

O B S A H

PŘEDMLUVA	5
SEZNAM SYMBOLŮ	9
1. MATEMATIKA	12
Funkce	14
Vektory	19
Matice	22
Operátory	33
2. ÚVOD DO KVANTOVÉ CHEMIE: OBECNÁ ČÁST	41
Navození Schrödingerovy rovnice	43
Vlastnosti a použití řešení Schrödingerovy rovnice: částice v potenciálové jámě	51
Vodíkový atom a atomy těžší	62
Molekulový ion vodíku a vodíková molekula: chemická vazba ...	70
3. ÚVOD DO TEORIE MOLEKULOVÝCH ORBITALŮ A JEJICH APLIKACÍ	81
Bornova-Oppenheimerova aproximace	82
Popis pomocí molekulových orbitalů (MO aproximace)	83
Vyjádření molekulových orbitalů lineární kombinací atomových orbitalů (LCAO aproximace)	86
Zmenšení base	88
Zanedbání některých integrálů	90
Empirické parametry	91
Separace σ - π	92
Zanedbání elektronové repulse	94
Hückelova metoda molekulových orbitalů (HMO)	97
HMO zpracování konjugovaných uhlovodíků	100
Rozšíření HMO metody na systémy s heteroatomy	111

Praktická provádění HMO výpočtů	114
Nejvýznamnější HMO charakteristiky a jejich chemické aplikace	115
Nedostatky a omezení HMO metody	122
Rozšířená Hückelova metoda (Extended Hückel Theory, EHT) ...	123
Lokalisované a delokalisované σ -molekulové orbitály	126
Chemické aplikace rozšířené Hückelovy metody	127
Nedostatky a omezení rozšířené Hückelovy metody	132
LITERATURA	134
VĚCNÝ REJSTŘÍK	135