

Kovalentní a nekovalentní interakce

původ, podmínky vzniku, charakteristické vlastnosti (energie, vzdálenost, entropie)

Výpočet interakčních energií

variační a poruchová metoda, superpoziční chyba (BSSE)

Komponenty poruchové interakční energie

Metody SAPT a DFT-SAPT

Molekulová mechanika

empirické potenciály

Použití metod DFT pro výpočty nekovalentních interakcí

Zaklady metody Monte Carlo

Propagatory v molekulové dynamice

Metody výpočtu volné energie

Statistické vzorkování, ergodický teorem

Korelační funkce a modelování spekter

Kvantové efekty v dynamice atomu a molekul

Atomové a molekulové orbitály

Typy AO, MO LCAO, MO malých molekul, reprezentace vlnové funkce, PW báze, CBS limita

Hyperplocha potenciální energie

BOA, charakter stacionárních bodů, způsoby lokalizace stacionárních bodů,

Modelování krystalů

Hybridní metody typu QM/MM, DFT výpočty na systémech s periodickými okrajovými podmínkami

Propojení kvantové chemie a statistické termodynamiky

Vibrační a rotační partiční funkce, přechod od elektronické energie k reakční enthalpii, adsorpční energie

Popis solvatovaných molekul

Explicitní a implicitní modely

Restricted vs. Unrestricted HF

disociační křivky (molekula H_2), MR metody

DFT

Vlastnosti elektronové hustoty, Hohenbergovy-Kohnovy teorémy, Kohnovy-Shamovy rovnice, Thomas-Fermi model

Hartree-Fockovy a Kohn-Shamovy rovnice

Rozdíly a podobnosti, vlastnosti jednoelektronových funkcí, Koopmansův teorém

Korelační energie

Definice, metody výpočtu korelační energie

Základní principy statistické termodynamiky

Soubory soustav ve statistické termodynamice – definice, vlastnosti. Postuláty statistické termodynamiky.

Partiční funkce

Partiční funkce monoatomického ideálního plynu. Partiční funkce dvouatomového plynu.

Adiabatická separace dynamických proměnných molekuly

Interakce molekulových útvarů s elektromagnetickým zářením

Elektronické, vibrační, rotační a spinové stavy molekuly

Strukturní charakteristiky molekuly vs. molekulové spektrum