

# Obsah

## Předmluva

## 1 Vibrační spektra molekul

### 1.1 Úvod

Podstata vibračně rotačních spekter molekul. Měření infračervených absorpčních spekter. Ramanova spektra. Aplikace infračervených a Ramanových spekter 17

### 1.2 Klasická a kvantová teorie malých molekulových vibrací

Separace vibrace a rotace. Malé kmity v klasické mechanice. Normální vibrace, degenerované vibrace. Sekulární rovnice vibrace v maticovém tvaru. Normální souřadnice. Normální vibrace nelineární a lineární tříatomové molekuly. Vibrace lineárního řetězce. Kvantová teorie harmonického oscilátoru 29

### 1.3 Symetrie molekul

Prvky a operace symetrie. Bodové grupy symetrie. Permutačně inverzní grupy. Prostorové grupy symetrie 47

### 1.4 Symetrie normálních vibrací

Transformace normálních vibrací operacemi symetrie. Použití teorie grup. Struktura redukované reprezentace grupy symetrie molekuly. Symetrie normálních vibrací neregidních molekul. Symetrie normálních vibrací řetězových molekul a krystalických mřížek 66

### 1.5 Výpočty normálních vibrací. Charakterističnost molekulových vibrací. Velké amplitudy vibrací molekul

Výpočty normálních vibrací. Potenciální konstanty molekul. Distribuce potenciální energie vibrace. Normální vibrace spřažených harmonických oscilátorů. Charakterističnost molekulových vibrací, empirické korelace. Isotopické posuny frekvencí. Molekuly s velkými amplitudami vibrací 83

### 1.6 Výběrová pravidla a intenzity

Symetrie vibračních vlnových funkcí a složek  $\mu_x$ ,  $\mu_y$ ,  $\mu_z$  a  $\alpha_{ij}$ . Výběrová pravidla pro bodové grupy symetrie. Výběrová pravidla pro translační a prostorovou grupu mřížky. Intensity v infračervených spektrech. Charakterističnost intenzit infračervených pásů. Intensity a polarisace v Ramanových spektrech. Tvary infračervených absorpčních pásů. Integrované intenzity 110

1.7	Kvantově mechanické efekty ve vibračních spektrech Energetické hladiny anharmonického oscilátoru. „Horké“ pásy. Charakterističnost anharmonických efektů. Fermiho resonance. Rotační struktura vibračních pásů	123
1.8	Infračervená spektra a mezimolekulární interakce „Specifické“ a „nespecifické“ mezimolekulární působení. Rovnice Kirkwoodova-Bauerova-Magatova. Intenzita infračervených pásů a rozpouštědlový efekt	138
2	Interpretace infračervených spekter molekul	
2.1	Methan a jeho isotopické deriváty. Ethan Methan. Ethan. Vliv skupenského stavu	147
2.2	Propan. n-Alkany Propan. Spektra n-alkanů v kapalném stavu. Spektra n-alkanů v krystalickém stavu. $\omega$ -Deriváty n-alkanů	155
2.3	Neopentan. Rozvětvené nasycené uhlovodíky Tetramethylmethan. Rozvětvené uhlovodíky. Molekuly sestavené z opakujících se jednotek. Deriváty rozvětvených uhlovodíků	168
2.4	Cyklopropan. Cykloalkany Cyklopropan. Cykloalkany. Deriváty cykloalkanů	180
2.5	Methylsilan. Sloučeniny křemíku, germania, cínu a olova Methylsilan. Sloučeniny křemíku. Methylgerman, sloučeniny germania. Sloučeniny cínu a olova	192
2.6	Amoniak a jeho komplexy. Fosfin, arsin a stibin Amoniak. Komplexně vázaný amoniak. Fosfin, arsin a stibin	204
2.7	Methylamin. Primární, sekundární a terciární aminy. Sloučeniny $XNH_2$ . Alkylfosfíny a alkylarsíny Methylamin. Primární alifatické aminy. Sekundární a terciární alkylaminy. Cyklické sekundární aminy. Vliv substituentů atomu dusíku na jeho hybridizaci. Hydrazin a hydroxylamin. Silylaminy a silazany. Alkylfosfíny a alkylarsíny	211
2.8	Anilin. Aromatické a heterocyklické aminy Anilin. Aromatické a heterocyklické aminy. <i>ortho</i> -Deriváty anilinu, efekt intramolekulárního vodíkového mostu	227
2.9	Amoniový ion. Amoniové, alkyl- a arylamoniové soli. Fosfoniové soli. Anionty $(YH_4)^-$ Amoniový ion. Methylamoniové ionty. Alkyl- a arylamoniové ionty. Fosfonium, arsonium a jejich deriváty. Anionty $(YH_4)^-$ (Y = B, Al). Komplexy aminů	241

2.10	Voda. Hydronium, hydroxylový ion a hydroxylová skupina	
	Voda. Hydratace, hydroniový ion. Hydroxidy a sloučeniny s hydroxylovou skupinou.	
	Voda jako spektroskopické rozpouštědlo	254
2.11	Methanol. Alkoholy	
	Methanol. Alifatické alkoholy. Alicyklické alkoholy. Alkoholy tvořící intramolekulární vodíkové mosty. Látky s hydroxylovou skupinou vázanou k heteroatomům. Polyhydroxysloučeniny	266
2.12	Fenol. Fenoly	
	Fenol. Deriváty fenolu. Fenoly s intramolekulárním vodíkovým mostem	295
2.13	Dimethylether. Etery. Formaly, acetaly a ketaly. Peroxidy, ozonidy	
	Dimethylether. Cyklické etery. Formaly, acetaly a ketaly. Peroxidy, ozonidy. Komplexy etherů	308
2.14	Disiloxan. Siloxany, germoxany a sloučeniny typu $R_nXOYR_m$	
	Disiloxan. Sloučeniny se skupinami $SiOX$ a $XOX$ ( $X = Ge, Sn, Ti$ atd.). Alkoxysilany a alkoxyxiloxany. Alkoxyxiloučeniny	322
2.15	Sírovodík, disulfan. Sloučeniny dvojmocné síry, thioly, sulfidy a disulfidy. Sloučeniny selenu a telluru	
	Sírovodík a disulfan. Thioly. Sulfidy, disulfidy a polysulfidy. Cyklické thioly a sulfidy. Sloučeniny selenu a telluru. Síra vázaná k atomu křemíku. Komplexy sirných sloučenin	335
2.16	Halogenidy	
	Halogenovodíky, halogeny a halogenidy alkalických kovů. Halogenidy prvků druhé hlavní a vedlejší podskupiny periodické soustavy. Halogenidy boru a hliníku. Halogenidy prvků čtvrté hlavní podskupiny a některé tetrahalogenionty. Halogenidy prvků páté hlavní podskupiny. Fluoridy $XF_6$ prvků šesté podskupiny a hexahalogenionty	348
2.17	Alkylhalogenidy	
	Halogenderiváty methanu. Primární monochlorderiváty. Sekundární monochlorderiváty. Terciární monochlorderiváty. Polychloralkany. Alicyklické chlorderiváty. Brom- a jodderiváty alkanů. Halogenderiváty ethylenu. Arylhalogenidy. Halogenderiváty křemíku, germania a cínu	366
2.18	Diboran. Borany a alany	
	Skupina $BH_3$ . Diboran. Alkylderiváty boranů. Vyšší borany. Karborany. Alany	382
2.19	Ethylen. Zeiseho sůl. Sloučeniny s vinylovou skupinou $H_2C=CHX$	
	Ethylen. Zeiseho sůl. Monosubstituovaný ethylen a vinylhalogenidy. Vinylderiváty prvků čtvrté hlavní podskupiny. Vinylderiváty prvků dalších skupin. Vinylderiváty s organickou skupinou	391

2.20	Propen. Acyklické alkeny Propen. Substitute atomů vodíku molekuly ethyleny alkylsubstituenty. Vliv alkylsubstituentů na vibraci dvojně vazby	404
2.21	Cyklobuten. Cykloalkeny a jejich deriváty Cyklobuten. Cykloalkeny. Methylencykloalkany	413
2.22	Propin. Alkin a polyalkiny. Acetylidy Propin. 1-Alkiny. Alkiny a polyalkiny. Vliv heteroatomů na vibraci trojné vazby. Acetylidy	421
2.23	Propadien. Alleny a kumuleny Propadien. Deriváty propadienu. Kumuleny	433
2.24	Benzen. Monosubstituované deriváty benzenu. „Anorganický“ benzen Benzen. Monosubstituované deriváty benzenu. Významné typy monosubstituovaných derivátů benzenu. Rozpouštědlový efekt. „Anorganický“ benzen-borazin	439
2.25	Vícenásobně substituované deriváty benzenu Disubstituované deriváty benzenu. Troj- a vícenásobně substituované deriváty benzenu. Určení typu substituce benzenového jádra. Substituenty benzenového jádra	458
2.26	Naftalen. Polycyklické aromatické sloučeniny Naftalen a lineárně anelované uhlovodíky. Další typy kondensovaných uhlovodíků	475
2.27	Pyridin. Deriváty pyridinu. Aziny Pyridin. Deriváty pyridinu. Soli pyridinia a komplexy pyridinu. Pyridin-N-oxid a jeho deriváty. Chinolin. Šestičlenné dusíkaté heterocykly se dvěma a více heteroatomy	482
2.28	Pyrrol. Pětičlenné heteroaromatické systémy. Azoly. Furan, thiofen Pyrrol. Azoly. Thiofen, furan	496
2.29	Ferrocen a metaloceny. Molekuly se sendvičovou a polosendvičovou strukturou Ferrocen. Metaloceny. Komplexy se šesti- až osmičlennými aromatickými kruhy	509
2.30	Methylenimin. Sloučeniny s dvojnými vazbami $C=N$ a $N=N$ Methylenimin. Aldiminy a ketiminy. Struktury obsahující imoniovou dvojnou vazbu $C=N^+$ . Chinonimin. Hydrazon. Aziny. Semikarbazony a thiosemikarbazony. Oximy. Sloučeniny typu $R^1C=NR^2(X)$ . Azosloučeniny	520
2.31	Kyanovodík. Sloučeniny s trojnými vazbami $C\equiv N$ , $N\equiv N$ a $C\equiv O$ Kyanovodík a jeho isotopické deriváty. Acetonitril a alifatické nasycené nitrily. Nenasycené a aromatické nitrily. Isonitrily. Sloučeniny $X(CN)_n$ , kyanidy. Komplexy nitrilů a isonitrilů. Vazba $N=N$ , ion diazonia. Vazba $C=O$ , ion acylia	534

- 2.32 Acetaldehyd. Nasycené aldehydy. Nasycené acyklické ketony  
Acetaldehyd. Aldehydy. Dialkylketony. Strukturní korelace 552
- 2.33 Cyklobutanon. Cyklické ketony  
Cyklobutanon. Cyklické ketony. Bicyklické a polycyklické ketony. Transanulární interakce karbonylové skupiny 567
- 2.34 Propinal. Nenasycené a aromatické aldehydy. Nenasycené acyklické a cyklické ketony, aromatické ketony  
Propinal. Nenasycené aldehydy. Nenasycené ketony. Konjugace karbonylové skupiny s trojčlenným kruhem. Některé další konjugované ketony 579
- 2.35 Kyselina octová. Karboxylové kyseliny a jejich deriváty, estery, laktony, halogenidy, azidy, thiolestery. Soli karboxylových kyselin  
Kyselina octová. Mastné kyseliny. Nenasycené konjugované a aromatické karboxylové kyseliny. Asociace karboxylových kyselin. Rotační isomerie v karboxylové skupině a intramolekulární asociace. Halogenidy karboxylových kyselin. Estery karboxylových kyselin. Acyloxyderiváty. Azidy karboxylových kyselin. Thiokarboxylové kyseliny a jejich estery. Laktony. Komplexy chloridů a esterů karboxylových kyselin. Soli karboxylových kyselin a karboxylátový ion. Empirické korelace karbonylové frekvence 600
- 2.36 N-Methylacetamid. Amidy a laktamy. Polyamidy. Polypeptidy, bílkoviny  
N-Methylacetamid. Amidy a laktamy. Polyamidy. Polypeptidy, bílkoviny 634
- 2.37 Glycin. Obojetný ion. Aminokyseliny, jejich soli a deriváty  
Glycin.  $\alpha$ -Aminokyseliny a jejich soli. Aminoderiváty kyseliny benzoové, heterocyklické kyseliny. Obojetné ionty jiných typů aminokyselin 668
- 2.38 Karbonylhalogenidy. Deriváty kyseliny uhličitě  
Karbonylhalogenidy. Deriváty kyseliny uhličitě 679
- 2.39 Diketony a dikarbonylové sloučeniny  
Glyoxal. Diacetyl a  $\alpha$ -diketony. Neenolisující  $\beta$ -diketony.  $\gamma$ -Diketony. Dikarboxylové kyseliny a jejich deriváty. Anhydridy karboxylových kyselin. Diacylperoxydy. Di- a triacyl aminy. Polykarbonylové sloučeniny. Enolisující  $\beta$ -dikarbonylové sloučeniny. Kovové cheláty  $\beta$ -dikarbonylových sloučenin. Chinony. Acyloxyketony 684
- 2.40 Thiofosgen. Sloučeniny s dvojnou vazbou C=S a C=Se  
Thiofosgen. Thioketony a nedusíkaté thionderiváty. Thioamidy, thioamocovina a jejich deriváty. Sloučeniny s C=Se vazbou. Sloučeniny s P=S a P=Se vazbou 702
- 2.41 Karbonyly kovů  
Tetrakarbonyl niklu. Pentakarbonyl železa. Hexakarbonyl molybdenu. Karbonyly kovů. Vícejaderné karbonyly kovů. Substituované karbonyly kovů. Rozpouštědlové efekty ve vibračních spektrech karbonylů kovů 708

2.42	Sloučeniny obsahující skupiny NO, PO a SO Sloučeniny se skupinou N=O. Sloučeniny se skupinou P=O. Sloučeniny se skupinou S=O	718
2.43	Kysličník uhličitý a lineární tříatomové molekuly X=Y=Z. Tříatomové lineární ionty (X=Y=Z) <sup>-</sup> . Sloučeniny s lineárními skupinami X=Y=Z Lineární tříatomové molekuly X=Y=Z. Tříatomové lineární ionty (X=Y=Z) <sup>-</sup> . Sloučeniny s lineárními skupinami X=Y=Z	732
2.44	Kysličník dusičitý a sířičitý. Nelineární tříatomové ionty (X=Y=Z) <sup>-</sup> . Sloučeniny s nelineárními skupinami X=Y=Z Nelineární tříatomové molekuly. Nelineární tříatomové ionty (X=Y=Z) <sup>-</sup> . Sloučeniny se skupinou NO <sub>2</sub> . Sloučeniny se skupinou SO <sub>2</sub>	748
2.45	Anorganické sloučeniny a anionty typu XO <sub>3</sub> a XO <sub>4</sub> Sloučeniny a ionty XO <sub>3</sub> symetrie $\mathcal{D}_{3h}$ . Anionty [XO <sub>3</sub> ] <sup>m-</sup> symetrie $\mathcal{C}_{3v}$ . Sloučeniny a anionty XO <sub>4</sub> symetrie $\mathcal{T}_d$	769
Dodatek A		
	Maticová symbolika a základy maticové algebry Typy matic. Maticová algebra. Lineární transformace. Kvadratické formy. Sekulární rovnice	781
Dodatek B		
	Základní pojmy teorie grup Axiomy definující grupu. Isomorfní a homomorfní grupy. Maticové reprezentace grupy	792
Dodatek C		
	Tabulky charakterů neredukovatelných reprezentací některých bodových grup	796
Dodatek D		
	Minimalisace nelineární funkce (iterační výpočet silových konstant, matematické rozlišení překrytých pásů)	802
Dodatek E		
	Konverse vlnových délek (μm) na vlnočty (cm <sup>-1</sup> ) Monografická literatura o teorii, aplikacích a měření infračervených a Ramanových spekter	805 806
	Rejstřík	812