

1. Úvod	1
2. metodická část	3
2.1. <i>Přehled kvantové mechaniky</i>	3
2.1.1. <i>Základní pojmy</i>	3
2.1.2. <i>Atomové a molekulové orbitaly</i>	5
2.1.3. <i>Provádění výpočtů</i>	7
2.1.4. <i>Zvláštnosti neempirických výpočtů</i>	9
2.2. <i>Co lze z kvantověchemických výpočtů získat.</i>	9
2.3. <i>Zásady zadávání vstupních dat</i>	10
2.4. <i>Volba vzorových molekul</i>	11
2.5. <i>Převodní vztahy mezi jednotkami</i>	13
3. Rozšířená Hückelova metoda	14
3.1. <i>Úvod</i>	14
3.2. <i>Popis zadání</i>	15
3.2.1. <i>Popis vstupu do programu</i>	15
3.2.2. <i>Popis výstupu</i>	18
3.3. <i>Další možnosti programu</i>	20
3.4. <i>Ukázka vstupu</i>	21
3.5. <i>Ukázka výstupu</i>	22
4. Soubor programů CNINDO	55
4.1. <i>Úvod</i>	55
4.2. <i>Volba parametrů.</i>	56
4.3. <i>Ukázka vstupu</i>	57
4.4. <i>Program COORDCIN</i>	58
4.5. <i>Ukázka výstupu</i>	60
5. Soubor programů MOPAC	70
5.1. <i>Úvod</i>	70
5.2. <i>Parametry současné verze MOPACu</i>	71
5.3. <i>Možnosti, které nabízí MOPAC</i>	73
5.4. <i>Zadání pro MOPAC</i>	74
5.4.1. <i>Celkové schéma zadání</i>	74
5.4.2. <i>Popis klíčových slov, která řídí</i>	75

5.4.3 Zadání geometrie	92
5.4.4 Příklady zadání	93
5.5 Ukázka výstupu	95
6. Program TUTOR	135
6.1. Obecné rysy programu	135
6.2. Způsob zadání.	136
6.3. Výstup z programu	142
7. Topologická metoda	181
7.1 Úvod	181
7.2 Principy zadávání formátů	182
7.3. Zadání pro topologickou metodu	182
7.3.1 Popis klíčových slov	183
7.3.2 Jak spojovat krystaly	184
7.4. Zadání pro program TOPOLOGY	185
7.5. Výstup z programu TOPOLOGY	186
8. Závěr	200
Literatura	202
Obecná kvantová mechanika	
Programování ve Fortranu	
Rozšířená Hückelova metoda	
Metody CNCO/2, INDO	
Metoda MINDO/3	
Metoda MNDO	
Metoda AM-1	
Metoda PM-3	
Program MOPAC	
Program TUTOR	