

Molekulové a biomolekulové interakce - MC260P98

1. Fyzikální mechanismy nekovalentních interakcí, závislost interakční energie na vzdálenosti
 - a. Elektrostatické interakce, dipól, multipóly, indukce
 - b. Londonova disperze
 - c. Pauliho repulze
2. Specifické typy nekovalentních interakcí
 - a. Vodíková vazba
 - b. Halogenová vazba a další sigma-hole interakce
 - c. Disperze a patrové interakce (stacking):
 - d. Přenos náboje
3. Nekovalentní interakce v termodynamice
 - a. Potenciální energie
 - b. Energie nulové vibrace
 - c. Entropie
 - d. Solvatace, "hydrofobní interakce"
 - e. van der Waalsova rovnice, konfigurační integrál
 - f. Izolované systémy: pevný rotor/harmonický oscilátor
4. Variační výpočty
 - a. Interakční energie
 - b. Superpoziční chyba
 - c. Metody výpočtu korelační energie
 - d. Přesné výpočty, extrapolace do CBS, CCSD()/CBS
 - e. DFT funkcionály, DFT-D a jeho varianty
 - f. Semiempirické metody, korekce pro nekov. interakce
5. Dekompozice interakční energie
 - a. Interakce v poruchové teorii, metody SAPT
 - b. Morokumova dekompozice
6. Molekulová mechanika
 - a. Nekovalentní interakce v MM, Lennard-Jonesův potenciál
 - b. Parametrizace MM forcefieldu
 - c. Polarizace
 - d. Výpočty volné energie - PMF
7. Experimentální metody
 - a. Rotační spektroskopie - odhad struktury
 - b. Vibrační spektra - charakteristika interakcí, interakční energie
 - c. Pokročilé spektroskopické metody, přímé měření disociační energie
 - d. Termochemie
8. Nekovalentní interakce v biomolekulách
 - a. Struktura DNA
 - b. Nekovalentní interakce v proteinech