

Spis treści

Przedmowa	VIII
Podziękowania	IX
1. Obliczenia komputerowe w chemii	1
1.1. Wprowadzenie	1
1.2. Teorie chemiczne a chemia obliczeniowa	1
1.3. Jak działają komputery?	2
1.4. Typy metod obliczeniowych	5
1.5. Formalizm matematyczny	5
1.6. Ćwiczenia i przykładowe obliczenia	5
1.7. Literatura uzupełniająca	6
1.8. Ćwiczenia	6
1.9. Podsumowanie	7
2. Chemia kwantowa	8
2.1. Wprowadzenie	8
2.2. Metoda Hartree-Focka	9
2.3. Praktyczne aspekty obliczeń w ramach metody Hartree-Focka	12
2.4. Funkcja falowa i energia w metodzie Hartree-Focka	16
2.5. Metoda Hartree-Focka z restrykcją i bez restrykcji spinowej	20
2.6. Bazy funkcyjne	22
2.7. Literatura uzupełniająca	28
2.8. Ćwiczenia	28
2.9. Podsumowanie	28
3. Metody chemii kwantowej	30
3.1. Wprowadzenie	30
3.2. Metody <i>ab initio</i> uwzględniające korelację elektronową	30
3.3. Podejście wariacyjne: metoda mieszania konfiguracji	31
3.4. Podejście perturbacyjne: metoda Møllera-Plesseta	35
3.5. Metody typu sprzężonych klastrów	36
3.6. Bazy funkcyjne, korelacja elektronowa, metody skorelowane	38
3.7. Metody wieloreferencyjne	40
3.8. Teoria funkcjonału gęstości	46
3.9. Metody półempiryczne	49
3.10. Ciała stałe i modele periodyczne	49
3.11. Własności molekularne	51
3.12. Literatura uzupełniająca	51
3.13. Ćwiczenia	52
3.14. Podsumowanie	52

4. Mechanika molekularna	53
4.1. Wprowadzenie	53
4.2. Pola siłowe MM	54
4.3. Zestawy parametrów	57
4.4. Układy periodyczne i promień odcięcia	59
4.5. Praktyczne aspekty metod mechaniki molekularnej	62
4.6. Literatura uzupełniająca	63
4.7. Ćwiczenia	64
4.8. Podsumowanie	64
5. Optymalizacja geometrii	65
5.1. Wprowadzenie	65
5.2. Własności powierzchni energii potencjalnej	65
5.3. Metody optymalizacji geometrii	71
5.4. Optymalizacja geometrii za pomocą metod kwantowochemicznych	73
5.5. Optymalizacja geometrii za pomocą mechaniki molekularnej	78
5.6. Właściwości zoptymalizowanych struktur: częstości drgań	79
5.7. Stany przejściowe i ścieżki reakcji	81
5.8. Literatura uzupełniająca	84
5.9. Ćwiczenia	85
5.10. Podsumowanie	85
6. Metody dynamiczne	86
6.1. Wprowadzenie	86
6.2. Równania ruchu Newtona	86
6.3. Symulacje dynamiki molekularnej	88
6.4. Symulacje Monte Carlo	94
6.5. Symulacje dla biocząsteczek	95
6.6. Literatura uzupełniająca	96
6.7. Ćwiczenia	97
6.8. Podsumowanie	97
7. Stałe szybkości i równowagi	98
7.1. Wprowadzenie	98
7.2. Termodynamika statystyczna i równowaga	98
7.3. Teoria stanu przejściowego	103
7.4. Entalpie swobodne z symulacji MD i MC	104
7.5. Techniki rozszerzonego próbkowania	109
7.6. Literatura uzupełniająca	113
7.7. Ćwiczenia	114
7.8. Podsumowanie	114

8. Metody hybrydowe i wieloskalowe	115
8.1. Wprowadzenie	115
8.2. Ciągłe modele otoczenia	116
8.3. Metody hybrydowe	122
8.4. Modele gruboziarniste w mechanice molekularnej	124
8.5. Literatura uzupełniająca	125
8.6. Ćwiczenia	125
8.7. Podsumowanie	126
9. Podsumowanie	127
9.1. Wprowadzenie	127
9.2. Planowanie projektu obliczeniowego	127
9.3. Podsumowanie	129
Literatura uzupełniająca w języku polskim	131
Indeks	132