

Metody a aplikace teoretické chemie

Obsah:

I.	Metody kvantové chemie	3
a)	Metody molekulových orbitalů	4
	- <i>ab initio</i> metody	4
	- semiempirické metody	13
b)	Metody DFT	15
II.	Kvantově chemické výpočty	20
a)	Analýza elektronové struktury	20
b)	Optimalizace geometrie a PES	22
c)	Reakční cesta	24
d)	Výpočty rovnovážných a rychlostních konstant	25
e)	Vibrační spektroskopie	29
III.	Elektronová excitace a fotochemické procesy	34
a)	Kvantově chemické výpočty elektronové excitace	40
b)	Fotofyzikální procesy	45
c)	Fotochemické procesy	49
IV.	Slabé mezimolekulové interakce	51
a)	Nomenklatura	51
b)	Výpočty interakční energie malých systémů	60
c)	Výpočty interakcí velkých systémů	66
V.	Teoretické metody vhodné pro biomolekuly	69
a)	Empirické potenciály	70
b)	Molekulová mechanika	72
c)	Monte Carlo	73
d)	Molekulová dynamika	77
VI.	Počítačové programy a jejich používání	83
a)	Kvantově chemické programy	84
b)	Programy založené na molekulové mechanice	87
c)	Programy využívající molekulové dynamiky	87
d)	Grafické programy	88
VII.	Doporučená literatura	89