

# Obsah

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

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

<b>I-10.1 Využití v biochemii. Biochemická reaktivita</b>	366	Cvičení <b>Dynamika srážek molekulů v řešidlách</b>	454
O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> a NO	367	Problémově orientované úlohy	458
<b>10.4 Molekulové orbitaly pro polyatomické systémy</b>	367		
10.4.1 Hückelova approximace	367		
10.4.2 Výpočetní chemie	373	<b>13. Molekulová spektroskopie 2: Elektronové přechody</b>	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
Otázkы	380	13.1.2 Elektronová spektra dvouatomových molekul	463
Cvičení	380	13.1.3 Elektronová spektra víceatomových molekul	469
Problémově orientované úlohy	381	<b>I-13. Využití v biochemii: Vidění</b>	473
<b>Matematický základ 6: Matice</b>	384	13.2 Co se stane s excitovanými stavami elektronů	474
<b>11. Symetrie molekul</b>	387	13.2.1 Fluorescence a fosorescence	474
11.1 Prvky symetrie objektů	387	<b>I-13.2 Využití v biochemii: Fluorescenční mikroskopie</b>	477
11.1.1 Operace symetrie a prvky symetrie	387	13.2.2 Disociace a predisociace	478
11.1.2 Klasifikace molekul podle symetrie	390	13.2.3 Činnost laseru	479
11.1.3 Některé přímé důsledky symetrie	395	Seznam nejdůležitějších vztahů	483
11.2 Aplikace symetrie v teorii molekulových orbitalů a ve spektroskopii	397	Doplňující informace	483
11.2.1 Tabulkový charakter a označení podle symetrie	397	Otázkы	485
11.2.2 Nulové integrály a překryv orbitalů	403	Cvičení	485
11.2.3 Nulové integrály a výběrová pravidla	409	Problémově orientované úlohy	487
Seznam nejdůležitějších vztahů	411		
Otázkы	411		
Cvičení	412		
Problémově orientované úlohy	413		
<b>12 Molekulová spektroskopie 1: Rotační a vibrační spektra</b>	415		
12.1 Obecné charakteristiky molekulové spektroskopie	415	<b>14. Molekulová spektroskopie 3: Magnetická rezonance</b>	490
12.1.1 Experimentální techniky	416		
12.1.2 Výběrová pravidla a momenty přechodů	417	14.1 Působení magnetického pole na elektrony a jádra	490
<b>I-12.1 Využití v astrofyzice. Rotační a vibrační spektroskopie mezihvězdých specií</b>	417	14.1.1 Energie elektronů v magnetickém poli	490
12.2 Čisté rotační spektra	419	14.1.2 Energie jader v magnetickém poli	492
12.2.1 Momenty setrvačnosti	419	14.1.3 Spektroskopie magnetické rezonance	493
12.2.2 Hladiny rotační energie	422	14.2 Nukleární magnetická rezonance	494
12.2.3 Rotační přechody	426	14.2.1 Spektrometr NMR	494
12.2.4 Rotační Ramanova spektra	428	14.2.2 Chemický posun	496
12.2.5 Typ statistiky jader a rotační stavy	430	14.2.3 Jemná struktura signálů	500
12.3 Vibrace biatomických molekul	432	14.2.4 Konformační přeměny a výměnné procesy	507
12.3.1 Molekulové vibrace	432	14.3 Pulsní techniky NMR	508
12.3.2 Výběrová pravidla	433	14.3.1 Vektor magnetizace	509
12.3.3 Anharmonicitá	435	14.3.2 Spinov relaxace	511
12.3.4 Vibračně-rotační spektra	437	<b>I-14.1 Využití v lékařství.</b>	
12.3.5 Vibrační Ramanova spektra biatomických molekul	439	Zobrazování magnetickou rezonancí (MRI)	514
12.4 Vibrace polyatomických molekul	440	14.3.3 Spinový dekaplink	515
12.4.1 Normální módy	440	14.3.4 Dvoourzádný Overhauserův efekt	516
12.4.2 Infračervená absorpční spektra polyatomických molekul	442	14.3.5 Dvoourzenná NMR	518
<b>I-12.2 Využití ve vědě o životním prostředí.</b>		14.3.6 NMR v pevném stavu	519
Klimatické změny		14.4 Elektronová paramagnetická rezonance	520
12.4.3 Vibrační Ramanova spektra polyatomických molekul		14.4.1 Spektrometr EPR	520
12.4.4 Otázky symetrie molekulových vibrací		14.4.2 g-Faktor	521
Seznam nejdůležitějších vztahů	451	14.4.3 Hyperjemná struktura	522
Doplňující informace	451	<b>I-14.2 Využití v biochemii a nanovědě. Spinové sondy</b>	525
Otázkы	456	Seznam nejdůležitějších vztahů	526
		Doplňující informace	527
		Otázkы	527
		Cvičení	527
		Problémově orientované úlohy	529
<b>15. Statistická termodynamika 1: Principy</b>	531		
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		

<b>I-15.1 Využití v technologii.</b>	
Dosažení velmi nízkých teplot	543
15.3 Kanonická partiční funkce	544
15.3.1 Kanonický soubor	544
15.3.2 Termodynamická informace v partiční funkci	546
15.3.3 Nezávislé molekuly	547
Seznam nejdůležitějších vztahů	549
Doplňující informace	550
Otázky	552
Cvičení	552
Problémově orientované úlohy	553
<b>16. Statistická termodynamika 2: Aplikace</b>	556
16.1 Základní vztahy	556
16.1.1 Termodynamické funkce	556
16.1.2 Molekulová partiční funkce	558
16.2 Použití statistické termodynamiky	564
16.2.1 Sfídné energie	564
16.2.2 Tepelné kapacitý	566
16.2.3 Stavové rovnice	568
16.2.4 Molekulové interakce v kapalinách	570
16.2.5 Reziduální entropie	573
16.2.6 Rovnovážné konstanty	574
<b>I-16.1 Využití v biochemii. Přechod mezi šroubovici a klubkem v polypeptidech</b>	578
Seznam nejdůležitějších vztahů	580
Doplňující informace	581
Otázky	581
Cvičení	582
Problémově orientované úlohy	583
<b>17. Molekulové interakce</b>	585
<b>17.1 Elektrické vlastnosti molekul</b>	585
17.1.1 Elektrické dipolové momenty	585
17.1.2 Polarizovatelnost	588
17.1.3 Polarizace	589
17.1.4 Relativní perimittivita	591
<b>17.2 Interakce mezi molekulami</b>	593
17.2.1 Interakce mezi dipoly	593
<b>I-17.1 Využití v medicíně.</b>	
Molekulové rozpoznávání a návrh léčiv	601
17.2.2 Odpudívá a celková interakce	603
<b>I-17.2 Využití v materiálových vědách.</b>	
Skladování vodíku v klatrtech	604
<b>17.3 Plyny a kapaliny</b>	605
17.3.1 Interakce molekul v plynech	605
17.3.2 Rozhraní kapalina–pára	607
17.3.3 Povrchové filmy	610
17.3.4 Kondenzace	613
Seznam nejdůležitějších vztahů	615
Doplňující informace	615
Otázky	617
Cvičení	617
Problémově orientované úlohy	618
<b>18. Materiály 1:</b>	
<b>Makromolekuly a samouspořádané struktury</b>	620
18.1 Struktura a dynamika	620
18.1.1 Různé úrovně struktury	621
18.1.2 Nahodilá klubka	621
18.1.3 Mechanické vlastnosti polymerů	626
18.1.4 Elektrické vlastnosti polymerů	627
18.1.5 Struktura biologických makromolekul	628
18.2 Agregace a samouspořádávání	631
18.2.1 Koloidy	631
18.2.2 Micely a biologické membrány	635
18.3 Určování velikosti a tvaru	637
18.3.1 Střední molární hmotnosti	638
18.3.2 Experimentální techniky	640
Seznam nejdůležitějších vztahů	648
Doplňující informace	648
Otázky	649
Cvičení	650
Teoreticky orientované úlohy	651
<b>19. Materiály 2: Pevně látky</b>	654
<b>19.1 Krystalografie</b>	654
19.1.1 Mřížky a základní buňky	654
19.1.2 Symbolika mřížkových rovin	656
19.1.3 Stanovení struktur	658
19.1.4 Neutronová a elektronová difracce	666
19.1.5 Kovy	667
19.1.6 Iontové pevné látky	670
19.1.7 Molekulární pevné látky a kovalentní krystaly	673
<b>I-19.1 Využití v biochemii. Rentgenová krystalografie biologických makromolekul</b>	674
<b>19.2 Vlastnosti pevných látkek</b>	675
19.2.1 Mechanické vlastnosti	676
19.2.2 Elektrické vlastnosti	678
<b>I-19.2 Využití v nanovědě. Nanodrátky</b>	681
19.2.3 Optické vlastnosti	682
19.2.4 Magnetické vlastnosti	686
19.2.5 Supravodiče	689
Seznam nejdůležitějších vztahů	691
Doplňující informace	692
Otázky	693
Cvičení	693
Problémově orientované úlohy	695
<b>Matematický základ 7:</b>	
<b>Fourierovy řady a Fourierovy transformace</b>	699
<b>ČÁST 3 ZMĚNA</b>	703
<b>20. Pohyb molekul</b>	705
20.1 Pohyb molekul v plynech	705
20.1.1 Kinetická teorie plynů	706
<b>I-20.1 Využití v astrofyzice. Slunce jako koule ideálního plynu</b>	
20.1.2 Srážky se stěnami a povrchy	712
20.1.3 Rychlost efuze	713
20.1.4 Transportní vlastnosti ideálního plynu	714
20.2 Pohyb molekul v kapalinách	717
20.2.1 Experimentální výsledky	717
20.2.2 Vodivost v roztocích elektrolytů	718
20.2.3 Pohyblivost iontů	719
<b>I-20.1 Využití v astrofyzice. Slunce jako koule ideálního plynu</b>	
20.3 Difuze	724



20.3.1 Termodynamický přístup	724	<b>22.3 Dynamika srážek molekul</b>	805
20.3.2 Difuzní 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	<b>22.4 Dynamika přenosu elektronů</b>	811
Doplňující informace	733	22.4.1 Přenos elektronů v homogenních systémech	811
Otázkы	735	22.4.2 Přenos elektronů na elektrodách	816
Cvičení	735	<b>I-22.1 Využití v technologii. Palivové články</b>	820
Problémově orientované úlohy	737	Seznam nejdůležitějších vztahů	822
<b>21. Rychlosť chemických reakcií</b>	740	Doplňující informace	822
<b>21.1 Empirická chemická kinetika</b>	740	Otázkы	825
21.1.1 Experimentální postupy	741	Cvičení	825
21.1.2 Reakční rychlosť	743	Teoreticky orientované úlohy	827
21.1.3 Integrovaná (integrální) rychlostní rovnice	748	<b>23. Katalýza</b>	830
21.1.4 Reakce v okolí rovnováhy	753	<b>23.1 Homogenní katalýza</b>	830
21.1.5 Závislost reakčních rychlosťí na teplotě	756	23.1.1 Charakteristické rysy homogenní katalýzy	831
<b>21.2 Analýza rychlostních rovnic</b>	759	23.1.2 Enzymy	832
21.2.1 Elementární reakce	759	<b>23.2 Heterogenní katalýza</b>	838
21.2.2 Následné elementární reakce	760	23.2.1 Růst a struktura pevných povrchů	838
<b>21.3 Příklady reakčních mechanismů</b>	765	23.2.2 Rozsah adsorpce	842
21.3.1 Monomolekulární reakce	766	23.2.3 Rychlosť 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
<b>I-21.1 Využití v biochemii.</b>		<b>I-23.1 Využití v technologii:</b>	
Využití světla při fotosyntéze rostlin	778	Katalýza v chemickém průmyslu	854
Seznam nejdůležitějších vztahů	781	Seznam nejdůležitějších vztahů	856
Otázkы	781	Doplňující informace	856
Cvičení	782	Otázkы	857
Problémově orientované úlohy	784	Cvičení	857
<b>22. Reakční dynamika</b>	787	Teoreticky orientované úlohy	859
<b>22.1 Reaktivní srážky</b>	787	<b>DATA</b>	863
22.1.1 Srážková teorie	787	<b>ŘEŠENÍ CVIČENÍ (a)</b>	901
22.1.2 Reakce řízené difuzí	794	<b>ŘEŠENÍ PROBLÉMOVĚ ORIENTOVANÝCH ÚLOH S LICHÝMI ČÍSLY</b>	906
22.1.3 Rovnice hmotnostní bilance	797	<b>REJSTŘÍK</b>	911
<b>22.2 Teorie přechodového (tranzitního) stavu</b>	798		
22.2.1 Eyringova rovnice	798		
22.2.2 Termodynamické aspekty	802		

Rovnice a termodynamika

kapitoly 20–22

Speciální temata

kapitoly 11, 17–19, 23 a Základy