

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. Zákonitosti 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 směsí	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 Kapalně směsi	155
		5.2.2 Koligativní vlastnosti	157

I-5.1 Využití v biologii.			
Osmóza ve fyziologii a biochemii	162		
5.3 Fázové diagramy dvousložkových systémů	163		
5.3.1 Diagramy s tlakem par	163		
5.3.2 Diagramy teplota–složení	166		
5.3.3 Fázové diagramy rovnováhy kapalina–kapalina	168		
5.3.4 Fázové diagramy rovnováhy kapalina–pevná látka	172		
I-5.2 Využití v materiálových vědách.			
Kapalné krystaly	174		
5.4 Aktivity	176		
5.4.1 Aktivita rozpouštědla	176		
5.4.2 Aktivita rozpuštěné 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		
Otázky	185		
Cvičení	186		
Problémově orientované úlohy	189		
6. Chemická rovnováha	194		
6.1 Samovolné chemické reakce	194		
6.1.1 Minimum Gibbsovy energie	194		
I-6.1 Využití v biochemii. Přeměny energie v biologických buňkách	196		
6.1.2 Popis rovnováhy	197		
6.2 Odezva rovnováhy na změny podmínek	205		
6.2.1 Jak reagují rovnováhy na změny tlaku	205		
6.2.2 Odezva rovnováh na změny teploty	206		
I-6.2 Využití v technologii. Supramolekulární chemie	209		
6.3 Rovnovážná elektrochemie	210		
6.3.1 Poloreakce a elektrody	211		
6.3.2 Druhy článků	212		
6.3.3 Potenciál článku	213		
6.3.4 Standardní elektrodové potenciály	216		
6.3.5 Využití standardních potenciálů	218		
I-6.3 Využití v technologii. Iontově selektivní elektrody	221		
Seznam nejdůležitějších vztahů	223		
Otázky	223		
Cvičení	223		
Problémově orientované úlohy	225		
ČÁST 2 STRUKTURA	229		
7. Kvantová teorie: Úvod a principy	231		
7.1 Zdroje kvantové mechaniky	231		
7.1.1 Kvantování energie	232		
7.1.2 Vlnově–částicová dualita	236		
I-7.1 Využití v biologii. Elektronová mikroskopie	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		
Otázky	260		
Cvičení	261		
Problémově orientované úlohy	262		
Matematický základ 3: Komplexní čísla	264		
8. Kvantová teorie: Techniky a aplikace	266		
8.1 Translační pohyb	266		
8.1.1 Částice v potenciálové jámě	267		
8.1.2 Pohyb ve dvou a více rozměrech	270		
I-8.1 Využití v nanovědě. Kvantové tečky	273		
8.1.3 Tunelování	274		
I-8.2 Využití v nanovědě. 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		
Otázky	293		
Cvičení	293		
Problémově orientované úlohy	295		
Matematický základ 4: Diferenciální rovnice	298		
9. Struktura a spektra atomů	300		
9.1 Struktura a spektra atomů vodíkového typu	300		
9.1.1 Struktura atomů vodíkového typu	301		
9.1.2 Atomové orbitály a jejich energie	305		
9.1.3 Spektrální přechody a výběrová pravidla	313		
9.2 Struktura víceelektronových atomů	315		
9.2.1 Orbitální aproximace	315		
9.2.2 Selfkonzistentní orbitály	323		
9.3 Spektra složitých atomů	324		
9.3.1 Šířky linií	324		
9.3.2 Kvantové defekty a ionizační limity	326		
9.3.3 Singletové a tripletové stavy	327		
9.3.4 Spin-orbitální interakce	328		
9.3.5 Označení termů a výběrová pravidla	330		
I-9.1 Dopad na astrofyziku. Spektroskopie hvězd	334		
Seznam nejdůležitějších vztahů	335		
Doplňující informace	336		
Otázky	337		
Cvičení	337		
Problémově orientované úlohy	338		
Matematický základ 5: Vektory	341		
10. Struktura molekul	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		

I-10.1	Využití v biochemii. Biochemická reaktivita	366	Cvičení	456	
	O ₂ , N ₂ 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
11. Symetrie molekul		387	13.2.1	Fluorescence a fosforescence	474
			I-13.2 Využití v biochemii: Fluorescenční mikroskopie	477	
11.1	Prvky symetrie objektů	387	13.2.2	Disociace a predisociace	478
11.1.1	Operace symetrie a prvky symetrie	387	13.2.3	Činnost laseru	479
11.1.2	Klasifikace molekul podle symetrie	390			
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	Tabulky charakterů a označení podle symetrie	397	Otázky	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	14. Molekulová spektroskopie 3:		
	Otázky	411	Magnetická rezonance	490	
	Cvičení	412			
	Problémově orientované úlohy	413	14.1	Působení magnetického pole na elektrony a jádra	490
12 Molekulová spektroskopie 1:			14.1.1	Energie elektronů v magnetickém poli	490
Rotační a vibrační spektra		415	14.1.2	Energie jader v magnetickém poli	492
			14.1.3	Spektroskopie magnetické rezonance	493
12.1	Obecné charakteristiky molekulové spektroskopie	415	14.2	Nukleární magnetická rezonance	494
12.1.1	Experimentální techniky	416	14.2.1	Spektrometr NMR	494
12.1.2	Výběrová pravidla a momenty přechodů	417	14.2.2	Chemický posun	496
I-12.1 Využití v astrofyzice. Rotační a vibrační spektroskopie mezihvězdných specií		417	14.2.3	Jemná struktura signálů	500
12.2	Čistě rotační spektra	419	14.2.4	Konformační přeměny a výměnné procesy	507
12.2.1	Momenty setrvačnosti	419	14.3	Pulsní techniky NMR	508
12.2.2	Hladiny rotační energie	422	14.3.1	Vektor magnetizace	509
12.2.3	Rotační přechody	426	14.3.2	Spinová relaxace	511
12.2.4	Rotační Ramanova spektra	428	I-14.1 Využití v lékařství.		
12.2.5	Typ statistiky jader a rotační stavy	430	Zobrazování magnetickou rezonancí (MRI)	514	
12.3	Vibrace biatomických molekul	432	14.3.3	Spinový dekaplink	515
12.3.1	Molekulové vibrace	432	14.3.4	Nukleární Overhauserův efekt	516
12.3.2	Výběrová pravidla	433	14.3.5	Dvourozměrná NMR	518
12.3.3	Anharmonicitu	435	14.3.6	NMR v pevném stavu	519
12.3.4	Vibračně-rotační spektra	437	14.4	Elektronová paramagnetická rezonance	520
12.3.5	Vibrační Ramanova spektra biatomických molekul	439	14.4.1	Spektrometr EPR	520
12.4	Vibrace polyatomických molekul	440	14.4.2	g-Faktor	521
12.4.1	Normální módy	440	14.4.3	Hyperjemná struktura	522
12.4.2	Infračervená absorpční spektra polyatomických molekul	442	I-14.2 Využití v biochemii a nanovědě. Spinové sondy	525	
I-12.2 Využití ve vědě o životním prostředí. Klimatické změny		443			
12.4.3	Vibrační Ramanova spektra polyatomických molekul	445	Seznam nejdůležitějších vztahů	526	
12.4.4	Otázky symetrie molekulových vibrací	448	Doplňující informace	527	
	Seznam nejdůležitějších vztahů	451	Otázky	527	
	Doplňující informace	451	Cvičení	527	
	Otázky	456	Problémově orientované úlohy	529	
			15. Statistická termodynamika 1: Principy	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

I-15.1 Využití v technologii.		
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	
16. Statistická termodynamika 2: Aplikace	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 Střední energie	564	
16.2.2 Tepelné kapacity	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	
I-16.1 Využití v biochemii. Přechod mezi šroubovicí a klubkem v polypeptidech	578	
Seznam nejdůležitějších vztahů	580	
Doplňující informace	581	
Otázky	581	
Cvičení	582	
Problémově orientované úlohy	583	
17. Molekulové interakce	585	
17.1 Elektrické vlastnosti molekul	585	
17.1.1 Elektrické dipólové momenty	585	
17.1.2 Polarizovatelnost	588	
17.1.3 Polarizace	589	
17.1.4 Relativní permitivita	591	
17.2 Interakce mezi molekulami	593	
17.2.1 Interakce mezi dipóly	593	
I-17.1 Využití v medicíně. Molekulové rozpoznávání a návrh léčiv	601	
17.2.2 Odpudivá a celková interakce	603	
I-17.2 Využití v materiálových vědách. Skladování vodíku v klatrátech	604	
17.3 Plyny a kapaliny	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	
18. Materiály 1: Makromolekuly a samouspořádané struktury	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	
19. Materiály 2: Pevné látky	654	
19.1 Krystalografie	654	
19.1.1 Mřížky a základní buňky	654	
19.1.2 Symbolika mřížkových rovin	656	
19.1.3 Stanovení struktury	658	
19.1.4 Neutronová a elektronová difrakce	666	
19.1.5 Kovy	667	
19.1.6 Iontové pevné látky	670	
19.1.7 Molekulární pevné látky a kovalentní krystaly	673	
I-19.1 Využití v biochemii. Rentgenová krystalografie biologických makromolekul	674	
19.2 Vlastnosti pevných látek	675	
19.2.1 Mechanické vlastnosti	676	
19.2.2 Elektrické vlastnosti	678	
I-19.2 Využití v nanovědě. Nanodrátky	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	
Matematický základ 7: Fourierovy řady a Fourierovy transformace	699	
ČÁST 3 ZMĚNA	703	
20. Pohyb molekul	705	
20.1 Pohyb molekul v plynech	705	
20.1.1 Kinetická teorie plynů	706	
I-20.1 Využití v astrofyzice. Slunce jako koule ideálního plynu	712	
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	
I-20.1 Využití v astrofyzice. Slunce jako koule ideálního plynu	723	
20.3 Difuze	724	

20.3.1	Termodynamický přístup	724	22.3	Dynamika srážek molekul	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	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
				Otázky	825
21.1	Empirická chemická kinetika	740		Cvičení	825
21.1.1	Experimentální postupy	741		Teoreticky orientované úlohy	827
21.1.2	Reakční rychlosti	743	23.	Katalýza	830
21.1.3	Integrovaná (integrální) rychlostní rovnice	748			
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
				Teoreticky orientované úlohy	859
22.	Reakční dynamika	787			
			DATA		863
22.1	Reaktivní srážky	787	ŘEŠENÍ CVIČENÍ (a)		901
22.1.1	Srážková teorie	787	ŘEŠENÍ PROBLÉMOVĚ ORIENTOVANÝCH ÚLOH S LICHÝMI ČÍSLY		906
22.1.2	Reakce řízené difuzí	794			
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			