

Předmluva	7
1. KVANTOVÁ MECHANIKA A STAVBA ATOMU	9
1.1 Úvod	9
1.2 Vlnové funkce a Schrödingerova rovnice	10
1.3 Vodíkový atom a atomy vodíkového typu	12
1.4 Grafické znázornění atomových orbitalů	16
1.5 Absorpční a emisní spektrum atomového vodíku	21
1.5.1 Elektromagnetické záření	21
1.5.2 Spektrum atomového vodíku	22
1.6 Spin elektronu	25
1.7 Vlnové funkce pro systém více částic. Model nezávislých částic	27
1.8 Výstavba víceelektronového atomu	29
1.9 Ionizační energie a elektronové afinity	31
1.10 Elektronegativita	33
1.11 Atomové poloměry	35
2. CHEMICKÁ VAZBA VE DVOUATOMOVÝCH MOLEKULÁCH	37
2.1 Křivka potenciální energie	37
2.2 Metoda valenční vazby	39
2.2.1 Heitlerova-Londonova vlnová funkce pro molekulu vodíku	39
2.2.2 Zlepšení Heitlerovy-Londonovy vlnové funkce	40
2.2.3 Spinová část vlnové funkce	41
2.3 Metoda molekulových orbitalů	42
2.3.1 Vlnové funkce pro molekulu vodíku	42
2.3.2 Vazebné a antivazebné vlastnosti molekulových orbitalů	45
2.3.3 Překryv atomových orbitalů	47
2.3.4 Prvky a operace symetrie. Symetrie orbitalů	48
2.3.5 Klasifikace molekulových orbitalů dvouatomových molekul	51
2.3.6 Homonukleární dvouatomové molekuly	53
2.3.7 Metoda MO a molekulové ionizační potenciály	56
2.3.8 Heteronukleární dvouatomové molekuly	57
2.4 Iontová vazba	61
3. ELEKTRONOVÁ STRUKTURA VÍCEATOMOVÝCH MOLEKUL	65
3.1 Metoda molekulových orbitalů pro víceatomové molekuly	65
3.2 Delokalizované a lokalizované molekulové orbitály	67
3.2.1 Delokalizované MO pro BeH_2	67
3.2.2 Lokalizované MO pro BeH_2	70
3.3 Hybridizace	71
3.3.1 Hybridizace sp^d	71
3.3.2 Energie hybridních orbitalů	74

3.3.3	Hybridizace zahrnující orbitály d	76
3.4	Tvar molekul. Repulze valenčních elektronových párů	79
3.5	Delokalizované vazby	82
3.5.1	Molekulový ion vodíku H_3^+	83
3.5.2	Sloučeniny vzácných plynů: KrF_2 , XeF_2	83
3.5.3	Molekula vody	85
3.6	Walshovy diagramy	89
3.7	Molekuly s nadbytkem nebo deficitem elektronů	90
3.7.1	Ion I_3^- - systém s nadbytkem elektronů	90
3.7.2	Diboran - molekula s elektronovým deficitem	90
3.8	Vazby v konjugovaných uhlovodících	91
3.9	Elektronová struktura komplexů přechodných kovů	94
3.9.1	Prostorové uspořádání komplexů přechodných kovů	94
3.9.2	Teorie krystalového pole	95
3.9.3	Symetrie komplexů. Jahnův-Tellerův jev	97
3.9.4	Složený orbitalový model pro komplexy	99
3.9.5	Teorie ligandového pole	100
3.10	Van der Waalsovy vazby	102
3.11	Vodíková vazba	105
3.12	Zachování orbitální symetrie při chemických reakcích	106
4. VAZBY V PEVNÝCH LÁTKÁCH		111
4.1	Krystalické a amorfní látky	111
4.2	Typy vazeb v krystalech	111
4.3	Iontové krystaly	112
4.4	Kovalentní krystaly	113
4.5	Kovy	114
4.5.1	Kovová vazba	114
4.5.2	Energetické pásy v krystalech	115
4.5.3	Nekovy a polovodiče	118
4.6	Molekulové krystaly	121
4.7	Krystalové struktury s několika typy vazeb	123
4.7.1	Nitrid boru	123
4.7.2	Elementární bor	124
4.7.3	Silikáty	124
5. STRUKTURA MOLEKUL A MOLEKULOVÁ SPEKTRA		126
5.1	Přehled spektrálních metod	126
5.2	Interakce elektromagnetického záření s molekulami a měření spekter	128
5.3	Rotační spektra	130
5.3.1	Tuhý rotor	130
5.3.2	Rotační spektrum dvouatomových molekul	131
5.3.3	Příklad rotačního spektra - HCl	132
5.3.4	Rotační spektra víceatomových molekul	133
5.3.5	Rotační Starkův jev	135
5.4	Vibrační spektra	136
5.4.1	Lineární harmonický oscilátor	136

5.4.2	Anharmonicitá	138
5.4.3	Vibrační-rotáční spektra dvouatomových molekul	139
5.4.4	Vibrační spektra víceatomových molekul	141
5.4.5	Analytické využití infračervených spekter	143
5.5	Ramanova spektra	145
5.5.1	Ramanův rozptyl	145
5.5.2	Rotáční Ramanova spektra	147
5.5.3	Vibrační Ramanova spektra	148
5.6	Elektronová spektra	149
5.6.1	Elektronové hladiny energie jednoduchých molekul	149
5.6.2	Vibrační a rotační struktura elektronových spekter	152
5.6.3	Elektronová spektra a barevnost složitějších molekul	154
5.6.4	Fluorescence a fosforescence	156
5.7	Stimulovaná emise záření. Lasery	158
5.7.1	Inverze populací. Funkce laseru	158
5.7.2	Rubínový laser	159
5.7.3	Helium-neonový laser	160
5.7.4	Barvivové lasery	161
5.7.5	Excimerové lasery	162
5.7.6	Chemické lasery	163
5.8	Fotoelektronová spektroskopie	163
5.9	Spektra magnetické rezonance	165
5.9.1	Elektronová spinová (paramagnetická) rezonance (ESR)	165
5.9.2	Hyperjemná struktura spektra ESR	168
5.9.3	Jaderná magnetická rezonance (NMR)	171
5.9.4	Chemický posun a spin-spin interakce	173
5.10	Mössbauerova spektra	175
5.11	Hmotnostní spektrometrie	177
5.12	Difrakční metody	180
5.12.1	Princip difrakčních metod	180
5.12.2	Difrakce rentgenového záření	181
5.12.3	Neutronová difrakce	184
5.12.4	Elektronová difrakce	184
 6. VLASTNOSTI MOLEKUL		 188
6.1	Elektrické vlastnosti	188
6.1.1	Polarizace dielektrik	188
6.1.2	Indukovaná (deformační) polarizace	189
6.1.3	Orientační polarizace	190
6.1.4	Elektrický dipólový moment a struktura molekuly	191
6.2	Magnetické vlastnosti	193
6.2.1	Základní vztahy a definice	193
6.2.2	Diamagnetismus	194
6.2.3	Paramagnetismus	194
6.3	Optické vlastnosti	195
6.3.1	Optická aktivita	195
6.3.2	Optická rotační disperze a cirkulární dichroismus	197