

OBSAH

ÚVODNÍK	321
REFERÁTY	
Moderní teoretické metody analýzy elektronové struktury molekul	323
R. Ponec	
Proč sodík vybuchuje ve vodě?	330
P. Jungwirth	
Fluorografen – benjamínek v rodině grafenových derivátů	335
M. Pykal, R. Zbořil a M. Otyepka	
Spektroskopický výzkum fullerenu a počítačové simulace	344
M. Straka a P. Bouř	
Teoretická bioorganická chemie a spektroskopie	354
D. Bím, O. Gutten, J. Chalupský, M. Srnec a L. Rulíšek	
Jak pomáhá kvantová chemie singletovému štěpení zvýšit účinnost slunečních článků	365
J. Michl	
Nekovalentní vazby se σ-dírou: halogenová, chalkogenová a pniktogenová vazba	371
P. Hobza	
Chemická reaktivita – mířníky bratislavské skupiny kvantové chemie	376
I. Černušák, M. Urban, V. Kellö a J. Noga	
Konformační chování aminokyselin v peptidech a proteinech z pohledu molekulárního modelování a výpočetních metod	385
J. Vondrášek a J. Vymětal	
Ve stínu elektronů: kvantové efekty jader v chemii	394
D. Hollas, E. Muchová a P. Slavíček	

CONTENTS

EDITORIAL	321
REVIEW ARTICLES	
Modern Theoretical Methods of the Analysis of Molecular Electron Structure	323
R. Ponec	
Why Does Sodium Explode in Water?	330
P. Jungwirth	
Fluorographene – The Youngest Member of Graphene Family	335
M. Pykal, R. Zbořil, and M. Otyepka	
Spectroscopic Research of Fullerenes and Computer Simulations	344
M. Straka and P. Bouř	
Theoretical Bioorganic Chemistry and Spectroscopy	354
D. Bím, O. Gutten, J. Chalupský, M. Srnec, and L. Rulíšek	
How Quantum Chemistry of Singlet Fission Helps to Improve the Efficiency of Solar Cells	365
J. Michl	
Noncovalent Bonds with σ-Hole: Halogen, Chalcogen and Pnictogen Bonds	371
P. Hobza	
The Milestones of the Quantum Chemical Group in Bratislava	376
I. Černušák, M. Urban, V. Kellö, and J. Noga	
Conformational States of Amino Acids in Proteins and Peptides by Means of Computational Chemistry Methods	385
J. Vondrášek and J. Vymětal	
In The Shadow of Electrons: Nuclear Quantum Effects in Chemistry	394
D. Hollas, E. Muchová, and P. Slavíček	

CHEMICKÉ LISTY • ročník/volume 110 (2016), čís./no. 5 • LISTY CHEMICKÉ, roč./vol. 140, ČASOPIS PRO PRŮMYSL CHEMICKÝ, roč./vol. 126 • ISSN 0009-2770, ISSN 1213-7103 (e-verze) • evidenční číslo MK ČR E 321 • Vydává Česká společnost chemická jako časopis Asociace českých chemických společností ve spolupráci s VŠCHT Praha, s ČSPCH a ÚOCHB AV ČR za finanční podpory Rady vědeckých společností ČR, Akademie věd ČR, Nadace Český literární fond a kolektivních členů ČSCH • IČO 444715 • Published by the Czech Chemical Society • VEDOUCÍ REDAKTOR/EDITOR-IN-CHIEF: B. Kratochvíl • REDAKTOŘI/EDITORS: J. Barek, Z. Bělohav, P. Drašar, P. Holý, J. Horák, P. Chuchvalec, Z. Kolská, J. Podešva, P. Rauch; Bulletin: P. Drašar; Webové stránky: R. Liboska, P. Zámotný • ZAHRANIČNÍ A OBLASTNÍ REDAKTOŘI/FOREIGN AND REGIONAL EDITORS: F. Švec (USA) • TECHNICKÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Rápková • REDAKČNÍ RADA/ADVISORY BOARD: K. Bláha, L. Červený, E. Dibuszová, J. Hanika, Z. Havlas, Z. Hostomský, J. Káš, M. Koman, J. Koubek, K. Melzoch, V. Pačes, V. Růžička, I. Stibor, V. Šimánek, R. Zahradník • REDAKČNÍ ČÍSLO/ISSUE EDITOR: Lubomír Rulíšek • ADRESA PRO ZASÍLÁNÍ PRÍSPĚVKŮ/MANUSCRIPTS IN CZECH, SLOVAK OR ENGLISH CAN BE SENT TO: Chemické listy, Novotného Lávkva 5, 116 68 Praha 1; tel./phone +420 221 082 370, +420 222 220 184, e-mail: chem.listy@csvts.cz • INFORMACE O PŘEDPLATNÉM, OBJEDNÁVKY, PRODEJ JEDNOTLIVÝCH ČÍSEL A INZERCE/INFORMATION ADS: Sekretariát ČSCH, Novotného lávkva 5, 116 68 Praha 1; tel. +420 222 220 184, e-mail: chem.spol@csvts.cz, chem.ekonom@csvts.cz • PLNÁ VERZE NA INTERNETU/FULL VERSION ON URL: <http://www.chemicke-listy.cz> • TISK: Garamon s.r.o., Wonkova 432, 500 02 Hradec Králové • SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2016 Chemické listy/Česká společnost chemická • Cena výtisku 180 Kč, roční plně předplatné 2016 (12 čísel) 1810 Kč, individuální členské předplatné pro členy ČSCH 900 Kč. Roční předplatné ve Slovenské republice 96 EUR (doručování via SCHS), individuální členské předplatné pro členy ČSCH 73 EUR (doručování via SCHS), 96 EUR + poštovné (individuální doručování), ceny jsou uvedeny včetně DPH • DISTRIBUTION ABROAD: KUBON & SAGNER, POB 34 01 08, D-80328 Munich, FRG • This journal has been registered with the Copyright Clearance Center, 2322 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923, USA, where the consent and conditions can be obtained for copying the articles for personal or internal use • Pokyny pro autory najdete na <http://www.chemicke-listy.cz>, zkratky časopisů podle Chemical Abstract Service Source Index (viz <http://cassi.cas.org/search.jsp>) • Chemické listy obsahující Bulletin jsou zasílány zdarma všem individuálním a kolektivním členům ČSCH a ČSPCH v ČR i zahraničí, do všech relevantních knihoven v ČR a významným představitelům české chemie a chemického průmyslu; v rámci dohod o spolupráci i členům dalších odborných společností • Molekulární námět na obálce: P. Holý • Dáno do tisku 12.4.2016.