

1	PŘEHLED METOD POUŽÍVANÝCH K URČOVÁNÍ STRUKTURY MOLEKUL	7
1.1	Izolace látek a určování jejich empirického vzorce	7
1.2	Přehled metod určování struktury	12
1.3	Absorpce elektromagnetického záření	14
1.3.1	Druhy absorbované energie	14
1.3.2	Měření absorpce záření	18
1.3.3	Absorpční spektra	19
1.3.4	Spektrofotometry	20
2	ZKOUMÁNÍ MOLEKUL V OBLASTI VIDITELNÉHO A ULTRAFIALOVÉHO ZÁŘENÍ	21
2.1	Absorpční spektra spojená s excitací elektronů	21
2.2	Metodika měření absorpčních spekter	26
2.3	Typy molekul absorbujících v ultrafialové a viditelné oblasti	28
2.4	Fluorescenční spektra	31
2.5	Příklady použití elektronových spekter	34
3	INFRAČERVENÁ A RAMANOVA SPEKTRA	39
3.1	Vibrační a rotační spektra	39
3.2	Významnější vazby a skupiny zkoumané v infračervené oblasti	46
3.3	Přehled techniky měření infračervených spekter	50
3.3.1	Příprava vzorků	50
3.3.2	Přístrojová technika	51
3.4	Interpretace infračervených spekter	52
3.5	Ramanova spektroskopie	57
3.6	Mikrovlňná spektroskopie	60
4	ZKOUMÁNÍ STRUKTURY MOLEKUL MAGNETICKÝMI REZONANČNÍMI METODAMI	64
4.1	Nukleární magnetická rezonance	64
4.1.1	Základní princip	64
4.1.2	Absorpce záření jádrem vodíku	65
4.1.3	Příklady typů přístrojů pro NMR	68
4.1.4	Příprava vzorků	68
4.2	Spektra NMR a jejich vyhodnocování	68
4.2.1	Chemický posun	68
4.2.2	Spinová interakce	73
4.2.3	Vyhodnocování spekter NMR a jejich vztah ke struktuře	76
4.2.4	Spektroskopie NMR ostatních jader	81
4.2.5	Souhrn informací ze spekter NMR	82
4.3	Elektronová spinová rezonance (ESR) a její použití	82
5	METODY ZALOŽENÉ NA OPTICKÉ OTÁČIVOSTI	85
5.1	Molekuly otáčející rovinu polarizovaného záření	85
5.2	Fyzikální podstata optické otáčivosti	87
5.3	Specifická a molární otáčivost	90

5.4	Optická rotační disperze — ORD	91
5.5	Příklady použití spekter ORD	93
5.6	Církulární dichroismus — CD	96
6	MÖSSBAUEROVA SPEKTROSKOPIE	99
6.1	Mössbauerův efekt	99
6.2	Mössbauerova spektra a jejich použití	102
7	DIFRAKCE ZÁŘENÍ X, ELEKTRONŮ A NEUTRONŮ	103
7.1	Difrakce rentgenového záření	103
7.1.1	Základní představy	103
7.1.2	Postup při určování struktury	105
7.1.3	Praktické aplikace	106
7.2	Elektronová difrakce	107
7.3	Neutronová difrakce	108
8	HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE	109
8.1	Princip hmotnostní spektrometrie	109
8.2	Určování sumárního vzorce metodou hmotnostní spektrometrie	110
8.3	Fragmentace a její použití ke studiu struktury	114
8.4	Instrumentální uspořádání při hmotnostní spektrometrii	117
8.5	Interpretace hmotnostních spekter z hlediska struktury	120
9	ELEKTROMETRICKÉ METODY	125
9.1	Permitiva a dipólové momenty	125
9.2	Polarografické metody	131
9.3	Potenciometrické způsoby stanovení disociačních konstant	135
10	PŘÍKLADY URČOVÁNÍ STRUKTURY KOMBINACÍ SPEKTROFOTOMETRIE V ULTRAFIALOVÉ A INFRAČERVENÉ OBLASTI, SPEKTROSKOPIE NMR A HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE	140
11	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	147
	REJSTŘÍK	148