

|                 |   |
|-----------------|---|
| Předmluva ..... | 6 |
|-----------------|---|

## 1. Kvantová mechanika a stavba atomu

|                                                                          |    |
|--------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1 Úvodní poznámky .....                                                | 7  |
| 1.2 Vlnová funkce a Schrödingerova rovnice .....                         | 8  |
| 1.3 Vodíkový atom a atomy vodíkového typu .....                          | 10 |
| 1.4 Grafické znázornění atomových orbitalů .....                         | 16 |
| 1.5 Absorpční a emisní spektrum vodíkového atomu .....                   | 20 |
| 1.5.1 Elektromagnetické záření .....                                     | 21 |
| 1.5.2 Spektrum atomového vodíku .....                                    | 22 |
| 1.6 Spin elektronu .....                                                 | 24 |
| 1.7 Vlnová 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 .....                                             | 34 |
| 1.11 Atomové poloměry .....                                              | 36 |
| 1.12 Spektroskopická symbolika pro atomy .....                           | 38 |
| Úlohy .....                                                              | 43 |

## 2. Chemická vazba ve dvouatomových molekulách

|                                                                     |    |
|---------------------------------------------------------------------|----|
| 2.1 Křivka potenciální energie .....                                | 45 |
| 2.2 Metoda valenční vazby .....                                     | 47 |
| 2.2.1 Heitlerova-Londonova vlnová funkce pro molekulu vodíku .....  | 47 |
| 2.2.2 Zlepšení Heitlerovy-Londonovy vlnové funkce .....             | 49 |
| 2.2.3 Spinová část vlnové funkce .....                              | 50 |
| 2.3 Metoda molekulových orbitalů .....                              | 51 |
| 2.3.1 Vlnová funkce pro molekulu vodíku .....                       | 51 |
| 2.3.2 Vazebné a antivazebné vlastnosti molekulových orbitalů .....  | 54 |
| 2.3.3 Překryv atomových orbitalů .....                              | 56 |
| 2.3.4 Prvky a operace symetrie. Symetrie orbitalů .....             | 57 |
| 2.3.5 Klasifikace molekulových orbitalů dvouatomových molekul ..... | 61 |
| 2.3.6 Homonukleární dvouatomové molekuly .....                      | 63 |
| 2.3.7 Metoda MO a molekulové ionizační potenciály .....             | 66 |
| 2.3.8 Heteronukleární dvouatomové molekuly .....                    | 67 |
| 2.4 Iontová vazba .....                                             | 71 |
| 2.5 Klasifikace elektronových stavů dvouatomových molekul .....     | 76 |
| Úlohy .....                                                         | 79 |

## 3. Elektronová struktura víceatomových molekul

|                                                                 |    |
|-----------------------------------------------------------------|----|
| 3.1 Metoda molekulových orbitalů pro víceatomové molekuly ..... | 81 |
| 3.2 Delokalizované a lokalizované molekulové orbitály .....     | 83 |
| 3.2.1 Delokalizované MO pro $\text{BeH}_2$ .....                | 84 |
| 3.2.2 Lokalizované MO pro $\text{BeH}_2$ .....                  | 86 |

|       |                                                                      |     |
|-------|----------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.3.1 | Hybridizace sp <sup>α</sup> .....                                    | 87  |
| 3.3.2 | Energie hybridních orbitalů .....                                    | 87  |
| 3.3.3 | Hybridizace zahrnující orbitály d .....                              | 91  |
| 3.4   | Tvary molekul. Repulze valenčních elektronových párů .....           | 93  |
| 3.5   | Delokalizované vazby .....                                           | 96  |
| 3.5.1 | Molekulový ion vodíku H <sub>3</sub> <sup>+</sup> .....              | 101 |
| 3.5.2 | Sloučeniny vzácných plynů: KrF <sub>2</sub> , XeF <sub>2</sub> ..... | 101 |
| 3.5.3 | Molekula vody .....                                                  | 102 |
| 3.6   | Walshovy diagramy .....                                              | 103 |
| 3.7   | Molekuly s nadbytkem nebo deficitem elektronů .....                  | 107 |
| 3.7.1 | Ion I <sub>3</sub> <sup>-</sup> – systém s nadbytkem elektronů ..... | 108 |
| 3.7.2 | Diborán – molekula s elektronovým deficitem .....                    | 109 |
| 3.8   | Vazby v konjugovaných uhlovodících .....                             | 110 |
| 3.9   | Elektronová struktura iontů přechodných kovů .....                   | 114 |
| 3.9.1 | Prostorové uspořádání komplexů přechodných kovů .....                | 114 |
| 3.9.2 | Teorie krystalového pole .....                                       | 115 |
| 3.9.3 | Symetrie komplexů. Jahnův-Tellerův jev .....                         | 117 |
| 3.9.4 | Složený orbitalový model pro komplexy .....                          | 119 |
| 3.9.5 | Teorie ligandového pole .....                                        | 121 |
| 3.10  | Van der Waalsovy vazby .....                                         | 123 |
| 3.11  | Vodíková vazba .....                                                 | 126 |
| 3.12  | Zachování orbitalové symetrie při chemických reakcích .....          | 128 |
| 3.13  | Spektroskopické stavy nelineárních molekul .....                     | 132 |
|       | Úlohy .....                                                          | 134 |

#### 4. Vazby v pevných látkách

|       |                                                  |     |
|-------|--------------------------------------------------|-----|
| 4.1   | Krystalické a amorfni látky .....                | 136 |
| 4.2   | Typy vazeb v krystalech .....                    | 136 |
| 4.3   | Iontové krystaly .....                           | 137 |
| 4.4   | Kovalentní krystaly .....                        | 139 |
| 4.5   | Kovy .....                                       | 141 |
| 4.5.1 | Kovová vazba .....                               | 141 |
| 4.5.2 | Energetické pásy v krystalech .....              | 142 |
| 4.5.3 | Nekovy a polovodiče .....                        | 145 |
| 4.6   | Molekulové krystaly .....                        | 149 |
| 4.7   | Krystalové struktury s několika typy vazeb ..... | 151 |
| 4.7.1 | Nitrid boru .....                                | 151 |
| 4.7.2 | Elementární bor .....                            | 152 |
| 4.7.3 | Fullereny .....                                  | 153 |
| 4.7.4 | Silikáty .....                                   | 154 |
|       | Úlohy .....                                      | 155 |

#### 5. Struktura molekul a molekulová spektra

|       |                                                                          |     |
|-------|--------------------------------------------------------------------------|-----|
| 5.1   | Přehled spektrálních metod .....                                         | 157 |
| 5.2   | Interakce elektromagnetického záření s molekulami a měření spekter ..... | 159 |
| 5.3   | Rotační spektra .....                                                    | 162 |
| 5.3.1 | Tuhý rotor .....                                                         | 162 |
| 5.3.2 | Rotační spektra dvouatomových molekul .....                              | 163 |
| 5.3.3 | Příklad rotačního spektra – HCl .....                                    | 164 |
| 5.3.4 | Rotační spektra víceatomových molekul .....                              | 165 |
| 5.3.5 | Rotační Starkův jev .....                                                | 168 |
| 5.4   | Vibrační spektra .....                                                   | 169 |
| 5.4.1 | Lineární harmonický oscilátor .....                                      | 169 |

|                       |                                                                 |     |
|-----------------------|-----------------------------------------------------------------|-----|
| 5.4.2                 | Anharmonicitá .....                                             | 171 |
| 5.4.3                 | Vibračně-rotační spektra dvouatomových molekul .....            | 172 |
| 5.4.4                 | Vibrační spektra víceatomových molekul .....                    | 174 |
| 5.4.5                 | Analytické využití infračervených spekter .....                 | 177 |
| 5.5                   | Ramanova spektra .....                                          | 179 |
| 5.5.1                 | Ramanův rozptyl .....                                           | 179 |
| 5.5.2                 | Rotační Ramanova spektra .....                                  | 181 |
| 5.5.3                 | Vibrační Ramanova spektra .....                                 | 183 |
| 5.6                   | Elektronová spektra .....                                       | 184 |
| 5.6.1                 | Elektronové hladiny energie jednoduchých molekul .....          | 184 |
| 5.6.2                 | Vibrační a rotační struktura elektronových spekter .....        | 188 |
| 5.6.3                 | Elektronová spektra a barevnost složitějších molekul .....      | 191 |
| 5.6.4                 | Fluorescence a fosforescence .....                              | 193 |
| 5.7                   | Stimulovaná emise záření. Lasery .....                          | 195 |
| 5.7.1                 | Inverze populací. Funkce laseru .....                           | 195 |
| 5.7.2                 | Rubínový laser .....                                            | 196 |
| 5.7.3                 | Helium-neonový laser .....                                      | 197 |
| 5.7.4                 | Barvivové lasery .....                                          | 198 |
| 5.7.5                 | Excimerové lasery .....                                         | 199 |
| 5.7.6                 | Chemické lasery .....                                           | 200 |
| 5.8                   | Fotoelektronová spektroskopie .....                             | 201 |
| 5.9                   | Spektra magnetické rezonance .....                              | 202 |
| 5.9.1                 | Elektronová spinová (paramagnetická) rezonance (ESR, EPR) ..... | 202 |
| 5.9.2                 | Hyperjemná struktura spektra ESR .....                          | 206 |
| 5.9.3                 | Jaderná magnetická rezonance (NMR) .....                        | 209 |
| 5.9.4                 | Chemický posun a spin-spin interakce .....                      | 212 |
| 5.10                  | Mössbauerova spektra .....                                      | 215 |
| 5.11                  | Hmotnostní spektrometrie .....                                  | 217 |
| 5.12                  | Difrakční metody .....                                          | 220 |
| 5.12.1                | Princip difrakčních metod .....                                 | 220 |
| 5.12.2                | Difrakce rentgenového záření .....                              | 221 |
| 5.12.3                | Neutronová difrakce .....                                       | 224 |
| 5.12.4                | Elektronová difrakce .....                                      | 225 |
|                       | Úlohy .....                                                     | 229 |
|                       |                                                                 |     |
| 6. Vlastnosti molekul |                                                                 |     |
| 6.1                   | Elektrické vlastnosti .....                                     | 233 |
| 6.1.1                 | Polarizace dielektrik .....                                     | 233 |
| 6.1.2                 | Indukovaná (deformační) polarizace .....                        | 235 |
| 6.1.3                 | Orientační polarizace .....                                     | 236 |
| 6.1.4                 | Elektrický dipólový moment a struktura molekuly .....           | 237 |
| 6.2                   | Magnetické vlastnosti .....                                     | 239 |
| 6.2.1                 | Základní vztahy a definice .....                                | 239 |
| 6.2.2                 | Diamagnetismus .....                                            | 239 |
| 6.2.3                 | Paramagnetismus .....                                           | 240 |
| 6.3                   | Optické vlastnosti .....                                        | 242 |
| 6.3.1                 | Optická aktivita .....                                          | 242 |
| 6.3.2                 | Optická rotační disperze a cirkulární dichroismus .....         | 244 |
|                       | Úlohy .....                                                     | 248 |
|                       |                                                                 |     |
| Dodatek 1 .....       |                                                                 | 249 |
| Výsledky úloh .....   |                                                                 | 252 |
| Literatura .....      |                                                                 | 255 |