

## Otázky z chemické fyziky ke SZZk

### OKURH I

#### **Absorpce a emise záření**

Nestacionární poruchová teorie, stimulovaná absorpce a emise, tvar a šířka spektrálních čar, rozšíření spektrálních čar, doba života excitovaných stavů.

#### **Elektronové, vibrační a rotační stavy dvouatomových molekul**

Pohyby jader ve dvouatomových molekulách, funkce potenciální energie pro dvouatomové molekuly, anharmonicitu, vibračně-rotační interakce a odstředivá distorze. Spektroskopická symbolika pro dvouatomové molekuly.

#### **Vibrace víceatomových molekul**

Normální módy, normální vibrace, hladiny vibrační energie. Wilsonova vibrační analýza (GF problém).

#### **Spektroskopie NMR**

Magnetické vlastnosti molekuly, spin-spin štěpení, hyperjemná struktura spekter NMR, příklady NMR spekter.

#### **Spektroskopie ESR**

ESR spektrum vodíkového atomu, hyperjemná struktura spektra ESR, ESR spektra organických radikálů a iontů přechodných kovů, příklady ESR spekter.

#### **Grupy**

Grupové postuláty, třídy konjugovaných prvků, přehled důležitějších bodových grup molekul a jejich určování, izomorfismus a homomorfismus grup.

#### **Rerezentace grup**

Reducibilní a ireducibilní reprezentace, základní věty o ireducibilních reprezentacích, rozklad reducibilní reprezentace, direktní součin reprezentací.

#### **Symetrie a elektronová struktura molekul**

Symetrie celkových elektronových stavů a spektroskopická symbolika pro víceatomové molekuly, výběrová pravidla pro elektronové přechody, faktorizace sekulárního problému, konstrukce symetricky adaptovaných funkcí.

### **Teorie grup a molekulové vibrace**

Symetrie normálních vibrací, výběrová pravidla pro fundamentální vibrační přechody, vylučovací pravidlo pro IČ a Ramanova spektra, Fermiho rezonance, molekuly s velkými amplitudami vibrací.

### **Symetrie a chemické reakce**

Zachování momentů hybnosti v chemické reakci, Wignerova-Witmerova pravidla, pravidlo nekřížení, zachování orbitalové symetrie v chemických reakcích, teorie hraničních orbitalů.

## **OKRUH II**

### **Bornova-Oppenheimerova aproximace**

Adiabatická a Bornova-Oppenheimerova aproximace, hyperplochy potenciální energie, nediabatické efekty

### **Variační metody, model nezávislých elektronů**

Variační teorém, Rydbergv-Ritzův varianí princip, obecný tvar N-elektronové vlnové funkce, Slaterova-Condonova pravidla

### **Hartreeho-Fockovy-Roothanovy rovnice**

HF a HFR rovnice, metoda SCF, Koopmansův teorém, Brillouinova věta, konfigurace uzařených slupek

### **Semiempirické metody, pseudopotenciály a nábojové hustoty**

Metody NDO a metody AM1/PMx, pseudopotenciály, populací analýza

### **Spin víceelektronových systémů**

Spektrum operátorů momentů hybnosti, konstrukce spinových vlastních funkcí

### **Korelační energie a ab initio výpočty**

Definice korelační energie, relativistické efekty v kvantové chemii, báze atomových orbitalů, Slaterovy a Gaussovy báze, kontrahované funkce, polarizace a difúzní funkce

### **Metoda konfigurační a multikonfigurační interakce**

Sekulární rovnice, separační teorém, metody CISD, CISDTQ, MCSCF, úplná CI

### **Poruchové metody v kvantové chemii, metoda vázaných klastrů**

Stacionární poruchová teorie, mnohačasticová poruchová teorie, Mollerova-Plessetova poruchová teorie, metoda vázaných klastrů, správná závislost na počtu částic

### **Metody založené na funkcionálu hustoty**

Maticе hustoty, elektronová hustota, Hohenbergovy-Kohnovy teorémy, Kohnovy-Shamovy rovnice, možnosti použití

### **Molekulová mechanika, počítačové experimenty**

Empirické potenciály, molekulová mechanika, molekulová dynamika, Monte-Carlo metody.