

# Popis předmětu

<b>Zkratka předmětu:</b>	AFC/KCAL	<b>Strana:</b>	1 / 2
<b>Název předmětu:</b>	Kvantová chemie anorganických látek		
<b>Akademický rok:</b>	2019/2020	<b>Tisknuto:</b>	14.11.2019 10:33

<b>Pracoviště / Zkratka</b>	AFC / KCAL	<b>Akademický rok</b>	2019/2020
<b>Název</b>	Kvantová chemie anorganických látek	<b>Způsob zakončení</b>	Zkouška
<b>Akreditováno/Kredity</b>	Ano, 2 Kred.	<b>Forma zakončení</b>	Kombinovaná
<b>Rozsah hodin</b>	Přednáška 2 [HOD/TYD]	<b>Zápočet před zkouškou</b>	NE
<b>Obs/max</b>	Statut A      Statut B      Statut C	<b>Počítán do průměru</b>	ANO
<b>Letní semestr</b>	0 / -      0 / -      0 / -	<b>Min. (B+C) studentů</b>	nestanoveno
<b>Zimní semestr</b>	0 / -      0 / -      0 / -	<b>Opakovaný zápis</b>	NE
<b>Rozvrh</b>	Ano	<b>Vyučovaný semestr</b>	Letní semestr
<b>Vyučovací jazyk</b>	Čeština	<b>Počet dnů praxe</b>	0
<b>Volně zapisovatelný předmět</b>	Ano		
<b>Hodnotící stupnice</b>	A B C D E F		
<b>Hod. v komb. formě studia</b>			
<b>Automat. uzn. záp. před zk.</b>	Ne		
<b>Periodicita</b>			
<b>Nahrazovaný předmět</b>	Žádný		
<b>Vyloučené předměty</b>	Nejsou definovány		
<b>Podmiňující předměty</b>	Nejsou definovány		
<b>Předměty informativně doporučené</b>	Nejsou definovány		
<b>Předměty, které předmět podmiňuje</b>	Nejsou definovány		

## Cíle předmětu (anotace):

Předmět je zaměřen na seznámení se s moderními metodami kvantově chemické analýzy elektronové struktury anorganických látek a výpočty s ní souvisejících charakteristik, jako jsou strukturní parametry molekulových a krystalových struktur, spektrální parametry (IR, UV-VIS, fluorescenční, NMR, EPR, Mossbauerova, spektra), magnetické projevy látek apod. Kromě nezbytného teoretického aparátu se studenti seznámí také s dostupným kvantově chemickým software zaměřeným výše uvedeným směrem.

## Požadavky na studenta

## Obsah

Předmět je zaměřen na seznámení se s moderními metodami kvantově chemické analýzy elektronové struktury anorganických látek a výpočty s ní souvisejících charakteristik, jako jsou strukturní parametry molekulových a krystalových struktur, spektrální parametry (IR, UV-VIS, fluorescenční, NMR, EPR, Mossbauerova, spektra), magnetické projevy látek apod. Kromě nezbytného teoretického aparátu se studenti seznámí také s dostupným kvantově chemickým software zaměřeným výše uvedeným směrem.

## Předpoklady - další informace k podmíněnosti studia předmětu

## Získané způsobilosti

## Studijní opory

## Garanti a vyučující

- **Garanti:** doc. RNDr. Michal Čajan, Ph.D.
- **Přednášející:** doc. RNDr. Michal Čajan, Ph.D., RNDr. Bohuslav Drahoš, Ph.D.

## Literatura

- **Doporučená:** Jensen, P., & Bunker, P. R. (2000). *Computational molecular spectroscopy*. Chichester: John Wiley & Sons.
- **Doporučená:** & Grunenberg, J. (2010). *Computational spectroscopy: methods, experiments and applications*. Weinheim: Wiley-VCH.
- **Doporučená:** Hill, J. R., Subramanian, L., & Maiti, A. (2005). *Molecular modeling techniques in material sciences*. Boca Raton: Taylor & Francis.
- **Doporučená:** Leach AR. (2001). *Molecular Modelling - Principles and Applications (2 edition)*. Pearson Education.
- **Doporučená:** Molecular modelling: electronic structure methods (Clark, T.) - [http://library.upol.cz/i2/i2.search.cls?ictx=upol&src=upol\\_us\\_cat](http://library.upol.cz/i2/i2.search.cls?ictx=upol&src=upol_us_cat)
- **Doporučená:** Atkins, P. W., & Friedman, R. S. (2011). *Molecular quantum mechanics*. Oxford: Oxford University Press.

### Vyučovací metody

Monologická (výklad, přednáška, instruktáž)  
Metody práce s textem (učebnicí, knihou)

### Hodnotící metody

Ústní zkouška

### Předmět je zařazen do studijních programů:

Studijní program	Typ stud.	Forma	Obor	Etapa	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Chemie	Navazující	Prezenční	Anorganická chemie	1	2015	2019	Povinně volitelné předměty	B	1	LS