	176
XI.1.3	Nedostatky a oblast použitelnosti modelu VSEPR	179
XI.2	Stereochemie sloučenin s koordinačními čísly 5, 7 a vyššími	179
XI.2.1	Stereochemicky nerigidní molekuly s koordinačním číslem 5	181
XI.2.2	Konfigurace molekul s koordinačním číslem 7	185
XI.2.3	Koordinační čísla vyšší než 7	186
XI.3	Stereochemie sloučenin vytvářejících polymerní strukturní motivy	

XI.3.1	Struktura nekoordinálních polymerů	187
XI.3.2	Stereochemie koordinačně nenasycených sloučenin	190
XI.4	Stereochemie elektronově deficitních sloučenin	195
XII.	ŘEŠENÉ PŘÍKLADY KE CVIČENÍ	199
XII.1	Problémy a úlohy	199
XII.2	Řešení úloh	206
XIII.	PŘÍLOHY	216
XIII.1	Tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací bodových grup symetrie	216
XIII.2	Tabulky direktních součinů neredukovatelných reprezentací ..	226
XIII.3	Korelační tabulky	228
XIII.4	Přehled souborů ekvivalentních míst a jejich polohové syme- trie pro 230 prostorových grup	239
	Doporučená literatura	246