

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије Физичка хемија			
Назив предмета: Примењена квантна хемија			
Наставници: Петковић Милена, Јеросимић Станка			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 7			
Услов: Нема			
Циљ предмета Постављање квантно-хемијских прорачуна за конкретне проблеме, бирање одговарајуће методе и атомских базних скупова за електронска структурна израчунавања, интерпретација резултата и њихово довођење у везу са експерименталним вредностима. Правилна примена метода и добијање релевантних резултата подразумева познавање теоријских основа квантне хемије које су студенти стекли на предмету Квантна хемија на основним студијама.			
Исход предмета Студент је научен да користи основне методе квантне хемија за испитивање молекулских система: добијање равнотежних геометријских структура, конструисање потенцијалних површи, предвиђање вибрационих и електронских спектра молекула и њихових термодинамичких особина, као и кинетичких параметара елементарних хемијских реакција.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> I Методе. Решавање електронског структурног проблема код молекулских система: Хартри-Фокова метода. Укључивање електронске корелације и пост Хартри-Фокове методе: пертурбациона Молар-Плесет метода, метода интеракције конфигурација (једнореферентна, вишереферентна), метода спрегнутих кластера. Теорија функционала густине. Базни скупови. II Примена. Одређивање равнотежних геометрија молекула: оптимизација структура. Конструисање површи потенцијалне енергије основног и побуђених електронских стања. Рачунање фреквенција молекулских вибрација: инфрацрвени и рамански спектри. Електронски спектри. Израчунавање термодинамичких особина молекула. Одређивање кинетичких параметара: енергија активације и константа брзине. Утицај растварача на својства раствора. Анализа орбитала и електронске густине. <i>Практична настава</i> Коришћење квантно-хемијских програма за прорачуне и решавање конкретних проблема.			
Литература 1. Примењена квантна хемија, Милена Петковић, Факултет за физичку хемију, Београд, 2013. 2. Computational Chemistry, David C. Young, Wiley, New York, 2001.			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2	Практична настава: 4	
Методе извођења наставе Предавања, консултације, семинари, практичне вежбе.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
практична настава: решавање конкретних проблема	40	усмени испит	30
семинарски рад	30		