**C9930: Metody kvantové chemie**, s**yllabus pro období JS 2020** (**Finální forma v režimu narušeného studia)**

1. **Postuláty a teorémy kvantové mechaniky [Lowe, Chapter 6].**
2. Postulát o vlnové funkci.
3. Postulát pro konstrukci operátorů.
4. Postulát o časově závislé Schrödingerově rovnici.
5. Postulát vztahující naměřené hodnoty k vlastním hodnotám.
6. Postulát o průměrných hodnotách.
7. Úplnost vlastních funkcí hemitovského operátoru.
8. Pauliuho princip výlučnosti.
9. **Variační metoda.** **[Lowe, Chapter 7].**

 Myšlenka variační metody.

 Lineární variace: Polarizovatelnost atomu H.

 Nelineární variace: Atom H (formou cvičení, základní a bonusová úloha)

1. **Rozšířená Hückelova metoda (EHT).** **[Lowe, Subchapter 8.13 + Chapter 10].**

Vztah HMO k variační metodě

π-spinové hustoty (z HMO) a EPR hyperjemné štěpící konstanty

EHT - princip vysvětlen na příkladu CH4

Zadání souřadnic jader.

Báze.

Překryvová matice.

Matice Hamiltoniánu.

Vlastní hodnoty a vektory (funkce).

Celková energie.

Mullikenovy populace.

EHT – cvičení: formaldehyd.

1. **Metoda SCF – cesta k podstatě [Lowe, 11.1-11.3, 5.1-5.4, 5.6,].**

Ab initio výpočty.

Molekulový Hamiltonián.

Tvar vlnové funkce.

Aproximace neinteragujících elektronů

Jednoduché součiny a elektronová výměnná symetrie

Princip Hartreeho metody selfkonzistentního pole

 Započtení časově zprůměrovaných repulzí: jak se v praxi provádí.

Slaterovy determinanty a metoda HF-SCF

1. **Metoda HF-SCF – rovnice, energie, fyzikální význam a limitace. [Lowe, 11.5-11.11].**

Hartreeho rovnice vs. Hartree-Fockovy rovnice

Atom Be –kinetická energie a přitahování jádrem

Rozdíl mezi Hartreeho a Fockovým operátorem

Pojem Coulombova a výměnného operátoru

Pojem Coulombova a výměnného integrálu

Interpretace vlastních hodnot nalezených v metodě HF-SCF

Celková elektronová energie v SCF.

Báze.

Hartree-Fockova limita.

Korelační energie.

Koopmansův teorém.