

Obsah

Předmluva.....	13
1 Symetrie ve strukturní chemii	15
Literatura	23
2 Základy teorie chemické vazby	24
2.1 Úvod	24
2.2 Atomové jádro	24
2.3 Elektronový obal atomu.....	27
2.3.1 Korpuskulárně-vlnová teorie a Heisenbergův princip neurčitosti.....	27
2.3.2 Vlnová funkce	29
2.3.3 Atomové orbitaly.....	30
2.3.4 Kvantová čísla a Pauliho princip výlučnosti.....	36
2.3.5 Rozvoj kombinací kvantových čísel a atomové orbitaly	37
2.3.6 Energie atomových orbitalů víceelektronových atomů, orbitální aproximace, princip výstavby	39
2.3.7 Stav a mikrostavy odvozené od elektronových konfigurací. Vektorový model atomu.....	45
2.3.7.1 Mikrostavy a atomové spektrum vodíku	49
2.3.7.2 Mikrostavy a atomové spektrum helia. Výměnná energie.....	52
2.3.7.3 Mikrostavy atomu uhlíku	54
2.3.8 Elektronová konfigurace atomů a kationtů a jejich termy	55
2.3.9 Periodicita elektronové konfigurace valenční sféry atomů a periodický zákon	57
2.3.10 Stabilita iontů	60
2.3.11 Periodicita oxidačních čísel	62
2.3.12 Periodicita ionizačních energií	63
2.3.13 Periodicita elektronové afinity.....	66
2.3.14 Poloměr iontů	67
2.3.15 Polarizace iontů	70
2.3.16 Elektronegativita a iontovost vazby.....	71
2.3.17 Dipólový moment částic.....	74
2.3.18 Energie vazby	75
2.3.19 Délka vazby	77
2.3.20 s-Charakter vazby	78
2.3.21 Parametry chemických vazeb P — Cl, Cl — F, I — F, N — O, N — F, N — Cl, N — Br a jejich změny ve sloučeninách	79
2.4 Teorie molekulových orbitalů.....	79
2.4.1 Metoda LCAO-MO	79
2.4.2 Homonukleární a heteronukleární biatomické částice 1. periody	84
2.4.3 Homonukleární biatomické částice 2. periody.....	85
2.4.4 Molekulové orbitaly heteronukleární biatomické částice CO	86
2.4.5 Izoelektronový princip.....	88
2.4.6 Molekulové orbitaly heteronukleární triatomické molekuly H ₂ O.....	88
2.4.7 Elektronové spektrum molekuly H ₂	91

2.4.8 Molekulové orbitály a elektronové strukturní vzorce	92
2.4.9 Elektronová struktura a tvary jednoduchých víceatomových částic – Walshovy korelační diagramy	93
2.4.10 Pearsonovo pravidlo	95
2.4.11 Hybridizace atomových orbitalů	96
2.4.12 Model geometrie částic nepřechodných prvků – VSEPR	98
2.5 Chemické reakce a symetrie	102
2.5.1 Princip zachování spinu	102
2.5.2 Princip zachování orbitalové symetrie	103
2.5.3 Teorie hraničních orbitalů	104
2.5.4 Izolobální analogie	105
Literatura	106
3 Symetrie chemických struktur. Krystalochemie	107
3.1 Symetrie chemických částic a krystalů	107
3.1.1 Prvky a operace symetrie, grupa	107
3.1.2 Bodové grupy a jejich rozdělení	108
3.1.3 Určení bodové grupy izolovaného geometrického útvaru	108
3.1.4 Krystalografické bodové grupy	109
3.1.5 Hierarchie krystalografických bodových grup ($C_1 - O_h$)	109
3.1.6 Elementární buňka	109
3.1.7 Translační grupy. Bravaisovy mřížky	111
3.1.8 Krystalografické soustavy, bodové a translační grupy	112
3.1.9 Prostorové grupy	112
3.2 Struktury krystalů	114
3.2.1 Krystalové struktury základních typů sloučenin	114
3.2.2 Geometrické faktory ovlivňující koordinaci atomů v krystalech	124
3.2.3 Izostrukturnost a izomorfie, epitaxe	125
3.2.4 Diadochie, tuhé roztoky, hyperstruktury	127
3.2.5 Polymorfie	128
3.2.6 Kovové krystaly	129
3.2.7 Kovalentní krystaly	130
3.2.8 Iontové krystaly	131
3.2.9 Krystaly s van der Waalsovými (molekulovými) vazbami	131
3.2.10 Vlastnosti různých typů krystalů a energie vazby	132
3.2.11 Přehled strukturních typů podle druhu vazby v krystalech	133
3.3 Pásový model elektronové struktury v pevných látkách	134
3.4 Vysokoteplotní supravodivé směsné oxidy	135
Literatura	136
4 Chemie nekovů a polokovů	137
4.1 Vodík	137
4.1.1 Úvod	137
4.1.2 Elektronová konfigurace a postavení v periodickém systému	138
4.1.3 Fyzikální vlastnosti	138
4.1.4 Příprava	139
4.1.5 Výroba	140
4.1.6 Vazba atomu vodíku ve sloučeninách. Vodíková vazba	140
4.1.7 Vodíková vazba a fyzikálně-chemické vlastnosti sloučenin	143
4.1.8 Chemické vlastnosti vodíku	143
4.1.9 Hydridy	144

4.2 Kyslík	146
4.2.1 Úvod.....	146
4.2.2 Singletový kyslík $^1\text{O}_2$	147
4.2.3 Fyzikální vlastnosti.....	148
4.2.4 Vazba atomu kyslíku ve sloučeninách.....	149
4.2.5 Oxidy.....	150
4.2.6 Podvojně oxidy.....	152
4.2.7 Peroxid vodíku, peroxidy a peroxosloučeniny.....	152
4.2.8 Hyperoxidy.....	155
4.2.9 Ozon a ozonidy.....	155
4.2.10 Oxidace a redukce. Standardní oxidačně-redukční potenciály	156
4.3 Halogeny	159
4.3.1 Úvod.....	159
4.3.2 Postavení v periodickém systému a některé fyzikální a chemické vlastnosti halogenů.....	160
4.3.3 Výroba halogenů	162
4.3.4 Přehled a příprava oxidů halogenů	162
4.3.5 Přehled a reakce kyslíkatých kyselin	165
4.3.6 Stereochemie oxidů halogenů.....	171
4.3.7 Přehled a reakce interhalogenových sloučenin	172
4.3.8 Stereochemie interhalogenových sloučenin.....	174
4.3.9 Halogenovodíky	174
4.3.10 Halogenidy a polyhalogenidy	175
4.3.11 Fluorid-oxidy halogenů	178
4.3.12 Kationty halogenů a jejich sloučeniny.....	180
4.4 Vzácné plyny	182
4.4.1 Úvod.....	182
4.4.2 Fyzikální vlastnosti.....	182
4.4.3 Elektronová konfigurace a postavení v periodickém systému	183
4.4.4 Klathráty.....	183
4.4.5 Přehled sloučenin vzácných plynů.....	184
4.4.6 Příprava a reakce sloučenin vzácných plynů	184
4.4.7 Stereochemie sloučenin xenonu	186
4.4.8 Vazby ve sloučeninách vzácných plynů	186
4.5 Síra, selen, tellur a polonium	187
4.5.1 Úvod.....	187
4.5.2 Alotropické modifikace	188
4.5.3 Elektronová konfigurace a postavení prvků v periodickém systému.....	189
4.5.4 Sulfany (hydridy síry).....	190
4.5.5 Chalkogenidy kovů.....	191
4.5.6 Halogenidy	192
4.5.7 Oxidy a oxokyseliny síry.....	194
4.5.8 Halogenid-oxidy síry	199
4.5.9 Sloučeniny s vazbou síra–dusík.....	200
4.5.10 Oxidy a oxokyseliny selenu a telluru.....	201
4.5.11 Polyatomové kationty chalkogenů.....	202
4.5.12 Sloučeniny polonia	202
4.6 Dusík	203
4.6.1 Úvod.....	203
4.6.2 Porovnání chemie dusíku a fosforu	203
4.6.3 Atomové a fyzikální vlastnosti, chemická reaktivita dusíku.....	204
4.6.4 Sloučeniny dusíku s vodíkem. Pyramidální inverze NH_3 (pseudorotace). Kapalným amoniakem jako nevodným rozpouštědlem.....	205

4.6.5	Nitridy a nitridokomplexy	209
4.6.6	Sloučeniny s halogeny	210
4.6.7	Oxidy a oxokyseliny dusíku	212
4.7	Fosfor.....	220
4.7.1	Úvod.....	220
4.7.2	Elektronová konfigurace a postavení v periodickém systému	220
4.7.3	Výroba fosforu a alotropické modifikace	220
4.7.4	Oxidy, sulfidy a oxid-sulfidy fosforu	222
4.7.5	Oxokyseliny a oxoanionty fosforu.....	223
4.7.6	Fosfidy.....	228
4.7.7	Sloučeniny fosforu s vodíkem	229
4.7.8	Sloučeniny fosforu s halogeny. Pseudorotace.....	230
4.7.9	Sloučeniny fosforu s dusíkem.....	232
4.7.10	Cyklus fosforu v přírodě.....	233
4.8	Arsen, antimon a bismut	233
4.8.1	Úvod.....	233
4.8.2	Výroba kovů	234
4.8.3	Alotropické modifikace a fyzikální vlastnosti	235
4.8.4	Chemická reaktivita a skupinové trendy	236
4.8.5	Hydridy	237
4.8.6	Oxidy a oxosloučeniny	238
4.8.7	Halogenidy, halogenid-oxidy a halogenidové komplexy.....	243
4.8.8	Sloučeniny se sírou.....	246
4.8.9	Anionty a kationty prvků 5. skupiny	248
4.9	Uhlík.....	250
4.9.1	Úvod.....	250
4.9.2	Alotropické modifikace	250
4.9.3	Chemické vlastnosti.....	251
4.9.4	Interkalátové sloučeniny grafitu	252
4.9.5	Oxidy a uhličitany	252
4.9.6	Karbidy.....	254
4.9.7	Hydridy, halogenidy a halogenid-oxidy	256
4.9.8	Chalkogenidy	257
4.9.9	Kyanidy a jiné sloučeniny s vazbou C — N.....	258
4.9.10	Organokovové sloučeniny	260
4.10	Křemík	262
4.10.1	Úvod.....	262
4.10.2	Alotropické modifikace	262
4.10.3	Příprava a výroba, vlastnosti	263
4.10.4	Silicidy a silany	263
4.10.5	Halogenidy křemíku	264
4.10.6	Oxidy křemíku.....	265
4.10.7	Křemičitany – silikátové minerály.....	266
4.10.8	Silikony a siloxany	270
4.10.9	Sklo a porcelán	271
4.11	Germanium a cín	271
4.11.1	Úvod.....	271
4.11.2	Fyzikální vlastnosti.....	272
4.11.3	Chemická reaktivita.....	272
4.11.4	Hydridy.....	273
4.11.5	Halogenidy a halogenidové komplexy	274
4.11.6	Oxidy a hydroxidy, sulfidy a thiosoli	275

4.11.7 Soli oxokyselin	276
4.11.8 Sloučeniny s vazbou kov–kov	276
4.12 Bor	277
4.12.1 Úvod	277
4.12.2 Příprava a chemické vlastnosti	277
4.12.3 Alotropické modifikace	278
4.12.4 Boridy	280
4.12.5 Borany – třířadové dvouelektronové vazby	281
4.12.6 Heteroborany	285
4.12.7 Halogenidy boru a donor-akceptorové vlastnosti	287
4.12.8 Sloučeniny s kyslíkem	288
4.12.9 Sloučeniny s dusíkem	290
Literatura	292
5 Koordinační sloučeniny	293
5.1 Pojem koordinační sloučenina	293
5.2 Příprava koordinačních sloučenin	294
5.3 Koordinační čísla a koordinační polyedry	294
5.4 Izomerie komplexů	295
5.4.1 Geometrická izomerie nebo stereoizomerie (konfigurační izomerie)	295
5.4.1.1 Struktura a symetrie komplexů s koordinačním číslem 4	296
5.4.1.2 Struktura a symetrie komplexů s koordinačním číslem 6	298
5.4.2 Ionizační izomerie	299
5.4.3 Vazebná izomerie	300
5.4.4 Koordinační izomerie	300
5.4.5 Polymerizační izomerie	300
5.5 Elektronová konfigurace komplexů – teorie ligandového pole	301
5.6 Magnetické vlastnosti komplexů	305
5.7 Jahnův–Tellerův efekt	308
5.8 Elektronová absorpční spektra komplexů	310
5.9 Stabilizační energie ligandového pole (LFSE)	320
5.10 Popis vazby v koordinačních sloučeninách s využitím představy delokalizovaných MO	322
5.11 Čtverná vazba $\sigma+2\pi+\delta$ ve sloučeninách s vazbou kov–kov	325
5.12 Reakce koordinačních sloučenin	327
Literatura	328
6 Chemie kovů	329
6.1 Úvod	329
6.2 Obecné metody přípravy a výroby kovů	329
6.3 Přehled chemických vlastností kovů v závislosti na jejich postavení v periodickém systému	331
6.3.1 Diagonální podobnost	331
6.3.2 Bazicitu oxidů a hydroxidů	333
6.4 Alkalické kovy	335
6.4.1 Výskyt v přírodě a výroba	335
6.4.2 Fyzikální a chemické vlastnosti	335
6.4.3 Oxidy, peroxidy, hyperoxidy, ozonidy a suboxidy	336
6.4.4 Soli oxokyselin a další sloučeniny	338
6.5 Beryllium, hořčík a kovy alkalických zemin Ca, Sr a Ba	343
6.5.1 Výskyt v přírodě a výroba	343
6.5.2 Fyzikální a chemické vlastnosti	344
6.5.3 Sloučeniny	344

6.6 Hliník, gallium, indium a thallium.....	346
6.6.1 Výskyt v přírodě a výroba	346
6.6.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	347
6.6.3 Sloučeniny	348
6.7 Olovo.....	352
6.7.1 Výskyt v přírodě a výroba	352
6.7.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	352
6.7.3 Sloučeniny	353
6.8 Skandium, yttrium, lanthan a aktinium	355
6.8.1 Výskyt v přírodě a výroba	355
6.8.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	356
6.8.3 Sloučeniny	357
6.9 Titan, zirkonium a hafnium	357
6.9.1 Výskyt v přírodě a výroba	357
6.9.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	358
6.9.3 Sloučeniny	359
6.10 Vanad, niob a tantal	362
6.10.1 Výskyt v přírodě a výroba	362
6.10.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	363
6.10.3 Sloučeniny	364
6.11 Chrom, molybden a wolfram	368
6.11.1 Výskyt v přírodě a výroba	368
6.11.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	369
6.11.3 Sloučeniny	370
6.12 Mangan, technecium a rhenium	375
6.12.1 Výskyt v přírodě a výroba	375
6.12.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	376
6.12.3 Sloučeniny	377
6.13 Železo, ruthenium a osmium	381
6.13.1 Výskyt v přírodě a výroba	381
6.13.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	381
6.13.3 Sloučeniny	383
6.14 Kobalt, rhodium a iridium	390
6.14.1 Výskyt v přírodě a výroba	390
6.14.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	390
6.14.3 Sloučeniny	392
6.15 Nikl, palladium a platina.....	394
6.15.1 Výskyt v přírodě a výroba	394
6.15.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	394
6.15.3 Sloučeniny	395
6.16 Měď, stříbro a zlato	400
6.16.1 Výskyt v přírodě a výroba	400
6.16.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	401
6.16.3 Sloučeniny	403
6.17 Zinek, kadmium a rtuť	407
6.17.1 Výskyt v přírodě a výroba	407
6.17.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	408
6.17.3 Sloučeniny	409
6.18 Lanthanoidy	413
6.18.1 Výskyt v přírodě a výroba	413
6.18.2 Fyzikální a chemické vlastnosti.....	413
6.18.3 Sloučeniny	416

6.19 Aktinoidy	417
6.19.1 Výskyt v přírodě a výroba	417
6.19.2 Fyzikální a chemické vlastnosti	418
6.19.3 Sloučeniny	419
Literatura	421
7 Krystalové struktury a vibrační spektra	422
7.1 Interpretace vibračních spekter krystalických látek	422
7.2 Vibračněspektrální systematika krystalových struktur	425
7.2.1 Struktury G_M (studium molekulární symetrie G_M)	425
7.2.1.1 Oktaedrické částice ve struktuře $O_h^5 - Fm\bar{3}m$	426
7.2.1.2 Tetraedrické částice ve struktuře $T_d^1 - P\bar{4}3m$	429
7.2.1.3 Tetraedrické částice ve struktuře $T_d^2 - F\bar{4}3m$	430
7.2.1.4 Trigonálně pyramidální částice ve struktuře $C_{3v}^5 - R3m$	431
7.2.1.5 Čtvercové částice ve struktuře $D_{4h}^1 - P4/mmm$	432
7.2.2 Struktury G_S (studium site-symetrie G_S)	433
7.2.2.1 Oktaedrické částice v site-symetrii D_{3d} ve strukturách $D_{3d}^3 - P\bar{3}m1$ a $D_{3d}^5 - R\bar{3}m$	435
7.2.2.2 Tetraedrické částice v site-symetrii S_4 ve struktuře $S_4^2 - I\bar{4}$	436
7.2.2.3 Trigonálně pyramidální částice v site-symetrii C_3 ve struktuře $C_3^4 - R3$	438
7.2.3 Struktury G_F (studium faktorové symetrie G_F)	439
7.2.3.1 Oktaedrické částice v site-symetrii C_{3v} ve struktuře $C_{6v}^4 - P6_3mc$	440
7.2.3.2 Tetraedrické částice v site-symetrii T_d ve struktuře $O_h^7 - Fd\bar{3}m$	441
7.2.3.3 Tetraedrické částice v site-symetrii D_{2d} ve struktuře $D_{4h}^{19} - I4_1/amd$	442
7.2.3.4 Tetraedrické částice v site-symetrii C_1 ve struktuře $C_{2h}^5 - P2_1/c$	443
7.2.3.5 Trigonálně pyramidální částice v site-symetrii C_s ve struktuře $D_{2h}^{17} - Cmcm$	445
7.2.3.6 Čtvercová částice v site-symetrii C_i ve struktuře C_{2h}^5 .	
Interpretace ve vrstevnaté struktuře ve vrstevové prostorové grupě D_{4h}^1	
v site-symetrii D_{4h}	447
Literatura	448
Dodatek: Atomové orbitaly	449
Rejstřík sloučenin a struktur	461
Rejstřík věcný	492
Rejstřík jmenný	503