

Práce se zabývá problémem disperzní interakce v DFT, o kterém je nejprve podán stručný přehled, následován systematickou studií chování metody LAP, zejména její transferability. Disperze je druh van der Waalsovských sil, dominantní v důležitých molekulárních systémech jako jsou biomolekuly nebo adsorpční systémy. DFT je stále častěji používaná metoda pro modelování chemických systémů. Přesto je disperze v DFT reprodukována špatně. Podáváme jednoduchou ilustraci problému a představíme několik známých opravných metod. Jedna z nich je metoda lokálních atomických potenciálů, kterou rozvíjíme z její originální formulace, což nám umožní přesnou shodu s referenčními interakčními křivkami. Naši úpravu použijeme na systémy sestávající z molekuly benzenu a atomu vzácného plynu. Vytvoříme potenciály pro atomy vzácných plynů a uhlík. Z našich výpočtů vyplývá, že metoda LAP není příliš transferabilní. Výpočty popsané v této bakalářské práci představují první pokus o detailní studii chování metody LAP.