

Molekulárne kryštály sú dôležité materiály s mnohými aplikáciami v rôznych vedných odboroch a priemysle. Často majú bohatý fázový diagram a môžu sa vyskytovať v rôznych kryštálových štruktúrach. K popisu malých energetických rozdielov medzi jednotlivými fázami alebo kryštálovými štruktúrami sú potrebné presné kvantovo-mechanické metódy. V tejto práci počítame väzbové energie kryštálov metánu, metanolu, amoniaku a oxidu uhličitého dvomi rôznymi prístupmi, a to fragmentovým prístupom a prístupom s periodickými okrajovými podmienkami. Tieto dve metódy majú rozličné nároky na výpočtový čas a ľudské zdroje. V rámci fragmentového prístupu sme použili kvantovo mechanické metódy Hartree-Fock (HF), MP2 a CCSD(T). S periodickými okrajovými podmienkami sme aplikovali HF a MP2 metódy. Pre všetky skúmané systémy, ktoré sa navzájom líšia dominantnými medzimolekulárnymi interakciami, sme obomi prístupmi získali zhodné výsledky s odchýlkami 0,1 – 0,6 kJ/mol na úrovni MP2 metódy.