

Abstrakt

Tématem diplomové práce jsou výpočty jednoreferenčními a Brillouinovými-Wignerovými multireferenčními metodami spřažených klastrů. V úvodní části je podán stručný přehled teorie vybraných kvantově chemických metod se zaměřením na teorii spřažených klastrů (jedno i multireferenční).

Třetí kapitola se věnuje výpočtům nejnižšího singletního a tripletního elektronového stavu molekuly nitridu boru (BN). Nejnižší singletní stav ($^1\Sigma^+$) vykazuje multireferenční charakter, a proto je tato molekula vhodná pro testy nově vyvinutých výpočetních metod. Různými variantami multireferenční Brillouinovy-Wignerovy metody spřažených klastrů (MR BWCC) byly spočítány vibrační frekvence, anharmonicity a hodnoty singlet-tripletního štěpení. Výsledky byly porovnány s experimentálními hodnotami, výsledky jednoreferenční metody spřažených klastrů a také redukované multireferenční metody spřažených klastrů.

Čtvrtá a pátá kapitola představují studii série sedmi malých polycyklických uhlovodíků sumárního vzorce C_5H_{2n} ($n = 0 - 4$) [1]. Na úrovni metody CCSD(T)/cc-pVTZ byla ověřena existence lokálních minim všech sedmi struktur. Jejich stabilita byla předpovězena na základě výsledků výpočtů slučovacích entalpií a energií pnutí. Na úrovni metody CCSD(T)/cc-pVTZ byly spočítány 1H a ^{13}C NMR spektra (chemické posuny), IČ a Ramanova spektra. Dále byla metodami MR BWCCSD a MR BWCCSD(T) studována reakce přesmyku jedné z těchto látek - tricyklopentanu na 1,3 dien, který probíhá přes biradikálový tranzitní stav. Výsledky reakčních a aktivačních entalpií a vertikálního singlet-tripletního štěpení tranzitního stavu byly porovnány s výsledky předešlých teoretických studií.

Klíčová slova: *Ab initio* výpočty, jednoreferenční a multireferenční metody spřažených klastrů, nitrid boru, polycyklopentany

Literatura

[1] Veis L.; Čársky P.; Pittner J.; Michl J. *Collect. Czech. Chem. Commun.* **2008**, *73*, 1525-1551