

Teoretická chemie – rozšířený syllabus

- Rovnice klasické mechaniky, zákony zachování v klasické mechanice
- Klasická vlnová rovnice, postupné a stojaté vlnění
- Záření černého tělesa a jeho interpretace Planckem
- Fotoelektrický jev a jeho interpretace Einsteinem
- Vlnově-částicový dualismus a de Broglieho vztah
- Spektrum atomu vodíku a Bohrova teorie
- Dvouštěrbinový experiment: světlo, dělové koule a elektrony
- Relace neurčitosti mezi polohou a hybností, energií a časem. Řádové odhady veličin, důsledky pro ultrarychlou spektroskopii
- Schrödingerova rovnice: pohybová rovnice pro kvantové částice, její „navození“
- Časově závislá a časově nezávislá SR, souvislost s klasickou mechanikou
- Vlnová funkce: interpretace, podmínky „rozumné“ vlnové funkce
- Pojem operátoru, vlastní problém, vlastní hodnota, vlastní číslo
- Prostory funkcí, úplný soubor, ortogonalita funkcí
- Hermitovský operátor
- Postuláty kvantové mechaniky
- Operátory fyzikálních veličin, komutace operátorů, souvislost s relacemi neurčitosti
- Schrödingerova rovnice pro mnoho částic, formulace Hamiltoniánu
- Jednodimenzionální potenciály významné pro chemiky: nekonečná a konečná jáma, bariéra, harmonický a anharmonický oscilátor, „double well“
- Částice v jednorozměrné potenciálové jámě, energetické hladiny a vlastní funkce

- Absorpční spektrum v konjugovaných uhlovodících: metoda FEMO
- Energetické pásy v nekonečném periodickém systému, vodivost polyacetylenů
- Částice v jámě a základní koncepty kvantové mechaniky: ortogonalita, princip korespondence, energie nulového bodu
- Částice ve dvourozměrné potenciálové jámě, separabilita Hamiltoniánu, degenerace stavu, částice v 3D krabici
- Konečně hluboká jáma. Ionizace a tunelování
- Tunelový jev, význam v chemii (reakční rychlost)
- Zákony zachování v kvantové mechanice
- Moment hybnosti v klasické a kvantové mechanice
- Spin. Sternův-Gerlachův experiment
- Kartézské a sférické souřadnice
- Variační formulace kvantové mechaniky, odhad přibližné vlnové funkce
- Atom vodíku: formulace Hamiltoniánu, energetické spektrum, vlnové funkce a kvantová čísla
- Mnohaelektronové atomy: zkusmé řešení pomocí vlnové funkce atomu vodíkového typu
- Obecné vlastnosti vlnové funkce více elektronů, antisymetrie, Pauliho vylučovací princip, spin
- Hartreeho a Hartreeho-Fockova metoda pro atomy
- Energetické hladiny víceelektronových atomů, výstavbový princip, pravidlo maximální multiplicity
- Poloměr atomů, ionizační potenciál, elektronová afinita, elektronegativita a periodicitu těchto vlastností
- Periodická tabulka prvků jako kvantově-chemická struktura
- Povrch potenciální energie a Bornova-Oppenheimerova aproximace

- Nejjednodušší molekula: ion molekuly vodíku
- Metoda molekulových orbitalů a sekulární rovnice
- Klasifikace molekulových orbitalů
- Molekulové orbitaly pro homonukleární diatomické molekuly, řád vazby
- Molekulové orbitaly pro heteronukleární molekuly
- Molekulové orbitaly u víceatomových molekul, hybridní orbitaly
- Elektrony v konjugovaných systémech: Hückelova metoda, delokalizační energie
- Elektromagnetické záření, spektrální oblasti, vztah mezi energií a vlnovou délkou. Barevný vjem
- Absorpce, emise a stimulovaná emise. Lasery
- Lambertův-Beerův zákon a jeho aplikace
- Vibrační spektroskopie. Harmonický oscilátor, energetické hladiny, výběrová pravidla, spektrum, izotopový posun, charakteristické frekvence
- Rotační spektroskopie. Energetické hladiny, výběrová pravidla a spektra
- Molekulová spektroskopie. Jablonského diagram, fluorescence a fosforescence
- Základní principy statistické termodynamiky, časová a souborová střední hodnota, ergodická hypotéza
- Mikrokanonický a kanonický soubor, Boltzmannova pravděpodobnost – odvození
- Barometrická rovnice
- Boltzmannova pravděpodobnost a degenerace, aplikace na molekuly
- Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení molekulárních rychlostí
- Boltzmannova rovnice pro entropii a aplikace (ideální roztok, narušení 3. věty)

- Kanonická partiční funkce – obecný zápis a semiklasická limita, vztah k termodynamickým potenciálům
- Opakování termodynamiky: Helmholtzova energie, tlak, vnitřní energie, chemický potenciál, entropie
- Statistická termodynamika ideálního plynu bez vnitřních stupňů volnosti
- Statistická termodynamika ideálního plynu s vnitřními stupni volnosti, vnitřní partiční funkce (rotační, vibrační, elektronová)
- Tepelná kapacita ideálního plynu; ekvipartiční princip a meze jeho použitelnosti
- Rovnováhy v ideální plynné fázi: výpočet z prvních principů
- Molekulární modelování a simulace – základní principy
- Klasické molekulární modely, typy sil, modely malých a velkých molekul
- Viriálová stavová rovnice, meze použitelnosti. Vlastnosti 2. viriálového koeficientu
- Věta o viriálu
- Tepelná kapacita pevné látky, Einsteinův a Debyeův model
- Tlak ideálního plynu z kinetické teorie
- Kolizní průměr a střední volná dráha
- Viskozita z kinetické teorie
- Rychlostní konstanta ze srážkové teorie
- Debyeova-Hückelova teorie elektrolytů
- Mřížkové systémy, Isingův model a mřížkový plyn, mřížkový model polymeru
- Statistická termodynamika kapalin, strukturní faktor a korelační funkce
- Kritické exponenty a renormalizační grupa