

# Obsah

1	Úvod	7
2	Atomové jednotky	17
3	Bornova-Oppenheimerova a adiabatická aproximace	19
4	Ion molekuly vodíku	23
5	Molekula vodíku	35
5.1	Heitlerova-Londonova metoda . . . . .	35
5.2	Vylepšení výpočtu molekuly vodíku . . . . .	39
5.2.1	Náboj jádra jako parametr . . . . .	39
5.2.2	Zahrnutí iontových stavů . . . . .	40
5.2.3	Vzájemná polarizace atomů vodíku . . . . .	40
5.2.4	Hundova-Mullikenova metoda . . . . .	41
5.2.5	Korelace pohybu elektronů . . . . .	41
5.2.6	Korelace a Hundova-Mullikenova metoda . . . . .	42
5.2.7	Výpočet Jamese a Coolidge . . . . .	43
5.3	Porovnání teorie a experimentu. . . . .	44
6	Metody VB a LCAO	47
7	Klasifikace stavů dvouatomových molekul	51
8	Kmity a rotace molekul	55
8.1	Úvod . . . . .	55



8.2	Kmity a rotace dvouatomových molekul . . . . .	55
8.3	Morseho potenciál . . . . .	59
8.4	Kmity a rotace víceatomových molekul . . . . .	60
<b>9</b>	<b>Báze atomových orbitalů</b>	<b>61</b>
9.1	Reálné kulové funkce . . . . .	62
9.2	Radiální části pro vodíkpodobný atom . . . . .	63
9.3	Slaterovy funkce . . . . .	64
9.4	Gaussovské funkce . . . . .	65
9.5	Označení bází . . . . .	67
<b>10</b>	<b>Hybridizace vlnových funkcí</b>	<b>69</b>
10.1	Hybridizace $sp^3$ . . . . .	70
10.2	Hybridizace $sp^2$ . . . . .	71
10.3	Hybridizace $sp$ . . . . .	71
<b>11</b>	<b>Hückelova metoda</b>	<b>73</b>
11.1	Zavedení Hückelovy metody . . . . .	73
11.2	Výpočet ethylenu Hückelovou metodou . . . . .	75
11.3	Cyklické uhlovodíky . . . . .	76
11.4	Lineární polyeny . . . . .	80
11.5	Náboj na atomu a další charakteristiky . . . . .	81
11.6	Vztah mezi energií a mírou vazby . . . . .	82
11.7	Polarizovatelnost . . . . .	85
<b>12</b>	<b>Metoda FEMO</b>	<b>89</b>
<b>13</b>	<b>Hartreeho rovnice</b>	<b>93</b>
<b>14</b>	<b>Hartreeho-Fockovy rovnice v obecném tvaru</b>	<b>99</b>
<b>15</b>	<b>Uzavřené a otevřené slupky</b>	<b>107</b>
<b>16</b>	<b>Hartreeho-Fockovy rovnice pro uzavřené slupky</b>	<b>109</b>



<b>17 Roothaanovy rovnice pro uzavřené slupky</b>	<b>113</b>
17.1 Odvození Roothaanových rovnic . . . . .	113
17.2 Příklad na řešení Roothaanových rovnic . . . . .	117
<b>18 Hartreeho-Fockovy rovnice pro otevřené slupky</b>	<b>121</b>
<b>19 Roothaanovy rovnice pro otevřené slupky</b>	<b>125</b>
<b>20 Slaterova-Condonova pravidla</b>	<b>127</b>
<b>21 Semiempirické metody</b>	<b>131</b>
21.1 Úvod . . . . .	131
21.2 Metoda CNDO . . . . .	133
21.3 Metoda INDO . . . . .	138
21.4 Metoda NDDO . . . . .	139
21.5 Metoda RCNDO . . . . .	140
21.6 Metoda MINDO . . . . .	141
21.7 Metoda MNDO . . . . .	142
21.8 Metoda PPP . . . . .	144
21.9 Další semiempirické metody . . . . .	145
<b>22 Zobecněná Hückelova metoda</b>	<b>147</b>
<b>23 Celková energie molekul</b>	<b>151</b>
23.1 Referenční stavy . . . . .	151
23.2 Složky celkové energie . . . . .	152
<b>24 Korelační energie</b>	<b>157</b>
24.1 Původ korelační energie . . . . .	157
24.2 Přímé započtení korelace . . . . .	159
24.3 Metoda konfigurační interakce . . . . .	159
24.4 Metoda vázaných klastrů . . . . .	163
24.5 Møllerova-Plessetova metoda . . . . .	169
<b>25 Metoda funkcionálu hustoty</b>	<b>173</b>
25.1 Úvod . . . . .	173
25.2 Hohenbergův-Kohnův teorém . . . . .	174



25.3	Kohnovy-Shamovy rovnice . . . . .	177
25.4	Aproximace lokální hustoty . . . . .	180
<b>26</b>	<b>Viriálový teorém</b>	<b>183</b>
26.1	Hyperviriálový teorém . . . . .	183
26.2	Viriálový teorém . . . . .	184
26.3	Použití v Bornově-Oppenheimerově aproximaci . . . . .	186
<b>27</b>	<b>Hellmanův-Feynmanův teorém</b>	<b>189</b>
27.1	Odvození teorému . . . . .	189
27.2	Příklad. Dvouatomové molekuly . . . . .	190
<b>28</b>	<b>Van der Waalsovy interakce</b>	<b>193</b>
28.1	Úvod . . . . .	193
28.2	Interakce dvou oscilujících dipólů . . . . .	194
28.3	Interakce dvou atomů vodíku . . . . .	197
28.4	Výpočty mezimolekulových interakčních energií . . . . .	201
<b>29</b>	<b>Chemická reaktivita</b>	<b>203</b>
<b>30</b>	<b>Analytický klastrový model</b>	<b>209</b>
30.1	Úvod . . . . .	209
30.2	Kvantový analytický klastrový model . . . . .	210
30.3	Topologický analytický klastrový model . . . . .	211
30.4	Závislost interpolačních formulí na $1/N^{1/3}$ . . . . .	212
30.5	Nestacionární vlastnosti . . . . .	214
<b>31</b>	<b>Časový vývoj systémů</b>	<b>219</b>
31.1	Úvod . . . . .	219
31.2	Zobecněná kinetická rovnice . . . . .	220
31.3	Pauliho kinetická rovnice . . . . .	223
<b>32</b>	<b>Fyzikální konstanty</b>	<b>225</b>