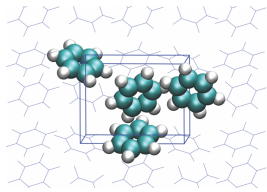


# Molekulární krystaly a kvantová mechanika

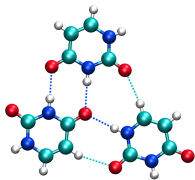
Jiří Klimeš, Katedra chemické fyziky a optiky



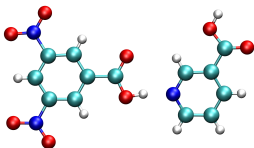
Krystal benzenu

- Vazebná energie:  $E_{\text{krystal}}/N - E_{\text{molekula}}$
- Je třeba použít kvantovou mechaniku.
- Problém: " $\infty$ " elektronů  $\rightarrow$  různé aproximace
- Studujeme přesnost a spolehlivost, snaha snížit výpočetní náročnost.

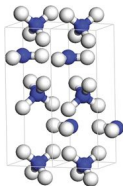
## Systémy / Nabízená témata



Molekulární klastry  
Studium přesnosti



Potřizisti  
Kde je vodík?



Exotické fáze  
( $\text{NH}_4^+ \text{NH}_2^-$ )