

|      |  |     |
|------|--|-----|
| 0.1. | Úvodem ke skriptu Kvantová teorie molekul a molekulových systéme                     | 5   |
| 0.2. | Stručné shrnutí základních principů kvantové mechaniky                               | 8   |
| 1.   | Základní aproximace v kvantové teorii molekul a molekulových systéme                 | 15  |
| 1.1. | Úvodní poznámky  | 15  |
| 1.2. | Hamiltonián pro molekulu respektive pro soustavu molekul vytvářejících vázaný systém | 23  |
| 1.3. | Základní aproximace hamiltoniánu   | 27  |
| 1.4. | Jednoelektronové přiblížení - model nezávislých elektronů                            | 37  |
| 1.5. | Použití vlnové funkce systému - funkce matice hustoty                                | 45  |
| 1.6. | Maticová reprezentace operátorů  | 50  |
| 2.   | Kvantová teorie molekuly vodíku  | 54  |
| 2.1. | Hamiltonián a aproximace elektronové vlnové funkce molekuly vodíku                   | 54  |
| 2.2. | Heitlerova-Londonova metoda řešení molekuly vodíku                                   | 57  |
| 2.3. | Řešení molekuly vodíku metodou MOLCAO  | 69  |
| 2.4. | Vazba v molekule $H_2^+$   | 78  |
| 2.5. | Zobecnění HL metody - metoda valenčních struktur                                     | 83  |
| 3.   | Jednoduché metody molekulových orbitů na bázi MOLCAO                                 | 87  |
| 3.1. | Vazba jako překryv atomových orbitů. Základní klasifikace molekulových orbitů        | 89  |
| 3.2. | Homonukleární dvouatomové molekuly   | 98  |
| 3.3. | Korelační diagramy   | 105 |
| 3.4. | Heteronukleární dvouatomové molekuly   | 108 |
| 3.5. | Metody MO pro víceatomové molekuly   | 112 |
| 3.6. | Hybridizace v metodách molekulových orbitů   | 120 |
| 3.7. | Metoda založená na repulzi valenčních elektronových párů                             | 123 |
| 3.8. | Metoda FEMO  | 126 |

|  | str. |
|--|------|
| 4. <u>Hückelova verze metody MOLCAO</u> .....                    | 127  |
| 4.1. Schéma řešení molekuly metodou HMO .....                    | 127  |
| 4.2. Konkrétní aplikace metody HMO na butadien .....             | 132  |
| 4.3. Aplikace výsledků metody HMO .....                          | 136  |
| 4.4. Využití symetrie molekuly ke zjednodušení řešení HMO .....  | 139  |
| 4.5. Kontrola správnosti numerických výpočtů metody HMO .....    | 142  |
| 4.6. Zpřesnění metody HMO a modifikace HMO na heteroatomy .....  | 148  |
| 4.7. Zákonitosti metody HMO pro alternující uhlovodíky .....     | 150  |
| 4.8. Aplikace poruchové metody při modifikacích metody HMO ..... | 154  |
| 4.9. Vyhodnocení výsledků metody HMO .....                       | 162  |
| 4.10. Rozšířená Hückelova metoda - EHT .....                     | 171  |
| 5. <u>Metody zanedbání diferenciálního překryvu</u> .....        | 174  |
| 5.1. Hartreeho-Fockovo výpočtové schéma SCF .....                | 177  |
| 5.2. Aproximace nulového diferenciálního překryvu ...            | 181  |
| 5.3. Semiempirické $\pi$ -elektronové metody .....               | 184  |
| 5.4. Metody CNDO .....   | 187  |
| 5.5. Metody typu INDO .....                                      | 191  |
| 5.6. Metody typu NDDO .....                                      | 192  |
| 5.7. Vzájemné srovnání metod NDO .....                           | 194  |
| 5.8. Neempirické metody - NEMO .....                             | 196  |
| 6. <u>Ab initio výpočty molekulových orbitů</u> .....            | 198  |
| 6.1. Atomové jednotky .....                                      | 199  |
| 6.2. Obecné schéma výpočtu MOLCAO SCF u metod ab initio .....    | 203  |
| 6.3. Některé údaje z historie výpočtů ab initio .....            | 205  |
| 6.4. Volba báze při výpočtech ab initio .....                    | 207  |
| 6.5. Výpočty integrálů při výpočtech ab initio .....             | 216  |
| 6.6. Procedura SCF ve výpočtech ab initio .....                  | 218  |
| 6.7. Zahrnutí korelační energie ve výpočtech ab initio .....     | 220  |

|  | str. |
|--|------|
| 7. <u>Mezimolekulové interakce</u> .....                                     | 225  |
| 7.1. Elektrostatická interakce .....   | 233  |
| 7.2. Indukční interakce .....  | 234  |
| 7.3. Disperzní interakce .....   | 235  |
| 7.4. Rezonanční interakce .....  | 236  |
| 7.5. Donor-akceptorová interakce .....                                       | 237  |
| 7.6. Interakce vyšších řádů .....  | 238  |
| 7.7. Valenční repulze .....  | 239  |
| 7.8. Vodíkové vazby - vodíkové můstky .....                                  | 239  |
| 7.9. Uplatnění teorie slabých interakcí, empirické<br>odhady interakce ..... | 243  |
| 8. <u>Kvantová teorie a struktura nukleových kyselin</u> .                   | 246  |
| 8.1. Biologie a kvantová teorie .....  | 246  |
| 8.2. Stavba nukleových kyselin .....   | 247  |
| 8.3. Elektronová struktura purinových a pyrimi-<br>dinových zásad .....      | 254  |
| 8.4. Jiné formy purinových a pyrimidinových zásad ...                        | 260  |
| 8.5. Interakce mezi bázemi nukleových kyselin .....                          | 265  |
| 8.6. Problém genetického kódu .....  | 269  |
| 8.7. Vliv záření na tvorbu mutací .....                                      | 274  |
| 8.8. Vliv chemických činidel na tvorbu mutací .....                          | 275  |
| 8.9. Mutace vyvolané podvojným tunelovým efektem ....                        | 277  |
| 9. <u>Závěr</u>  | 279  |
| - <u>Seznam nejčastěji používaných symbolů<br/>a zkratk</u> .....            | 282  |
| - <u>Literatura</u> .....  | 285  |