

# OBSAH

I.	ÚVOD . . . . .	11
I.1.	Hierarchie interakcí mezi elementárními částicemi, atomy a molekulami . . . . .	11
I.2.	Původ a fenomenologický popis slabých interakcí . . . . .	13
I.3.	Třídění van der Waalsových systémů . . . . .	22
I.4.	Přehled publikovaných monografií a referátů . . . . .	23
II.	METODY VÝPOČTU SLABÝCH INTERAKCÍ. . . . .	24
II.1.	Obecné poznámky o použitelnosti různých typů kvantověchemických a ostatních metod . . . . .	24
II.2.	Metody výpočtu přesných (nerelativistických) energií . . . . .	26
II.2.1.	Hylleraasova metoda . . . . .	26
II.2.2.	Metoda konfigurační interakce a mnohočásticová poruchová metoda . . . . .	27
II.2.3.	Metoda valenčních struktur. . . . .	50
II.2.4.	Poruchová metoda . . . . .	52
II.2.5.	Závěrečné poznámky . . . . .	78
II.3.	Metoda Hartreeho-Fockova (SCF). . . . .	79
II.4.	Empirické metody . . . . .	87
II.5.	Molekulový elektrostatický potenciál (MEP) a molekulové elektrostatické pole . . . . .	97
II.6.	Statisticko-termodynamické zpracování . . . . .	99
II.7.	Molekulová dynamika a metoda Monte Carlo . . . . .	105
	Dodatky . . . . .	108
III.	POKUSNÉ METODY POSKYTUJÍCÍ INFORMACE O SLABÝCH MEZIMOLEKULOVÝCH INTERAKCÍCH. . . . .	114
III.1.	Přehled metod . . . . .	114
III.2.	Elastický rozptyl molekulových paprsků . . . . .	115
III.3.	Spektroskopické metody . . . . .	118
III.4.	Makroskopické vlastnosti a transportní jevy . . . . .	123
IV.	APLIKACE V MOLEKULOVÉ FYZICE A CHEMII . . . . .	127
IV.1.	Fyzikální vlastnosti individuálních van der Waalsových molekul . . . . .	127
IV.1.1.	Stabilizační energie . . . . .	127
IV.1.2.	Geometrie: Hyperplochy potenciální energie a jejich stacionární body. . . . .	129
IV.1.3.	Základní a elektronově vzbuzené stavy; elektronická spektra . . . . .	131
IV.1.4.	Rotačně vibrační spektroskopie a silové konstanty . . . . .	136
IV.1.5.	Charakteristiky získané z radiofrekvenční a mikrovlnné spektroskopie . . . . .	144
IV.1.6.	Ionizační potenciály: Elektronové spektroskopie (PES, PIES, ESCA) . . . . .	147

IV.2.	Reaktivita van der Waalsových molekul . . . . .	149
IV.2.1.	Termodynamika tvorby . . . . .	149
IV.2.2.	Fyzikální adsorpce . . . . .	151
IV.2.3.	Solvatační energie . . . . .	156
IV.2.4.	Rychlost tvorby, přeměny a rozkladu vdW molekul . . . . .	166
IV.2.5.	Účast van der Waalsových molekul v chemických reakcích . . . . .	167
	Dodatky . . . . .	170
V.	APLIKACE V BIODISCIPLÍNÁCH . . . . .	172
V.1.	Nevazebné intramolekulové a intermolekulové interakce u velkých molekul. . . . .	172
V.2.	Významné procesy. . . . .	177
V.2.1.	Rozpuštění inertního plynu a rozdělování látek mezi nemísitelné kapaliny . . . . .	177
V.2.2.	Solvatační jevy včetně hydrofobních interakcí . . . . .	182
V.3.	Významné a společné rysy bioreakcí . . . . .	184
V.3.1.	Rozpoznávací mechanismy a diskriminativní (chirální) interakce . . . . .	188
V.3.2.	Enzymatická katalýza a cyklokatalýza . . . . .	193
V.3.3.	Vliv silných lokálních elektrických polí . . . . .	197
V.3.4.	Významná úloha entropie . . . . .	199
V.4.	Interakce mezi vybranými systémy . . . . .	201
V.4.1.	Úvodní poznámka. . . . .	201
V.4.2.	Interakce bílkovin s malými systémy a s bílkovinami . . . . .	205
V.4.3.	Interakce nukleových kyselin s malými a polymerními systémy. . . . .	210
V.4.4.	Enzym-substrát . . . . .	222
V.4.5.	Hormon-receptor . . . . .	224
V.4.6.	Neurotransmitter-receptor. . . . .	224
V.4.7.	Léčivo-receptor . . . . .	225
V.4.8.	Antigen-protilátka. . . . .	226
V.4.9.	Interakce, jichž se účastní membrány a supramolekulové systémy . . . . .	228
V.5.	Poznámky k mechanismu několika vybraných procesů . . . . .	229
V.5.1.	Metabolismus cizorodých látek . . . . .	229
V.5.2.	Anestéze . . . . .	230
V.5.3.	Chemická karcinogeneze . . . . .	233
V.5.4.	Model pro barevné vidění . . . . .	236
	Dodatky . . . . .	238
	LITERATURA. . . . .	239
	DODATEK . . . . .	268
	REJSTŘÍK . . . . .	286