

- 1: Molekulová mechanika – čo to je a ako to funguje. Stručne aj čo to je molekulová dynamika.
- 2: Uved' 5 postulátov kvantovej mechaniky
- 3: Schrödingerova rovnica pre viacero elektrónov – čo znamenajú jednotlivé členy?
- 4: Ako vstupujú do kvantovo-chemických výpočtov relativistické efekty? Kedy a ako ich zanedbávame a kedy a ako ich môžeme brať do úvahy?
- 5: Čo to je Born-Oppenheimerova aproximácia?
- 6: Čo to je Slaterov determinant?
- 7: Čo je aproximácia LCAO?
- 8: Čo to je variačný princíp?
- 9: Na akých predpokladoch je založená a ako funguje Hückelova metóda? Aké zlúčeniny pomocou nej vieme vypočítať?
- 10: Aké sú rozdiely medzi týmito metódami: molekulová mechanika, ab initio metódy a semiempirické metódy?
- 11: Čo to je Hartreeho aproximácia?
- 12: Stručne vysvetli na akých predpokladoch je založená Hartree-Fockova metóda a aké nepresnosti môžu vyplývať z týchto predpokladov
- 13: Čo sú to 2- a 4- centrové integrály v Hartree-Fockovej metóde?
- 14: Stručne vysvetli, čo to je a ako funguje procedúra SCF.
- 15: Čo to je zložitosť výpočtu (škálovanie, O-notácia), uved' akú zložitosť majú najzložitejšie súčasti Hartree-Fockovej metódy.
- 16: Aký je rozdiel medzi Slaterovými (STO) a Gaussovskými (GTO) orbitálmi? Prečo pri výpočtoch obvykle používame bazové funkcie zložené z viacerých Gaussovských orbitálov?
- 17: Vysvetli, čo znamenajú jednotlivé zložky tejto bazovej sady: 6-311G+(d,p)
- 18: Čo to znamená double- alebo tripe-zéta báza? Čo to znamená keď je báza kontrahovaná?
- 19: Aké semiempirické metódy poznáš (uved' aspoň 3) a aké zjednodušenia sa v nich používajú oproti ab initio metódam?
- 20: Napíš ako vyzerá Hamiltonián pre mnohočasticový (elektróny, jadrá) systém. Ukáž ako sa dá separovať na elektrónový a jadrový Hamiltonián a za napíš na akom predpoklade je takáto operácia založená.
- 21: Čo to je elektrónová korelácia? Uved' názov aspoň jednej metódy, kde táto interakcia nie je zahrnutá a jednej, ktorá ju aspoň čiastočne zahŕňa.
- 22: Aký je rozdiel medzi post-HF metódami a Hartree-Fockovou metódou? Uved' názov aspoň troch post-HF metód.

- 23: Čo to je metóda konfiguračnej interakcie? Čo to je CASSCF?
- 24: Stručne popíš poruchovú metódu a metódu spriahnutých klastrov.
- 25: Aký je rozdiel medzi metódami DFT a ab initio metódami?
- 26: Napiš ako vyzerá Kohn-Shamov operátor. Vysvetli, čo znamenajú jednotlivé členy. Kde sa s týmto operátorom môžeme stretnúť?
- 27: Uveď aspoň 5 rôznych tried funkcionálov DFT. Čím sa tieto triedy líšia? Zarad' nejaký z funkcionálov s ktorým si sa stretol pri výpočtoch do týchto tried.
- 28: Čo to je metóda TD-DFT a na čo slúži?
- 29: Čo to je hyperplocha potenciálnej energie a s akými bodmi sa na nej môžeme stretnúť?
- 30: Ako funguje optimalizácia geometrie?
- 31: Ako môžeme pri výpočtoch započítať vplyv rozpúšťadla? Čo to je implicitná a čo explicitná solvátácia?
- 32: Čo to je model PCM a ako funguje?
- 33: Aké korekcie k elektrónovej energii pripočítavame pri výpočte termochemických vlastností? Ktoré z týchto členov sú nenulové aj pri teplote 0 K?
- 34: Od akých parametrov je závislá vibračná energia, ak použijeme model harmonického oscilátora? Aké odchýlky sa vyskytujú v reálnom vibračnom spektre oproti spektru, ktoré dostaneme pri aproximácii na harmonický oscilátor?
- 35: Čo to je Boltzmannova distribúcia a kde sa s ňou môžeme stretnúť?
- 36: Vodíková a halogénová väzba – čo to je a na akých interakciách sú založené?
- 37: Ako môžeme pomocou výpočtových metód modelovať spektrum NMR? Čo to je diamagnetické a paramagnetické tienenie? Čo to je Fermiho kontaktná interakcia?
- 38: Čo to je Mullikenova populačná analýza a NMO?
- 39: Ako postupujeme pri výpočte acidobázických vlastností molekúl? Čo je to LFER a prečo je využitie LFER pri predikcii acidobázických vlastností výhodné?
- 40: Ako postupujeme pri výpočte redoxných vlastností molekúl? Čo je to LFER a prečo je využitie LFER pri predikcii redoxných vlastností výhodné? Čo to je Koopmansova teoréma?
- 41: Nakresli Jablonského diagram a vyznač v ňom absorpciu, fluorescenciu, nežiarivý prechod do základného stavu (vnútorná konverzia)
- 42: Čo to je Stokesov posun a prečo je pre niektoré molekuly výrazne vyšší od nuly?
- 43: Aké metódy môžeme využiť na predikciu UV-VIS spektier?
- 44: Čo to je Eyringova rovnica a ako môžeme predikovať selektivitu kineticky riadenej reakcie? Čo to je Curtin-Hammetov princíp?

45: Ako postupujeme pri výpočte tranzitných stavov? Kedy nemusí dávať teória tranzitného stavu dobré výsledky pri predikcii rýchlostných konštánt?

46: Čo to je kinetický izotopový efekt a kde sa s ním môžeme stretnúť?

47: Výpočtová medicínálna chémia – čo to je docking a ako funguje, čo to je QSAR, Lipinského pravidlo piatich a ADME/T?