

# Úvodní informace

**Kvantová chemie**

**Lekce 0**

# Vyučující

## René Kalus

Katedra aplikované matematiky, FEI

- místnost: EA 544
- e-mail: [rene.kalus@vsb.cz](mailto:rene.kalus@vsb.cz)
- web: [https://homel.vsb.cz/~kal0063/vyuka\\_kvch.htm](https://homel.vsb.cz/~kal0063/vyuka_kvch.htm)

# Obsah kurzu

## Kvantová chemie

- kvantová teorie (mechanika) aplikovaná na elektrony pohybující se kolem atomových jader
- interakce atomů/molekul: potenciální energie a její derivace (gradienty, Hessova matice)
- další vlastnosti: rozložení náboje (multipólové momenty), polarizovatelnost atomů/molekul, pravděpodobnosti zářivých a nezářivých přechodů, ...

## Problémy

- mnoho částic
- elektrony (fermiony), speciální chování v kolektivu (Pauliho vylučovací princip)
- komplikované rovnice → numerické řešení (výpočetně náročné) → počítače

# Obsah kurzu

## Nač se soustředíme my?

- základní pojmy a metody

## Cíl(e)

- naučit se základy jazyka kvantové chemie
- komunikace s kvantovými chemiky
- připravenost k použití kvantově-chemických sw balíků

# Obsah kurzu

1. Souhrn základů kvantové teorie (vlnové funkce, operátory, Schrödingerova rovnice, ...)
2. Moment hybnosti, spin
3. Atom vodíku
4. Vícečásticové systémy
5. Přibližné metody kvantové teorie - variační metoda
6. Přibližné metody kvantové teorie - poruchová metoda
7. Atom helia
8. Bornova-Oppenheimerova aproximace, nadplocha potenciální energie
9. Hartreeho-Fockova metoda
10. Metoda MO-LCAO, báze atomových orbital, metoda VB
11. Nad rámec HF metody

# Organizace kurzu

## Přednášky

- prezenční
- prezentace (látka v odrážkách, odkazy na výukové materiály / Wikipedii)

## Cvičení

- prezenční
- (výpočetní) úkoly k teorii vyložené na přednášce
- prezentace připravených řešení (zadání vždy minimálně s týdenním předstihem)

# Literatura

## „Povinná“

- poznámky z přednášek (prezentace)
- odkazy k jednotlivým tématům v prezentaci

## Povinná (EDISON)

- Skála, L. *Kvantová teorie molekul*, Karolinum, Praha 1995
- Pilar, F. L., *Elementary Quantum Chemistry*, McGraw-Hill, New York 1990

### + doplněk

- Slavíček, P. a kol., *Kvantová chemie: první čtení*, VŠCHT Praha, dostupné [online](#)

## Doporučená

- Formánek, J. *Úvod do kvantové teorie I a II*, Academia, Praha 2004
- Fong, P. *Elementary Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore 2005

# Komunikace, konzultace, ...

## Hlavní komunikační kanál(y)

- prezentace (přednášky i cvičení) na webu předmětu ([https://homel.vsb.cz/~ka10063/vyuka\\_kvch.htm](https://homel.vsb.cz/~ka10063/vyuka_kvch.htm))
- rozešlu všem e-mailem (případně přes můj oficiální web VŠB-TUO)

## Konzultace

- přednášky, cvičení
- e-mail
- hromadné/individuální konzultace (dle domluvy)



# Uzavření kurzu

## EDISON

- vypracování projektu a jeho prezentace, ústní zkouška

## Zápočet

- „vypracování projektu“ = vyřešení (3 – 4) zadaných úloh a předvedení řešení na cvičení (max. 40 bodů)
- případně další úkoly

## Zkouška

- ústní zkouška (3 otázky po 20 bodech, komentář k prezentacím)

# Různé

- předpokládané výpadky výuky
  - 5. 3. – Kariéra+ (samostudium, pro zájemce výuka beze změny)
- ???