

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Основне академске студије Физичка хемија
Назив предмета: Квантна хемија
Наставник: Јеросимић Станка
Статус предмета: Обавезни
Број ЕСПБ: 7
Услов: За упис предмета потребно је положити све испите из I студијске године и уписати све неположене предмете из II и III студијске године. За полагање испита потребно је положити све испите из I и II студијске године.
<p>Циљ предмета</p> <p>Предмет има за циљ увођење основа квантне механике студентима физичке хемије који у општим курсевима физике нису радили област квантне механике, а затим уводи основе молекулске квантне хемије и њених метода, као и основе теорије група и симетрија молекула. Директно се наставља на предмет Атомистика са друге студијске године. Са нагласком на теорију, служи као основа за студенте који ће се бавити квантном хемијом, хемијском физиком, теоријском хемијом, рачунарском хемијом, за оне који ће користити квантно-хемијске прорачуне у спрези са експерименталним радом, за студенте који ће се бавити спектроскопијом.</p>
<p>Исход предмета</p> <p>Студент је стекао знање о основама нерелативистичке квантне механике и квантне хемије. Студент уме да користи Диракову нотацију, савладао је математички апарат који се користи у теоријској хемији; има довољно знања да може да користи литературу из области квантне хемије током свог будућег научног рада у области физичке хемије. Зна основне постулате квантне теорије, тј. везу предвиђања теорије и могућих експерименталних резултата. Студент је упознат са таласно-механичким описом и концептом спин-орбитала, са егзактним решењима Шредингерове једначине и општим методама за приближно решавање Шредингерове једначине (варијациони, пертурбациони). Студент уме да симетријски класификује молекуле и да користи таблице карактера симетријских група. Студенти су упознати са концептом адијабатских стања, површима потенцијалних енергија, равнотежном геометријом молекула. Упознати су са основама Хартри-Фокове методе, изградњом периодног система, формирањем хемијске везе, локализацијом молекулских орбитала, Копмансовом теоремом и основама пост-Хартри-Фокових метода. Студент је оспособљен да приступи квантно-хемијским прорачунима.</p>
<p>Садржај предмета</p> <p><i>Теоријска настава</i></p> <p>Математичке основе квантне механике (ортогоналне базе простора стања, оператори, комутаторска алгебра, Диракова нотација, матрична репрезентација, решавање својствених проблема матрица, промена базе, таласне функције). Постулати квантне механике. Квантна теорија и мерење – предвиђање резултата мерења, средња вредност, дисперзија резултата. Момент импулса и спин. Једноставни системи: атом водоника и хармонијски осцилатор. Варијациони метод. Пертурбациони метод. Теорија група и симетријске групе (репрезентација симетријских група, иредуцибилне, редуцибилне, таблице карактера, примена на интеграле, дозвољени/забрањени прелазни). Идентичне честице, бозони, фермиони, Паулијев принцип. Слејтерова детерминанта, густина измене. Шредингерова једначина за молекуле, атомске јединице. Борн-Опенхајмерова апроксимација. Површ потенцијалне енергије, стационарне тачке, реакционе координате. Хартри-Фоков метод. Молекулски орбитални модел (Периодни систем, Копмансова теорема). Атом хелијума. Хемијска веза код H_2^+. Каноничке орбитале и локализоване орбитале, хибридизација. Основе пост-Хартри-Фокових метода (метода интеракције конфигурација и метод спрегнутих кластера).</p> <p><i>Практична настава</i></p> <p>Рачунске вежбе. Рад с програмским пакетима за рачунање структуре молекула.</p>
<p>Литература</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. С. Јеросимић, Увод у квантну механику за физикохемичаре, Факултет за физичку хемију, Београд, 2014. ISBN 978-86-82139-47-8 2. М. Перић, Структура и спектри молекула, САНУ, Београд, 2009. ISBN 978-86-7025-489-3 3. L. Piel, Ideas of Quantum Chemistry, Elsevier, USA, 2014. ISBN 978-0-444-59436-5 4. J. P. Lowe, K. A. Peterson, Quantum Chemistry, Elsevier, Academic Press, USA, 2006. ISBN 978-0-12-457551-6 5. A. Cooky, Physical Chemistry: Quantum Chemistry and Molecular Interactions, Pearson Education, 2014. ISBN 978-0-321-81416-6 6. D. O. Hayward, Quantum Mechanics for Chemists, The Royal Society of Chemistry, 2002. ISBN 0-85404-607-0 7. A. Szabo, N.S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry, Dover publications, New York, 1996. ISBN 0-486-69186-1 8. I. N. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall, New Jersey, 2000. ISBN 0-13-685512-1

Број часова активне наставе	Теоријска настава: 3	Практична настава: 3	
Методe извођења наставе			
Предавања, дискусије, рачунски задаци, домаћи задаци кроз решавање тестова преко <i>e-learning</i> платформе, практични рад с рачунарским програмима.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	15	израда извештаја са рачунарских вежби	5
три писмена наставна колоквијума са теоријом и рачунским задацима	45	усмени испит	30
решавање тестова на <i>E-learning</i> платформи РЦУБа	5		