

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

1. Postuláty a teoremy kvantové mechaniky [Lowe, Chapter 6].

- I. Postulát o vlnové funkci.
- II. Postulát pro konstrukci operátorů.
- III. Postulát o časově závislé Schrödingerově rovnici.
- IV. Postulát vztahující naměřené hodnoty k vlastním hodnotám.
- V. Postulát o průměrných hodnotách.
- VI. Úplnost vlastních funkcí hermitovského operátoru.
- VII. Pauliho princip výlučnosti.

2. Variační metoda. [Lowe, Chapter 7].

- Myšlenka variační metody.
- Lineární variace: Polarizovatelnost atomu H.
- Nelineární variace: Atom H (formou cvičení, základní a bonusová úloha)

3. 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 CH_4
 - Zadání souřadnic jader.
 - Báze.
 - Překryvová matice.
 - Matice Hamiltoniánu.
 - Vlastní hodnoty a vektory (funkce).
 - Celková energie.
 - Mullikenovy populace.
- EHT – cvičení: formaldehyd.

4. 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

5. 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.