

Abstrakt

Tato práce porovnává výsledky čtyř teoretických metod výpočtu molekulových orbitalů v pěti vybraných bázích, které se liší svojí velikostí, s experimentálními daty. Jako referenční molekuly byly zvoleny dvouatomové hydridy přechodných kovů. Mezi vlastnosti, které byly porovnávány s experimentem, patří meziatomová vzdálenost, disociační energie, vybraná vibrační data a anharmonicity.

Výpočty nerespektující teorii relativity poskytovaly nefyzikální výsledky. Bylo potvrzeno, že teorie vázaných klastrů je nejpřesnější ze zkoumaných metod teoretických výpočtů. Přesnosti bází korespondovaly s jejich velikostí.

Přidáním několika polarizačních orbitalů k jedné z menších zkoumaných bází byly podstatně vylepšeny její výsledky. Dokonce bylo docíleno podobné přesnosti, jaké dosahovala největší zkoumaná báze. Její výpočetní čas byl ale významně kratší.