

Obsah

Seznam symbolů	7
1 ÚVOD	9
2 MEZIMOLEKULÁRNÍ INTERAKCE A CHARAKTERIZACE ROZPOUŠTĚDEL	15
2.1 Polarizace molekul	15
2.2 Klasifikace mezimolekulárních interakcí	20
2.3 Vznik roztoku	25
2.4 Klasifikace rozpouštědel	26
2.4.1 Klasifikace rozpouštědel podle chemického složení	26
2.4.2 Klasifikace rozpouštědel podle fyzikálních vlastností	27
2.4.3 Klasifikace rozpouštědel z hlediska interakcí v roztoku	45
3 SEMIEMPIRICKÉ METODY HODNOCENÍ VLIVU PROSTŘEDÍ	47
3.1 Mossottiho rovnice, Lorenzova-Lorentzova rovnice a Debyeova rovnice ...	48
3.2 Onsagerova teorie reakčního pole	50
3.3 Bornova metoda	53
3.4 Kirkwoodova(-Bellova) metoda	55
3.5 Zhodnocení kavitační energie	57
3.6 Poznámky k použití semiempirických metod hodnocení vlivu prostředí ...	59
4 VLASTNOSTI OVLIVŇOVANÉ PROSTŘEDÍM A POUŽITÍ SEMIEMPIRICKÝCH METOD K HODNOCENÍ JEHO VLIVU	62
4.1 Rovnováhy	63
4.1.1 Chemické rovnováhy	65
4.1.2 Izomerní rovnováhy	66
4.1.2.1 Tautomerní rovnováhy	66
4.1.2.2 Konformační rovnováhy	71
4.1.3 Fázové rovnováhy	74
4.2 Rozpouštědlové vlivy ve spektroskopii	78
4.2.1 Vliv prostředí na elektronová absorpční a fluorescenční spektra	80
4.2.2 Vliv prostředí na vibrační spektra	89
4.2.3 Vliv prostředí na spektra nukleární magnetické rezonance	97
4.2.4 Vliv prostředí na spektra elektronové paramagnetické rezonance	103
4.3 Vliv prostředí na rychlost homogenních reakcí	107
4.3.1 Reakce mezi neutrálními nepolárními molekulami a jejich hodnocení pomocí semiempirických metod	113
4.3.2 Reakce mezi neutrálními dipolárními molekulami	114

4.3.3	Reakce mezi neutrálními dipolárními molekulami a ionty	119
4.3.4	Reakce mezi ionty	120
4.3.5	Ovlivnění rozpouštědlových vlivů na chemické reakce vnějším tlakem ...	121
4.3.6	Rozpouštědlový izotopový efekt	122
4.3.7	Příklady vlivu prostředí na vybrané reakce	123
5	EMPIRICKÉ METODY HODNOCENÍ Vlivu PROSTŘEDÍ	128
5.1	Úvod	128
5.2	Princip lineárních vztahů solvatačních energií (LSER)	129
5.3	Vybrané empirické metody hodnocení vlivu prostředí	130
5.3.1	Metoda $E_T(30)$ parametrů Reichardta a Dimrotha	134
5.3.2	Metoda Kamletova a Taftova	143
5.3.3	Metoda efektivních Bornových funkcí relativní permitivity w_B	149
5.3.4	Pytelovy parametry PA, PB, PP	153
5.4	Přínos a nevýhody empirických metod	155
6	VLIV PROSTŘEDÍ SMĚSNÝCH ROZPOUŠTĚDEL	157
6.1	Semiempirické metody hodnocení vlivu směsných rozpouštědel	158
6.1.1	Hodnocení pomocí základních fyzikálních vlastností rozpouštědel	158
6.1.2	Hodnocení vlivu směsných rozpouštědel jako funkce složení směsného rozpouštědla	160
6.2	Empirické metody hodnocení vlivu směsných rozpouštědel	163
	LITERATURA	164