

Obsah

Předmluva	7
A. ZÁKLADY KVANTOVÉ MECHANIKY	9
A.1. Potřeba kvantové mechaniky	9
A.1.1. Záření absolutně černého tělesa	9
A.1.2. Tepelná kapacita pevných látek	11
A.1.3. Vnější fotoelektrický jev	13
A.1.4. Comptonův rozptyl	13
A.1.5. Problémy stability atomů a interpretace atomových spekter	14
A.1.6. Rozštěpení spektrálních čar v magnetickém poli	16
A.1.7. Spin elektronu	17
A.2. Elementární základy kvantové mechaniky	18
A.2.1. Operátory a jejich charakteristické hodnoty	18
A.2.2. Diracova formulace kvantové mechaniky a maticová reprezentace operátorů	20
A.2.3. Postuláty kvantové mechaniky	23
A.2.4. Současná měřitelnost fyzikálních veličin. Heisenbergův princip neurčitosti	28
A.3. Jednoduché systémy v kvantové mechanice	30
A.3.1. Částice v jednorozměrné pravoúhlé potenciálové jámě	30
A.3.2. Částice v trojrozměrné pravoúhlé potenciálové jámě	32
A.3.3. Přechod částice přes potenciálovou bariéru. Tunelový jev	34
A.3.4. Lineární harmonický oscilátor	36
A.3.5. Tuhý rotátor	38
A.3.6. Atom vodíku	39
Dodatek A.3.1. Řešení Schrödingerovy rovnice pro lineární harmonický oscilátor	47
Dodatek A.3.2. Řešení Schrödingerovy rovnice pro kulové harmonické funkce	48
Dodatek A.3.3. Souřadné systémy v atomu vodíku	50
A.4. Moment hybnosti v kvantové mechanice	52
A.4.1. Obecné vlastnosti momentu hybnosti	52
A.4.2. Orbitální moment hybnosti	54
A.4.3. Spinový moment hybnosti	55
A.4.4. Skládání momentů hybnosti	56
A.4.5. Momenty hybnosti v atomu	57
B. ELEKTRONOVÁ STRUKTURA ATOMU	59
B.1. Problém mnoha částic v kvantové mechanice	59
B.1.1. Permutační operátory	60
B.1.2. Slaterův determinant	61
B.1.3. Pauliho vylučovací princip	62
Dodatek B.1.1. Slaterova pravidla	62
B.2. Elektronová struktura víceelektronových atomů	64
B.2.1. Elektronová konfigurace atomů	66
B.2.2. Atomové termy	68
B.2.3. Spinově orbitální interakce	71
B.2.4. Parita stavu	72
B.2.5. Atomová spektra a výběrová pravidla	73
Dodatek B.2.1. Poruchová metoda nezávislá na čase	73
Dodatek B.2.2. Variační metoda	74
Dodatek B.2.3. Hartreeho - Fockovy rovnice	76
Dodatek B.2.4. Metoda konfigurační interakce	78

C. CHEMICKÁ VAZBA	79
C.1. Vývoj představ o fyzikální podstatě chemické vazby	79
C.1.1. Molekulový ion H_2^+	79
C.1.2. Heitlerův - Londonův model molekuly H_2	82
C.2 Symetrie molekul	85
C.2.1. Operace symetrie molekul	85
C.2.2. Bodové grupy symetrie molekul	86
C.2.3. Reprezentace grup symetrie molekul	89
C.2.4. Přímý součin reprezentací	91
C.2.5. Využití symetrie molekul v kvantové chemii	92
C.3. Elektronová struktura molekul	103
C.3.1. Bornova – Oppenheimerova aproximace	103
C.3.2. Molekulové orbitály (MO)	105
C.3.3. Aproximace LCAO MO	106
C.3.4. Aproximace nulového diferenciálního překryvu. Semiempirické metody molekulových orbitálů	107
C.3.5. π – elektronové metody	109
C.3.6. Metoda konfigurační interakce	113
Dodatek C.3.1. Roothaanovy rovnice pro molekuly	114
Dodatek C.3.2. Výpočet elektronové energie molekul s otevřenými hladinami	116
Dodatek C.3.3. Populační analýza	119
Dodatek C.3.4. Použití HMO metody	120
C.4. Kvalitativní popis elektronové struktury molekul	124
C.4.1. Obecné vlastnosti molekulových orbitálů	124
C.4.2. Molekulové orbitály dvouatomových molekul	126
C.4.3. Delokalizované a lokalizované molekulové orbitály. Hybridizace	129
C.4.4. Metoda VSEPR a geometrie molekul	131
C.4.5. Teorie krystalového pole	133
C.4.6. Chemická vazba v pevných látkách	135
Dodatek C.4.1. Výpočet Madelungovy konstanty pro strukturu NaCl	140
D. MOLEKULOVÁ SPEKTROSKOPIE	141
D.1. Obecné vlastnosti interakce elektromagnetického záření s látkou	141
D.1.1. Energetické hladiny molekul	141
D.1.2. Elektromagnetické záření a spektrální přechody	145
D.1.3. Absorpce elektromagnetického záření	149
D.1.4. Rozšíření spektrálních čar	150
D.2. Rotační spektra molekul	152
D.2.1. Rotační energetické hladiny molekul	152
D.2.2. Centrifugální distorze (odstředivá deformace)	155
D.2.3. Degenerace a Starkův jev	155
D.2.4. Rotační přechody	156
D.3. Vibrační spektroskopie	158
D.3.1. Vibrační spektrum dvouatomových molekul	158
D.3.2. Anharmonicitá vibrací	160
D.3.3. Vibračně - rotační spektrum dvouatomových molekul	161
D.3.4. Vibrace víceatomových molekul	163
D.3.5. Grupové vibrace	165
Dodatek D.3.1. Normální vibrační souřadnice	170
Dodatek D.3.2. Symetrická výběrová pravidla pro vibrační přechody	172

D.4. Elektronová spektroskopie	176
D.4.1. Elektronové přechody. Franckův - Condonův princip	176
D.4.2. Výběrová pravidla pro elektronové přechody	178
D.4.3. Elektronově-vibračně-rotační spektroskopie dvouatomových molekul	178
D.4.4. Rozdělení intenzity ve vibračně-rotačním pásu elektronového přechodu dvouatomových molekul	180
D.4.5. Elektronová spektra organických molekul	184
D.4.6. Elektronová spektra sloučenin přechodových prvků	187
D.4.7. Vliv rozpouštědla na elektronová spektra	191
D.4.8. Emise z elektronových excitovaných stavů - luminiscenční jevy	192
D.4.9. Fotoelektronová spektroskopie	194
D.4.10. Lasery	196
D.5. Magnetické rezonanční metody	199
D.5.1. Elektronová paramagnetická rezonance	201
D.5.2. Jaderná magnetická rezonance	206
Dodatek D.5.1. Fyzikální podstata hyperjemné interakce	209
Dodatek D.5.2. Fyzikální podstata stínící konstanty	210
Dodatek D.5.3. Fyzikální podstata spinově - spinové interakce	212
E. ELEKTRICKÉ A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI MOLEKUL	214
E.1. Elektrické vlastnosti molekul	214
E.1.1. Elektrická susceptibilita	214
E.1.2. Permanentní a indukovaný dipólový moment	215
E.1.3. Polarizace molekul	216
E.1.4. Index lomu a molová refrakce	220
E.2. Magnetické vlastnosti molekul	222
E.2.1. Magnetická susceptibilita	222
E.2.2. Diamagnetismus	225
E.2.3. Paramagnetismus	225
E.2.4. Vlastnosti molární magnetické susceptibility a její měření.	226
E.2.5. Feromagnetismus	228
Vybrané použité fyzikální konstanty	229
Jmenný rejstřík významných fyziků a chemiků	230
Rejstřík	232
Literatura	238

... v tom, že molekulové dílky zůstávají chemiky jsou ty dílky ...
 ... s tím, že v tomto okamžiku začíná řešení o stabilitě na jedné ...
 ... potom o stabilitě stolu s nekonečně velkým počtem rohů a potom se ...
 ... pokouší vyřešit reálnou výchozí situaci. Základní problémy chemické ...
 ... nesouladu mezi příruční a možností, přesněji, mezi kvantově- ...
 ... s malým způsobem jeho řešení.
 ... Schrödingerovy rovnice pro molekulové systémy není principiálně ...
 ... dostatečný počet funkcí s mnoha argumenty, můžeme předpokládat, ...
 ... které se přibližuje libovolně blízko k ideálnímu řešení. Když si ...
 ... elektronových vlastností reálných molekul pracujeme zpravidla se ...
 ... skládají z velkého počtu atomových jader a elektronů, je zřejmé, že i ...
 ... současných počítačů musíme sáhnout ke značným zjednodušením, aby ...
 ... pro současné chemiky nezbytně poznat základy kvantové ...
 ... aby dokázali vyhodnotit vliv aproximací použitých při stan ...
 ... z nich vyvodili adekvátní závěry