

Predhovor . . . . .	9
Zoznam najčastejšie používaných symbolov a skratiek . . . . .	13
<b>1 Povaha chemickej väzby . . . . .</b>	<b>17</b>
1.1 Hamiltonián pre molekulu . . . . .	17
1.1.1 Izolovaná molekula . . . . .	17
1.1.2 Vplyv vonkajšieho poľa. . . . .	20
1.1.3 Zahrnutie spinu . . . . .	21
1.1.4 Relativistické členy . . . . .	23
1.2 Bornova-Oppenheimerova aproximácia . . . . .	33
1.2.1 Klasifikácia pohybov molekuly . . . . .	33
1.2.2 Oddelenie pohybov elektrónov a jadier . . . . .	35
1.2.3 Adiabatický potenciál . . . . .	38
1.3 Viazané stavy molekúl. . . . .	40
1.3.1 Podstata chemickej väzby . . . . .	40
1.3.2 Klasifikácia chemických väzieb. Osobitosti koordinačnej väzby . . . . .	44
1.4 Jednoelektrónová aproximácia . . . . .	45
1.4.1 Vlastnosti mnohoelektrónovej sústavy. Funkcie hustoty . . . . .	45
1.4.2 Elektrónová konfigurácia. Slaterov determinant . . . . .	48
1.4.3 Maticové prvky operátorov . . . . .	49
1.4.4 Hartreeho-Fockove rovnice . . . . .	52
Literatúra . . . . .	55
<b>2 Teória kryštálového poľa . . . . .</b>	<b>56</b>
2.1 Elektrónová konfigurácia voľného atómu . . . . .	57
2.2 Energie atómových termov . . . . .	61
2.3 Spinovo-orbitálna interakcia v atómoch . . . . .	66
2.4 Rozštiepenie <i>d</i> -hladín v kryštálovom poli . . . . .	67
2.5 Slabé kryštálové pole . . . . .	72
2.6 Silné kryštálové pole . . . . .	77
2.7 Kryštálové pole strednej sily . . . . .	80
2.8 Spinovo-orbitálna interakcia v teórii kryštálového poľa . . . . .	83
2.9 Osobitosti rozštiepenia termov <i>f</i> -elektrónov . . . . .	84
2.10 Hranice použiteľnosti teórie kryštálového poľa . . . . .	86
Literatúra . . . . .	86

<b>3 Metódy molekulových orbitálov</b>	88
3.1 LCAO aproximácia	88
3.1.1 Matica nábojovej hustoty – väzbových poriadkov	88
3.1.2 Roothaanova metóda pre uzavreté hladiny	91
3.1.3 Neobmedzená Hartreeho-Fockova metóda (UHF)	95
3.1.4 Obmedzená Hartreeho-Fockova metóda (RHF)	97
3.1.5 Metóda polovičného elektrónu (LHP)	104
3.2 <i>Ab initio</i> výpočty molekulových orbitálov	105
3.2.1 Báza analytických funkcií	105
3.2.2 Logika SCF procedúry	115
3.3 Neempirické metódy	122
3.3.1 Metóda vznášajúcich sa gaussianov (FSGO)	123
3.3.2 Pseudopotenciálové metódy	125
3.3.3 Metóda $X\alpha$	130
3.3.4 Metódy NEMO.	
Metóda Fenskeho-Halla	138
3.4 Metódy zanedbania diferenciálneho prekryvu	142
3.4.1 ZDO aproximácia	142
3.4.2 Princípy semiempirickej parametrizácie	144
3.4.3 Metóda CNDO	153
3.4.4 Metóda INDO	162
3.4.5 Metóda NDDO	170
3.4.6 Porovnanie NDO metód	172
3.5 Semiempirické metódy efektívneho hamiltoniánu	175
3.5.1 Teória ligandového poľa (LFT)	175
3.5.2 Metóda uhlového prekryvu (AOM)	179
3.5.3 Rozšírená Hückelova metóda (EHT)	183
3.6 Zahnutie relativistických efektov	187
3.6.1 Dominantné relativistické členy	187
3.6.2 Spinovo-orbitálna interakcia	192
3.7 Vlastnosti molekulových orbitálov	197
3.7.1 Kanonické MO.	
Koopmansova veta	197
3.7.2 Lokalizované MO.	
Hybridizácia	202
3.7.3 Rozdelenie elektrónovej hustoty.	
Elektrické momenty	207
Literatúra	212
<b>4 Elektrónová korelácia</b>	221
4.1 Korelačná energia	221
4.2 Variačná konfiguračná interakcia (CI)	223
4.3 Metóda valenčných väzieb (VB a GVB)	230
4.4 Mnohokonfiguračná SCF metóda (MC SCF)	234
4.5 Mnohočasticová poruchová teória (MBPT)	235
4.6 Metóda spriahnutých klastrov (CCA)	242
4.7 Párové korelačné teórie	244
4.8 Metóda Greenových funkcií (GF)	247
4.9 Metóda PCILO a PCILO/3	250
Literatúra	257
<b>5 Spektrá koordinačných zlúčenín</b>	259
5.1 Energetické stavy molekúl	260
5.2 Einsteinova teória interakcie látky so žiarením	261



5.3	Tvar spektrálnych čiar . . . . .	264
5.4	Vibračné spektrá koordinačných zlúčenín . . . . .	266
5.4.1	Normálne súradnice a normálne vibrácie . . . . .	266
5.4.2	Výberové pravidlá pre vibračné spektrá . . . . .	270
5.4.3	Typy molekulových vibrácií . . . . .	271
5.4.4	Analýza vibračných spektier koordinačných zlúčenín . . . . .	272
5.5	Elektrónové spektrá koordinačných zlúčenín . . . . .	275
5.5.1	Výpočet excitačnej energie . . . . .	277
5.5.2	Pravdepodobnosť elektrónových prechodov . . . . .	277
5.5.3	Vibračná štruktúra elektrónových prechodov. Franckov-Condonov princíp. . . . .	279
5.5.4	Teória tvaru spektrálnych čiar . . . . .	281
5.5.5	Klasifikácia elektrónových prechodov v koordinačných zlúčeninách . . . . .	286
5.5.6	Vplyv rozpúšťadla na elektrónové spektrá . . . . .	290
5.5.7	Problémy interpretácie spektier koordinačných zlúčenín . . . . .	291
5.6	Ionizačná spektroskopia . . . . .	292
5.6.1	Fotoelektrónové spektrum . . . . .	295
5.6.2	Intenzita fotoelektrónových spektier . . . . .	298
5.6.3	Teoretická interpretácia ionizačných spektier. . . . .	299
5.6.4	Vplyv štruktúry na energiu väzby vnútorných elektrónov . . . . .	302
5.6.5	Osobitosti spektier UPS koordinačných zlúčenín . . . . .	303
	Literatúra . . . . .	305
<b>6</b>	<b>Magnetické vlastnosti koordinačných zlúčenín . . . . .</b>	<b>307</b>
6.1	Magnetické rezonančné metódy. . . . .	307
6.1.1	Magnetické rezonančné parametre . . . . .	308
6.1.2	Tenzor magnetického tienenia jadier a chemický posun . . . . .	311
6.1.3	Tenzor jadrovej spinovo-spinovej interakcie . . . . .	314
6.1.4	<i>g</i> -tenzor . . . . .	316
6.1.5	Tenzor hyperjemnej interakcie . . . . .	319
6.2	Formálny ESR spinový hamiltonián. . . . .	320
6.3	Štiepenie v nulovom poli. . . . .	322
6.4	Osobitosti ESR spektier koordinačných zlúčenín . . . . .	323
6.5	Jadrová magnetická rezonancia koordinačných zlúčenín . . . . .	324
6.6	Dvojitá magnetická rezonancia . . . . .	326
6.7	Jadrová kvadrupólová rezonancia. . . . .	327
6.7.1	Vplyv kvadrupólového momentu na NMR spektrá . . . . .	329
6.7.2	Kvadrupólové efekty v ESR spektrách . . . . .	331
6.8	Mössbauerova spektroskopia . . . . .	332
6.9	Magnetická susceptibilita . . . . .	335
6.10	Výmenné interakcie . . . . .	339
	Literatúra . . . . .	342
<b>7</b>	<b>Stereochémia a reaktivita koordinačných zlúčenín . . . . .</b>	<b>344</b>
7.1	Vlastnosti adiabatického potenciálu . . . . .	344
7.1.1	Štruktúra molekúl a adiabatický potenciál. . . . .	344
7.1.2	Kvantovochemický opis plochy adiabatického potenciálu . . . . .	347
7.1.3	Výpočet stacionárnych bodov adiabatického potenciálu . . . . .	350
7.1.4	Koncepcia reakčnej koordináty . . . . .	352
7.1.5	Výpočet termodynamických veličín z tvaru adiabatického potenciálu. . . . .	353
7.1.6	Výpočet rovnovážnych konštánt chemických reakcií . . . . .	356
7.1.7	Výpočet rýchlostných konštánt chemických reakcií . . . . .	357
7.1.8	Obmedzenia koncepcie adiabatického potenciálu . . . . .	358
7.2	Osobitosti stereochemie koordinačných zlúčenín . . . . .	358

7.2.1 Izoméria koordinačných zlúčenín . . . . .	359
7.2.2 Vzájomný vplyv ligandov v koordinačných zlúčeninách . . . . .	360
7.2.3 Efekt Jahnov-Tellerov . . . . .	361
7.3 Úloha symetrie pri chemických reakciách . . . . .	372
7.3.1 Woodwardove-Hoffmannove pravidlá . . . . .	372
7.3.2 Teória hraničných orbitálov . . . . .	378
7.3.3 Katalýza symetricky zakázaných reakcií . . . . .	379
7.3.4 Topologický prístup k štúdiu chemickej reaktivity . . . . .	383
Literatúra . . . . .	384
<b>Dodatky . . . . .</b>	<b>391</b>
D.1 Atómové jednotky a hodnoty fyzikálnych veličín . . . . .	391
D.2 Princípy kvantovej mechaniky . . . . .	394
D.3 Aproximatívne metódy kvantovej mechaniky . . . . .	402
D.4 Symetria molekúl . . . . .	412
D.5 Súradnicové sústavy . . . . .	422
Literatúra . . . . .	424
<b>Резюме . . . . .</b>	<b>426</b>
<b>Summary . . . . .</b>	<b>428</b>
<b>Register . . . . .</b>	<b>430</b>