

OBSAH

1. ZÁKLADNÍ FYZIKÁLNÍ A CHEMICKÉ POJMY A VELIČINY	13
1.1 Veličiny, měrové jednotky a zacházení s fyzikálními rovnicemi	13
1.2 Hmota a energie	16
1.2.1 Veličiny hmotnost a energie a vztah mezi nimi	16
1.2.2 Kinetická a potenciální energie. Zákon o zachování hmoty a energie	18
1.2.3 Elementární částice hmoty	19
1.3 Elektrický náboj a jeho základní vlastnosti	20
1.4 Látky	23
1.4.1 Látky a jejich stavební jednotky	23
1.4.2 Udávání hmotnosti stavebních jednotek látek	24
1.4.3 Mocenství, oxidační číslo, vaznost	25
1.4.4 Udávání množství látek	26
1.5 Záření a jeho charakteristiky	28
1.6 Kvantová teorie	32
1.6.1 Základní principy	32
1.6.2 Hmota a vlnění	34
1.6.3 Kvantová teorie a pravděpodobnost	36
1.6.4 Kvantová mechanika atomů a molekul	36
1.7 Chemické děje	37
1.8 Soustavy látek	40
1.8.1 Stavové veličiny objem, tlak a teplota	41
1.8.2 Vyjadřování složení soustav	42
2. STRUKTURA BIOLOGICKÝCH SYSTÉMŮ	46
2.1 Stavba a vlastnosti atomů	46
2.1.1 Modely atomů	46
2.1.2 Atomové jádro	47
2.1.3 Uspořádání elektronů v atomu	50
2.1.4 Elektronové konfigurace prvků	55
2.1.5 Vlastnosti atomů jako odraz jejich stavby	57
2.1.6 Klasifikace prvků	61

2.2	Struktura jednoduchých molekul	61
2.2.1	Elektronová teorie chemické vazby	61
2.2.2	Polarita vazby. Stupnice elektronegativity prvků	64
2.2.3	Orbitalový model molekul	65
2.2.4	Směr vazeb. Hybridizace	69
2.2.5	Vazebné schopnosti atomu uhlíku	71
2.2.6	Základní vlastnosti vazeb	74
2.2.7	Nevazebné interakce	75
2.2.8	Prostorová stavba molekul	76
2.3	Struktura složitých molekul	80
2.3.1	Koordinační sloučeniny	80
2.3.2	Stavba molekul biopolymerů	85
2.4	Struktura souboru molekul a iontů	90
2.4.1	Interakce mezi molekulami a jejich součástmi	90
2.4.1.1	Van der Waalsovy síly	90
2.4.1.2	Vodíkové vazby	92
2.4.1.3	Hydrofobní interakce	94
2.4.2	Přehled soudržných sil stavebních součástí látek	95
2.4.3	Skupenské stavy látek	97
2.5	Molekulární organizace biologických systémů	98
3.	FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI LÁTEK	102
3.1	Typy fyzikálních vlastností	102
3.2	Vlastnosti látek související se strukturou jejich stavebních částic	103
3.2.1	Elektrické vlastnosti	103
3.2.2	Magnetické vlastnosti	107
3.2.3	Optické vlastnosti	108
3.2.3.1	Interakce látek s elektromagnetickým zářením	108
3.2.3.2	Molekulová spektra a energetické stavy molekul	110
3.2.4	Metody studující emitované záření	116
3.2.4.1	Emisní spektroskopie	116
3.2.4.2	Luminiscence a její využití	117
3.2.4.3	Ramanova spektroskopie	118
3.2.5	Metody založené na absorpci záření	120
3.2.5.1	Absorpce záření a zákony ji vyjadřující	120
3.2.5.2	Měření absorpance	122
3.2.5.3	Infračervená a mikrovlnná spektra	122
3.2.5.4	Elektronová spektra	124
3.2.5.5	Atomová absorpční spektrometrie	126
3.2.5.6	Mössbauerova spektroskopie	127
3.2.6	Magnetická rezonanční spektroskopie	128

3.2.7 Absorpční a disperzní jevy, vyplývající z elektronových přechodů	131
3.2.7.1 Vztah mezi absorpcí a disperzí	131
3.2.7.2 Refrakce v izotropním prostředí	134
3.2.7.3 Chování opticky anizotropního prostředí při interakci se zařízením	136
3.2.7.4 Absorpční a disperzní vlastnosti opticky aktivních látek	137
3.2.8 Hmotnostní spektrometrie	141
3.2.9 Difrakční metody	141
3.2.10 Vlastnosti látek jako funkce velikosti a stavby jejich molekul	145
3.3 Makroskopické vlastnosti látek. Chemická statistika	149
3.3.1 Makroskopické vlastnosti jednotlivých skupenství	149
3.3.1.1 Vlastnosti plynů	149
3.3.1.2 Vlastnosti kapalin	152
3.3.1.3 Tuhé látky	157
3.3.2 Teoretické zpracování makroskopických vlastností	159
3.3.2.1 Statistický charakter makroskopických vlastností a možnosti jejich teoretického vyjádření	159
3.3.2.2 Ideální plyn jako model	161
3.3.2.3 Kinetická teorie	162
3.3.2.4 Charakter a základní pojmy chemické statistiky	164
3.3.2.5 Maxwellův distribuční zákon	166
3.3.2.6 Molekulová partiční funkce	168
3.3.2.7 Energie molekul a jejich souboru	172
3.3.2.8 Sestavování molekulových partičních funkcí a jejich význam	176
3.3.2.9 Transportní děje	177
4. CHEMICKÁ ENERGETIKA	181
4.1 Klasická termodynamika	181
4.1.1 Obecné rysy a základní pojmy	181
4.1.1.1 Náplň, cíl, význam	181
4.1.1.2 Obecné rysy klasické termodynamiky	181
4.1.1.3 Základní pojmy, symbolika	183
4.1.2 Stavová rovnice plynů	187
4.1.3 První věta termodynamická	190
4.1.3.1 Slovní vyjádření	190
4.1.3.2 Matematická formulace první věty. Vnitřní energie soustav	191
4.1.3.3 Entalpie a tepelná kapacita	193
4.1.4 Termochemie	195
4.1.5 Druhá věta termodynamická	199
4.1.5.1 Vratné a nevratné děje. Definice druhé věty	199
4.1.5.2 Míra degradace soustavy — entropie	201
4.1.5.3 Změna entropie jako měřítko rovnovážnosti a samovolnosti dějů	202
4.1.5.4 Určení absolutní hodnoty entropie pomocí třetí věty	203

4.1.6	Kritéria samovolnosti a rovnováhy	204
4.1.6.1	Helmholtzova a Gibbsova volná energie	204
4.1.6.2	Volná energie jako míra chemické afinity	208
4.1.6.3	Kritéria samovolnosti a rovnováhy pro děje probíhající za různých podmínek	211
4.1.6.4	Závislost Gibbsovy energie na stavových proměnných P , V , T	213
4.1.6.5	Určování energetických funkcí A a G	214
4.1.7	Vliv koncentrace složek systému	216
4.1.7.1	Parciální molární veličiny. Chemický potenciál	216
4.1.7.2	Závislost chemického potenciálu na koncentraci. Aktivita	218
4.1.7.3	Formulace podmínky rovnováhy ve vícetělesovém systému pomocí chemického potenciálu	221
4.1.8	Přehled nejdůležitějších vztahů klasické termodynamiky	223
4.1.9	Klasická termodynamika a biologické systémy	224
4.1.9.1	Život a energie	224
4.1.9.2	Charakter biologických systémů z termodynamického hlediska	226
4.1.9.3	Biologické systémy a první a druhá věta termodynamická	227
4.1.9.4	Význam Gibbsovy energie v biochemii	228
4.1.9.5	Biomolekuly o vysoké chemické energii	231
4.2	Statistická termodynamika	233
4.2.1	Spojení klasické termodynamiky a chemické statistiky	233
4.2.2	Charakter statistické termodynamiky	234
4.2.3	Statistická interpretace entropie	235
4.2.4	Entropie a informace	238
4.2.5	Entropie a uspořádanost biologických systémů	240
4.3	Nerovnovážná termodynamika	242
4.3.1	Význam a obecný charakter	242
4.3.2	Fenomenologické tokové rovnice	243
4.3.3	Bilanční rovnice	244
4.3.4	Entropie v nerovnovážné termodynamice	245
4.3.5	Stacionární nerovnovážný stav	246
4.3.6	Nelineární (zobecněná) nerovnovážná termodynamika	248
4.3.7	Užitečnost nerovnovážné termodynamiky biologických systémů	249
5.	REAKČNÍ A FÁZOVÉ ROVNOVÁHY	251
5.1	Fyzikální rovnováhy	252
5.1.1	Termodynamika fázových rovnováh	252
5.1.2	Rozpuštěnost plynů v kapalinách	254
5.1.3	Rozdělovací rovnováha	256
5.2	Rovnováhy v chemicky reagujících systémech	260
5.2.1	Zákon o chemické rovnováze	260
5.2.2	Termodynamika soustav s chemicky reagujícími složkami	261
5.2.2.1	Popis chemického systému a jeho stechiometrie	261
5.2.2.2	Vyjádření změny ΔG	262

5.2.2.3	Vztah mezi Gibbsovou energií a rovnovážnou konstantou	264
5.2.2.4	Chemická afinita	266
5.2.2.5	Význam rovnovážné konstanty. Stupeň přeměny	268
5.2.2.6	Rovnovážná konstanta u heterogenních systémů	272
5.2.2.7	Vliv reakčních podmínek na polohu rovnováhy	273
5.2.3	Řešení složitých rovnováh pomocí teorie následných rovnováh	276
5.2.4	Zákon o chemické rovnováze ve výkladu biologické aktivity látek	279
5.3	Zpracování rovnovážných systémů pomocí chemické statistiky	282
6.	REAKČNÍ KINETIKA	285
6.1	Základy reakční kinetiky	285
6.1.1	Obecné rysy a základní pojmy	285
6.1.1.1	Poslání a charakter reakční kinetiky	285
6.1.1.2	Reakční rychlost a kinetické rovnice	286
6.1.1.3	Třídění chemických reakcí	288
6.1.2	Kinetické rovnice homogenních elementárních reakcí	290
6.1.2.1	Jednoduché jednosměrné reakce	290
6.1.2.2	Zvratné reakce	296
6.1.2.3	Následné reakce	297
6.1.2.4	Bočné reakce	300
6.1.3	Heterogenní reakce	301
6.1.4	Reakční kinetika v otevřeném systému	301
6.1.5	Vliv teploty na rychlost reakce	303
6.1.6	Teorie chemické kinetiky	304
6.1.6.1	Chemická reaktivita z pohledu reakční kinetiky	304
6.1.6.2	Srážková teorie	305
6.1.6.3	Teorie aktivovaného komplexu	306
6.1.6.4	Současné teorie reakční kinetiky	309
6.1.6.5	Předvídaní reaktivity pomocí empirických a poloempirických pravidel a rovnic	310
6.1.7	Mechanismus chemických reakcí	314
6.1.8	Fotochemické děje	316
6.1.9	Katalýza	317
6.2	Kinetika enzymových reakcí	319
6.2.1	Enzymy	319
6.2.2	Kinetické rovnice enzymových reakcí	320
6.2.3	Faktory ovlivňující rychlost enzymových reakcí	334
6.2.4	Kinetika a mechanismus inhibice	336
6.2.5	Allosterické enzymy	341
6.2.6	Měření a vyjadřování enzymových aktivit	345
6.3	Základy farmakokinetiky	346
6.3.1	Základní pojmy	346
6.3.2	Kinetika při aplikaci látky intravenózní injekcí	350

6.3.3 Kinetika při uplatnění se resorpce	352
6.3.4 Kinetika při opakovaném podávání	354
6.4 Kinetika růstu a množení bakterií	358
6.4.1 Model kinetiky růstu a množení bakteriální kultury	358
6.4.2 Růstová křivka bakteriální populace	360
6.4.3 Kinetika kontinuální kultivace	364
7. ROZTOKY	368
7.1 Obecné vlastnosti roztoků	368
7.1.1 Vznik roztoků a jejich typy	368
7.1.1.1 Disperzní soustavy a jejich rozdělení	368
7.1.1.2 Rozpouštění a rozpustnost	369
7.1.1.3 Voda jako rozpouštědlo	371
7.1.2 Vlastnosti roztoků dané tepelným pohybem jejich částic	374
7.1.3 Termodynamika roztoků	374
7.1.3.1 Raoultův zákon	374
7.1.3.2 Ideální roztok	376
7.1.3.3 Zvýšení bodu varu a snížení bodu tuhnutí	377
7.1.3.4 Reálné roztoky. Odchylky od ideality	379
7.1.4 Difúze v roztocích	380
7.1.5 Osmóza a osmotický tlak	381
7.1.5.1 Empirická rovnice pro osmotický tlak	381
7.1.5.2 Termodynamická rovnice pro osmotický tlak	383
7.1.5.3 Výpočet osmotického tlaku	385
7.1.5.4 Biologický význam osmózy	386
7.1.5.5 Výpočet izotonické a osmoticky účinné koncentrace	387
7.1.6 Koligativní vlastnosti a molární hmotnost rozpuštěné látky	390
7.1.7 Srovnání rovnic pro koligativní vlastnosti roztoků	392
7.2 Roztoky obsahující ionty	393
7.2.1 Vznik iontových roztoků	393
7.2.2 Teorie roztoků elektrolytů	396
7.2.2.1 Odchylky od ideality a stupeň disociace	396
7.2.2.2 Iontové aktivní koeficienty. Iontová síla	397
7.2.2.3 Výpočet aktivitních koeficientů pomocí teorie meziiontových sil	401
7.2.2.4 Rovnováhy v roztocích slabých elektrolytů	403
7.2.3 Transport náboje v roztocích elektrolytů	406
7.2.3.1 Elektrolyza a Faradayovy zákony	406
7.2.3.2 Vodivost roztoků elektrolytů	407
7.2.3.3 Vliv meziiontových sil na pohyb iontů	411
7.2.4 Acidobazické rovnováhy	412
7.2.4.1 Teorie acidobazických dějů	412
7.2.4.2 Iontový produkt vody. Stupnice pH	414

7.2.4.3	Rovnováhy v roztocích slabých kyselin a zásad	416
7.2.4.4	Roztoky soli	421
7.2.4.5	Pufry	423
7.2.4.6	Výpočty pH	427
7.2.4.7	Amfoterní elektrolyty	429
7.2.4.8	Acidobazické rovnováhy v biologických systémech	434
7.2.5	Oxidačně redukční systémy	440
7.2.5.1	Oxidačně redukční děje a jejich mechanismus.	440
7.2.5.2	Uspořádání redox reakcí do formy galvanického článku	441
7.2.5.3	Termodynamika článku: Nernstova rovnice	444
7.2.5.4	Elektroodové potenciály	446
7.2.5.5	Typy elektrod a galvanických článků	450
7.2.5.6	Kvantitativní míra oxidace a redukce	452
7.2.5.7	Fyzikální chemie biologických redox systémů	455
7.2.5.8	Potenciometrické měření	461
7.2.5.9	Elektroodové děje a jejich analytické využití.	463
7.2.6	Komplexní a nerozpustné elektrolyty	463
7.3	Roztoky makromolekulárních látek, koloidy	466
7.3.1	Koloidní soustavy	466
7.3.1.1	Klasifikace a obecná charakteristika	466
7.3.1.2	Lyofobní koloidy a hrubé disperzní soustavy	469
7.3.1.3	Rozpustnost lyofilních koloidů a stabilita jejich roztoků	470
7.3.2	Rovnováhy v roztocích biopolymerů	473
7.3.3	Optické vlastnosti koloidů	475
7.3.4	Kinetické vlastnosti roztoků biopolymerů	476
7.3.4.1	Osmotický tlak	477
7.3.4.2	Pohyb částic v kapalném prostředí	478
7.3.4.3	Difúze	480
7.3.4.4	Dialýza a ultrafiltrace	481
7.3.4.5	Sedimentace	481
7.3.4.6	Viskozita	485
7.3.4.7	Rotační pohyb.	485
7.3.5	Metody na určování hmotnosti, tvaru a velikosti makromolekul v roztocích	486
7.3.5.1	Metody rovnovážné	488
7.3.5.2	Metody hydrodynamické	490
7.3.5.3	Určování tvaru a rozměrů částic	491
7.3.5.4	Průměry molárních hmotností	491
7.3.6	Acidobazické rovnováhy polyelektrolytů	492
7.3.7	Elektrokinetické vlastnosti koloidních roztoků	496
7.3.7.1	Elektrická dvojvrstva a elektrokinetické děje	496
7.3.7.2	Elektroforéza	498
7.3.8	Teoretické zpracování roztoků biopolymerů	501

8. FYZIKÁLNÍ CHEMIE NADMOLEKULÁRNÍCH STRUKTUR (J. KORYTA)	503
8.1 Fyzikální chemie jevů na fázovém rozhraní	504
8.1.1 Povrchové napětí	504
8.1.2 Adsorpce	505
8.1.2.1 Adsorpční izotermy	505
8.1.2.2 Adsorpční síly na povrchu kapalně fáze	508
8.1.2.3 Surfactanty (tenzidy)	509
8.1.2.4 Adsorpce na rozhraní dvou kapalných fází	510
8.1.2.5 Adsorpce na fázovém rozhraní pevná fáze/plyn	511
8.1.2.6 Povrchové filmy	511
8.1.3 Elektrokapilarita	513
8.2 Membranologie	514
8.2.1 Základní vlastnosti membrán	514
8.2.2 Potenciál kapalinového rozhraní	515
8.2.3 Semipermeabilní membrána	519
8.2.4 Donnanova rovnováha	520
8.2.5 Iontově selektivní elektrody	523
8.2.5.1 Skleněná elektroda	523
8.2.5.2 Enzymové elektrody	525
8.2.5.3 Ostatní iontově selektivní elektrody	525
8.2.6 Biologické membrány a jejich modely	526
8.2.6.1 Struktura biologických membrán	526
8.2.6.2 Modely biologických membrán — dvojné lipidové membrány (DLM) a lipozomy	527
8.2.6.3 Membránový transport	528
8.2.6.4 Pasivní a aktivní transport	532
8.2.6.5 Membránová teorie nervové činnosti	535
8.2.6.6 Další biologické membránové děje	537
DODATEK	539
LITERATURA	544
REJSTŘÍK	548