

Obsah

Seznam nejběžnějších symbolů	XXI	2.3.2 Změny vnitřní energie	70
Jak postupovat	XV	2.3.3 Jouleův–Thomsonův jev	72
Průvodce strukturou knihy	XVII	Seznam nejdůležitějších vztahů	77
F. Základy	1	Doplňující informace	77
F.1 Atomy	1	Otázky	78
F.2 Molekuly	2	Cvičení	78
F.3 Makroskopická forma hmoty (bulk matter)	4	Problémově orientované úlohy	81
F.4 Energie	6	Matematický základ 2: Funkce více proměnných	84
F.5 Vztahy mezi molekulovými a makroskopickými vlastnostmi	7	3. Druhý zákon termodynamiky	87
F.5.1 Boltzmannovo rozdělení	7	3.1 Směr samovolného děje	87
F.5.2 Rovnoměrné rozdělení (ekvipartiční princip)	8	3.1.1 Disipace energie	88
F.6 Elektromagnetické pole	9	3.1.2 Entropie	89
F.7 Jednotky	10	I-3.1 Využití v inženýrství. Chlazení	95
Cvičení	13	3.1.3 Změny entropie doprovázející vybrané děje	96
ČÁST 1 ROVNOVÁHA	15	3.1.4 Třetí zákon termodynamiky	101
1. Vlastnosti plynů	170	I-3.2 Využití v chemii materiálů. Defekty v krystalech	103
1.1 Ideální plyn	17	3.2 Vlastnosti systému	104
1.1.1 Stavové chování plynů	17	3.2.1 Helmholtzova a Gibbsova energie	104
1.1.2 Zákony plynů	21	3.2.2 Standardní molární Gibbsovy energie	109
I-1.1 Využití ve výzkumu životního prostředí. Kysakinitosti plynů a počasí	25	3.3 Spojení prvního a druhého zákona	111
1.2 Reálné plyny	26	3.3.1 Fundamentální rovnice	111
1.2.1 Interakce mezi molekulami	26	3.3.2 Vlastnosti vnitřní energie	112
1.2.2 Van der Waalsova stavová rovnice	30	3.3.3 Vlastnosti Gibbsovy energie	114
Seznam nejdůležitějších vztahů	35	Seznam nejdůležitějších vztahů	118
Otázky	35	Doplňující informace	118
Cvičení	35	Otázky	120
Problémově orientované úlohy	37	Cvičení	120
Matematický základ 1: Derivování a integrování	39	Problémově orientované úlohy	122
2. První zákon termodynamiky	41	4. Fázové přechody čistých látek	125
2.1 Základní pojmy	41	4.1 Fázové diagramy	125
2.1.1 Práce, teplo a energie	41	4.1.1 Fázová stabilita	125
2.1.2 Vnitřní energie	43	4.1.2 Koexistenční křivky	127
2.1.3 Objemová práce	45	4.1.3 Tři typické fázové diagramy	130
2.1.4 Tepelné efekty	49	I-4.1 Využití v technologii. Nadkritické tekutiny	132
2.1.5 Entalpie	51	4.2 Termodynamické aspekty fázových přechodů	133
I-2.1 Využití v biochemii a výzkumu materiálů. Diferenční skenovací kalorimetrie	56	4.2.1 Závislost stability na podmínkách	133
2.1.6 Adiabatické děje	57	4.2.2 Poloha koexistenčních křivek	136
2.2 Termochemie	59	4.2.3 Ehrenfestova klasifikace fázových přechodů	138
2.2.1 Standardní entalpie	59	Seznam nejdůležitějších vztahů	141
I-2.2 Využití v biologii. Potraviny a zdroje energie	65	Otázky	141
2.2.2 Standardní slučovací entalpie	65	Cvičení	142
2.2.3 Teplotní závislost reakční entalpie	67	Problémově orientované úlohy	143
2.3 Stavové funkce a totální diferenciál	68	5. Jednoduché směsi	145
2.3.1 Totální a neúplný diferenciál	68	5.1 Termodynamický popis směsi	145
		5.1.1 Parciální molární veličiny	145
		5.1.2 Termodynamika směšování	149
		5.1.3 Chemické potenciály kapalin	152
		5.2 Vlastnosti roztoků	155
		5.2.1 Kapalné směsi	155
		5.2.2 Koligativní vlastnosti	157



I-5.1	Využití v biologii.		Otázky	260	
	Osmóza ve fyziologii a biochemii	162	Cvičení	261	
5.3	Fázové diagramy dvousložkových systémů	163	Problémově orientované úlohy	262	
5.3.1	Diagramy s tlakem par	163	Matematický základ 3: Komplexní čísla	264	
5.3.2	Diagramy teplota–složení	166			
5.3.3	Fázové diagramy rovnováhy kapalina–kapalina	168	8. Kvantová teorie: Techniky a aplikace	266	
5.3.4	Fázové diagramy rovnováhy kapalina–pevná látka	172			
I-5.2	Využití v materiálových vědách.		8.1	Translační pohyb	266
	Kapalné krystaly	174	8.1.1	Částice v potenciálové jámě	267
5.4	Aktivita	176	8.1.2	Pohyb ve dvou a více rozměrech	270
5.4.1	Aktivita rozpouštědla	176	I-8.1	Využití v nanovědě. Kvantové tečky	273
5.4.2	Aktivita rozpuštěné látky	177	8.1.3	Tunelování	274
5.4.3	Aktivita v regulárním roztoku	179	I-8.2	Využití v nanovědě.	
5.4.4	Aktivita iontů v roztoku	180		Mikroskopie skenující sondou	276
	Seznam nejdůležitějších vztahů	183	8.2	Vibrační pohyb	278
	Doplňující informace	184	8.2.1	Energetické hladiny	278
	Otázky	185	8.2.2	Vlnové funkce	279
	Cvičení	186	8.3	Rotační pohyb	282
	Problémově orientované úlohy	189	8.3.1	Rotace ve dvou rozměrech: částice na kružnici	282
			8.3.2	Rotace ve třech rozměrech: částice na povrchu koule	286
			8.3.3	Spin	291
				Seznam nejdůležitějších vztahů	293
				Otázky	293
				Cvičení	293
				Problémově orientované úlohy	295
				Matematický základ 4: Diferenciální rovnice	298
6. Chemická rovnováha	194		9. Struktura a spektra atomů	300	
6.1	Samovolné chemické reakce	194			
6.1.1	Minimum Gibbsovy energie	194	9.1	Struktura a spektra atomů vodíkového typu	300
I-6.1	Využití v biochemii. Přeměny energie v biologických buňkách	196	9.1.1	Struktura atomů vodíkového typu	301
6.1.2	Popis rovnováhy	197	9.1.2	Atomové orbitály a jejich energie	305
6.2	Odezva rovnováhy na změny podmínek	205	9.1.3	Spektrální přechody a výběrová pravidla	313
6.2.1	Jak reagují rovnováhy na změny tlaku	205	9.2	Struktura víceelektronových atomů	315
6.2.2	Odezva rovnováh na změny teploty	206	9.2.1	Orbitální aproximace	315
I-6.2	Využití v technologii. Supramolekulární chemie	209	9.2.2	Selfkonzistentní orbitály	323
6.3	Rovnovážná elektrochemie	210	9.3	Spektra složitých atomů	324
6.3.1	Poloreakce a elektrody	211	9.3.1	Šířky linií	324
6.3.2	Druhy článků	212	9.3.2	Kvantové defekty a ionizační limity	326
6.3.3	Potenciál článku	213	9.3.3	Singletové a tripletové stavy	327
6.3.4	Standardní elektrodové potenciály	216	9.3.4	Spin-orbitální interakce	328
6.3.5	Využití standardních potenciálů	218	9.3.5	Označení termů a výběrová pravidla	330
I-6.3	Využití v technologii.		I-9.1	Dopad na astrofyziku. Spektroskopie hvězd	334
	Iontově selektivní elektrody	221		Seznam nejdůležitějších vztahů	335
	Seznam nejdůležitějších vztahů	223		Doplňující informace	336
	Otázky	223		Otázky	337
	Cvičení	223		Cvičení	337
	Problémově orientované úlohy	225		Problémově orientované úlohy	338
				Matematický základ 5: Vektory	341
ČÁST 2 STRUKTURA	229		10. Struktura molekul	343	
7. Kvantová teorie: Úvod a principy	231				
7.1	Zdroje kvantové mechaniky	231	10.1	Bornova–Oppenheimerova aproximace	343
7.1.1	Kvantování energie	232	10.2	Teorie valenční vazby	344
7.1.2	Vlnově-částicová dualita	236	10.2.1	Homonukleární biatomické molekuly	344
I-7.1	Využití v biologii. Elektronová mikroskopie	240	10.2.2	Polyatomické molekuly	346
7.2	Dynamika mikroskopických systémů	240	10.3	Teorie molekulových orbitalů	350
7.2.1	Schrödingerova rovnice	241	10.3.1	Molekulový ion vodíku (ion molekuly vodíku)	350
7.2.2	Bornova interpretace vlnové funkce	242	10.3.2	Homonukleární biatomické molekuly	354
7.3	Principy kvantové mechaniky	246	10.3.3	Heteronukleární biatomické molekuly	360
7.3.1	Informace ve vlnové funkci	246			
7.3.2	Princip neurčitosti	255			
7.3.3	Postuláty kvantové mechaniky	257			
	Seznam nejdůležitějších vztahů	258			
	Doplňující informace	258			

I-10.1 Využití v biochemii. Biochemická reaktivita	366	Cvičení	456
O₂, N₂ a NO	366	Problémově orientované úlohy	458
10.4 Molekulové orbitály pro polyatomické systémy	367		
10.4.1 Hückelova aproximace	367	13. Molekulová spektroskopie 2:	
10.4.2 Výpočetní chemie	373	Elektronové přechody	461
10.4.3 Predikce molekulových vlastností	377		
Seznam nejdůležitějších vztahů	379	13.1 Charakteristika elektronových přechodů	461
Doplňující informace	379	13.1.1 Měření zářivých toků	462
Otázky	380	13.1.2 Elektronová spektra dvouatomových molekul	463
Cvičení	380	13.1.3 Elektronová spektra víceatomových molekul	469
Problémově orientované úlohy	381	I-13.1 Využití v biochemii: Vidění	473
Matematický základ 6: Matice	384	13.2 Co se stane s excitovanými stavy elektronů	474
		13.2.1 Fluorescence a fosforescence	474
11. Symetrie molekul	387	I-13.2 Využití v biochemii: Fluorescenční mikroskopie	477
		13.2.2 Disociace a predisociace	478
11.1 Prvky symetrie objektů	387	13.2.3 Činnost laseru	479
11.1.1 Operace symetrie a prvky symetrie	387	Seznam nejdůležitějších vztahů	483
11.1.2 Klasifikace molekul podle symetrie	390	Doplňující informace	483
11.1.3 Některé přímé důsledky symetrie	395	Otázky	485
11.2 Aplikace symetrie v teorii molekulových orbitalů a ve spektroskopii	397	Cvičení	485
11.2.1 Tabulky charakterů a označení podle symetrie	397	Problémově orientované úlohy	487
11.2.2 Nulové integrály a překryv orbitalů	403		
11.2.3 Nulové integrály a výběrová pravidla	409	14. Molekulová spektroskopie 3:	
Seznam nejdůležitějších vztahů	411	Magnetická rezonance	490
Otázky	411		
Cvičení	412	14.1 Působení magnetického pole na elektrony a jádra	490
Problémově orientované úlohy	413	14.1.1 Energie elektronů v magnetickém poli	490
		14.1.2 Energie jader v magnetickém poli	492
12 Molekulová spektroskopie 1:		14.1.3 Spektroskopie magnetické rezonance	493
Rotační a vibrační spektra	415	14.2 Nukleární magnetická rezonance	494
		14.2.1 Spektrometr NMR	494
12.1 Obecné charakteristiky molekulové spektroskopie	415	14.2.2 Chemický posun	496
12.1.1 Experimentální techniky	416	14.2.3 Jemná struktura signálů	500
12.1.2 Výběrová pravidla a momenty přechodů	417	14.2.4 Konformační přeměny a výměnné procesy	507
I-12.1 Využití v astrofyzice. Rotační a vibrační spektroskopie mezihvězdných specií	417	14.3 Pulsní techniky NMR	508
12.2 Čisté rotační spektra	419	14.3.1 Vektor magnetizace	509
12.2.1 Momenty setrvačnosti	419	14.3.2 Spinová relaxace	511
12.2.2 Hladiny rotační energie	422	I-14.1 Využití v lékařství.	
12.2.3 Rotační přechody	426	Zobrazování magnetickou rezonancí (MRI)	514
12.2.4 Rotační Ramanova spektra	428	14.3.3 Spinový dekaplink	515
12.2.5 Typ statistiky jader a rotační stavy	430	14.3.4 Nukleární Overhauserův efekt	516
12.3 Vibrace biatomických molekul	432	14.3.5 Dvourozměrná NMR	518
12.3.1 Molekulové vibrace	432	14.3.6 NMR v pevném stavu	519
12.3.2 Výběrová pravidla	433	14.4 Elektronová paramagnetická rezonance	520
12.3.3 Anharmonicitu	435	14.4.1 Spektrometr EPR	520
12.3.4 Vibrace-rotační spektra	437	14.4.2 g-Faktor	521
12.3.5 Vibrace Ramanova spektra biatomických molekul	439	14.4.3 Hyperjemná struktura	522
12.4 Vibrace polyatomických molekul	440	I-14.2 Využití v biochemii a nanovědě. Spinové sondy	525
12.4.1 Normální módy	440	Seznam nejdůležitějších vztahů	526
12.4.2 Infračervená absorpční spektra polyatomických molekul	442	Doplňující informace	527
I-12.2 Využití ve vědě o životním prostředí.		Otázky	527
Klimatické změny	443	Cvičení	527
12.4.3 Vibrace Ramanova spektra polyatomických molekul	445	Problémově orientované úlohy	529
12.4.4 Otázky symetrie molekulových vibrací	448		
Seznam nejdůležitějších vztahů	451	15. Statistická termodynamika 1: Principy	531
Doplňující informace	451		
Otázky	456	15.1 Rozdělení molekulových stavů	531
		15.1.1 Konfigurace a váhy	532
		15.1.2 Molekulová partiční funkce	534
		15.2 Vnitřní energie a entropie	540
		15.2.1 Vnitřní energie	540
		15.2.2 Statistická entropie	542

20.3.1	Termodynamický přístup	724	22.3	Dynamika srážek molekul	805
20.3.2	Diffuzní rovnice	728	22.3.1	Reaktivní srážky	805
20.3.3	Pravděpodobnosti efektivní difuzní dráhy	730	22.3.2	Plochy potenciální energie	806
20.3.4	Statistický přístup	731	22.3.3	Některé výsledky experimentů a výpočtů	808
	Seznam nejdůležitějších vztahů	733	22.4	Dynamika přenosu elektronů	811
	Doplňující informace	733	22.4.1	Přenos elektronů v homogenních systémech	811
	Otázky	735	22.4.2	Přenos elektronů na elektrodách	816
	Cvičení	735	I-22.1	Využití v technologii. Palivové články	820
	Problémově orientované úlohy	737		Seznam nejdůležitějších vztahů	822
21. Rychlost chemických reakcí		740		Doplňující informace	822
21.1	Empirická chemická kinetika	740		Otázky	825
21.1.1	Experimentální postupy	741		Cvičení	825
21.1.2	Reakční rychlosti	743		Teoreticky orientované úlohy	827
21.1.3	Integrovaná (integrální) rychlostní rovnice	748	23. Katalýza		830
21.1.4	Reakce v okolí rovnováhy	753	23.1	Homogenní katalýza	830
21.1.5	Závislost reakčních rychlostí na teplotě	756	23.1.1	Charakteristické rysy homogenní katalýzy	831
21.2	Analýza rychlostních rovnic	759	23.1.2	Enzymy	832
21.2.1	Elementární reakce	759	23.2	Heterogenní katalýza	838
21.2.2	Následné elementární reakce	760	23.2.1	Růst a struktura pevných povrchů	838
21.3	Příklady reakčních mechanismů	765	23.2.2	Rozsah adsorpce	842
21.3.1	Monomolekulární reakce	766	23.2.3	Rychlost povrchových dějů	848
21.3.2	Kinetika polymerace	768	23.2.4	Mechanismus heterogenní katalýzy	851
21.3.3	Fotochemie	771	23.2.5	Katalytická aktivita povrchů	853
I-21.1	Využití v biochemii.		I-23.1	Využití v technologii:	
	Využití světla při fotosyntéze rostlin	778		Katalýza v chemickém průmyslu	854
	Seznam nejdůležitějších vztahů	781		Seznam nejdůležitějších vztahů	856
	Otázky	781		Doplňující informace	856
	Cvičení	782		Otázky	857
	Problémově orientované úlohy	784		Cvičení	857
22. Reakční dynamika		787		Teoreticky orientované úlohy	859
22.1	Reaktivní srážky	787	DATA		863
22.1.1	Srážková teorie	787	ŘEŠENÍ CVIČENÍ (a)		901
22.1.2	Reakce řízené difuzí	794	ŘEŠENÍ PROBLÉMOVĚ ORIENTOVANÝCH ÚLOH S LICHÝMI ČÍSLY		906
22.1.3	Rovnice hmotnostní bilance	797	REJSTŘÍK		911
22.2	Teorie přechodového (tranzitního) stavu	798			
22.2.1	Eyringova rovnice	798			
22.2.2	Termodynamické aspekty	802			

Chemická kinetika
kapitoly 20 až 22

Rovnovážná termodynamika
kapitoly 1 až 6

Speciální témata
kapitoly 11, 17–19, 23 a Závěry