

# FCH3 - osnova

## Kvantová mechanika

1. Principy kvantové mechaniky
2. Schrödingerova rovnice
3. Hamiltonián molekuly
4. Born-Oppenheimerova aproximace
5. Kvantová čísla, atomové orbitály, Pauliho princip
6. Molekulové orbitály, původ chemické vazby

## Výpočetní chemie

1. MO-LCAO aproximace, Slaterův determinant
2. Variační princip
3. Jednoelektronová aproximace, Hartree-Fockova metoda
4. Korelační energie, post-HF metody
5. Teorie funkcionálu hustoty (DFT) - Hohenberg-Kohnův teorém
6. Výpočet dalších vlastností - gradient, Hessián, elektrostatický potenciál ...
7. Molekulová mechanika - tvar empirického potenciálu

## Molekulové vibrace

1. Separace translačních, rotačních a vibračních stupňů volnosti
2. Kvantová mechanika - Schrödingerova rovnice pro jádra
3. Operátor potenciální energie
4. Harmonická aproximace, řešení Schrödingerovy rovnice pro harmonický oscilátor
5. Kvantování energie, tvar vlnové funkce, energie nulové vibrace
6. Výběrová pravidla pro vibrační spektra
7. Anharmonicitu, Morseho potenciál
8. Víceatomové molekuly - normální módy a normální souřadnice

## Nekovalentní interakce

1. Fyzikální principy a potenciální energie jako funkce vzdálenosti
  - a. Elektrostatická interakce, dipól-dipól
  - b. Polarizace (indukce)
  - c. Londonova disperze
  - d. Pauliho repulze
2. Specifické typy interakcí
  - a. Vodíková vazba - elektronová struktura, spektroskopická detekce
  - b. Halogenová vazba - sigma-díra
3. NCI v termodynamice - van der Waalsova rovnice a dál
4. Role NCI v biomolekulách - DNA a proteiny

## Statistická termodynamika

1. Teplota v klasické termodynamice
2. Boltzmannovo rozdělení - odvození, pravděpodobnost stavů

3. Partiční funkce a její interpretace
4. Partiční funkce molekuly, separace stupňů volnosti
5. Kanonický soubor, partiční funkce vícečásticových systémů
6. Vstupní veličiny potřebné pro výpočet partiční funkce
7. Entropie ve statistické termodynamice
8. Odvození termodynamických veličin z partiční funkce
9. Systém interagujících částic, numerické metody vzorkování

## Fotochemie

1. Elektronové excitace, Frank-Condonův princip
2. Pravděpodobnost přechodu, překryv vibračních vlnových funkcí
3. Nezářivé procesy
  - a. Vibrační relaxace
  - b. Mezisystémové křížení
  - c. Fotodisociace
  - d. Reakce v excitovaném stavu, vyhnuté křížení / konické intersekcce
4. Zářivé procesy - fluorescence, fosforescence, Jablonskiho diagram
5. Kvantový výtěžek, fotochemická iniciace řetězových reakcí
6. Stimulovaná emise, princip fungování laseru

## Nukleární magnetická rezonance

1. Spin a jeho kvantová čísla
2. Spin jader
3. Energie jádra v mag. poli, Zeemanův jev, Larmorova frekvence
4. NMR spektrometr, význam separace spinových stavů
5. Stínění a chemický posuv
6. Jemná struktura, štěpení čar, ekvivalence atomů