

## Квантна хемија

ЕСПБ: 7

Ниво: Основни курс на студијском програму Основне студије Факултета за физичку хемију

Наставни семестар: сваки јесењи семестар (VII)

Испити: Статутом Факултета предвиђени испитни рокови.

Језик: српски

### Садржај предмета

Математичке основе квантне механике (векторски простори, ортонормиране базе, оператори, ермитски оператори, унитарни оператори, комутаторска алгебра, Диракова нотација, матрична репрезентација, решавање својствених проблема матрица, промена базе, континуална репрезентација, таласне функције). Постулати квантне механике. Квантна механика и мерење. Идентичне честице и Паулијев принцип, Слејтјева детерминанта. Момент импулса и спин. Једноставни системи: атом водоника и линеарни хармонијски осцилатор. Варијациони метод. Пертурбациони метод. Атом хелијума. Периодни систем елемената. Шредингерова једначина за молекуле, Борн-Опенхајмерова апроксимација. Површ електронске енергије (стационарне тачке, оптимизација молекулске геометрије). Теорија група и симетрије молекула. Репрезентација симетријских група, иредуцибилне репрезентације. Означавање молекулских стања применом теорије група. Прелази између стања применом теорије група. Основе *ab initio* метода: Хартри-Фоков метод, метода интеракције конфигурација, метода спрегнутих кластера. Теорија функционала густине.

### Исход учења

Са нагласком на теорију, овај наставни предмет служи као основа за студенте који ће се бавити теоријском хемијом, квантном хемијом, рачунарском хемијом, за оне који ће користити квантно- хемијске прорачуне у спрези са експерименталним радом, за студенте који ће се бавити спектроскопијом и за наставак образовања на мастер и докторским студијама из области физичке хемије, хемијске физике и теоријске хемије.

Студент може да се служи Дираковом нотацијом, има предглед егзактних решења Шредингерове једначине за важне системе, разуме основне поставке теоријске хемије, основне апроксимације које се користе, квантовање енергија, механичких момената и електричних диполних момената од значаја за спектроскопију, разуме концепт добрих квантних бројева, може да приступи квантно-хемијским прорачунима.

### Неопходна претходна знања

ОА.OS1002 – Математика 1

ОА.OS1003 – Увод у структуру материје

ОА.OS2003 – Физика 1

ОА.OS3001 – Математика 2

ОА.OS3002 – Физика 2

ОА.OS4001 – Атомистика

ОА.OS4002 – Физика 3

ОА.OS5001 – Атомска спектрохемија

ОА.OS6002 – Молекулска спектрохемија

Курс квантне хемије наставља се на курс Атомистике. Повезан је и са предметима Атомска спектрохемија и Молекулска спектрохемија, али више је теоријска основа тих предмета, Такође, пожељно је знање из предмета Статистичка термодинамика.

## Преклапање

Квантна хемија према свом садржају се у неким сегментима преклапа са Атомистиком, Атомском спектрохемијом и Молекулском спектрохемијом.

## Настава

Фонд часова је 3+3. Настава се одвија у следећим терминима: предавања средом од 13 до 15 часова у Коларчевом народном универзитету и сваког другог петка од 15 до 17 часова у ФХА. Теоријске вежбе се понедељком од 16 до 18 часова у ФХА и сваког другог петка од 15 до 17 часова у ФХА (погледати распоред за 4. годину) .

Студент који је пријављен за предмет Квантна хемија није обавезан да похађа предавање и вежбе и неће бити поена везано за присуство настави.

У току семестра студенти полажу предвиђене *наставне колоквијуме*. Три колоквијума, чији се датуми полагања унапред одређују, састоје се из решавања задатака и теоријских одговора. За решавање конкретних рачунских проблема потребно је знање које се стиче на предавањима и на вежбама (колоквијуми су везани и за предавања и за вежбе).

Сваки колоквијум се бодује од 0 до 15 поена. На сваком колоквијуму студент решава три задатка са по 5 поена, и у обавези је да уради 1 задатак комплетно да би положио колоквијум (или парцијално до износа од 5 поена). Распон поена са сва три колоквијума је од 15 до 45.

Друга обавеза су задаци који се добијају преко онлине апликације за предмет, који укупно доносе 5 поена.

Крајем семестра одржавају се две вежбе на рачунарима. Успешно урађени извештаји са вежбе доносе од 1 до 5 поена по свакој вежби, укупно 10. Ове вежбе су обавезне.

Студенти који нису могли изаћи на предвиђене термине колоквијума или су незадовољни својим резултатима, могу поново полагати исте у завршним недељама наставе јесењег семестра.

**Предиспитним обавезама студент укупно стиче до 60 поена од укупних 100. Минимум који је студент потребно да оствари на предиспитним обавезама, да би стекао право да изађе на испит је: колоквијуми 15 поена, задаци 2 поена, вежбе на рачунарима 3 поена, укупно 20/100. Минимум који је предвиђен за полагање испита је 51/100.**

## Информације о испиту.

Испити се одржавају у терминима и на начин предвиђен Статутом Факултета. Завршни испит се састоји из усменог испитивања. Усмено испитивање тестира способност студента да: репродукује градиво (оцена 6), разуме градиво (оцене 7 или 8), анализира, изводи закључке, упоређује, самостално размишља (оцене 9 или 10).

За усмено испитивање студент може, након извлачења цедуље са два или три питања, до 30 минута прелистати своје скрипте. У том случају, све што студент испише на папир као концепт неће се узимати у обзир приликом испитивања, већ ће само њему служити да се спреми за

полагање. Алтернативно, студент може да не користи скрипте, тада ће се његов концепт узети у обзир током полагања.

Завршни испит доноси од **21** до максимално **40 поена**. Поени су повезани са оценом на следећи начин: оцена шест (6) доноси 20.1 до 24 поена; оцена седам (7) доноси 24.1 до 28 поена; оцена осам (8) 28.1 до 32 поена; оцена девет (9) 32.1 до 36 поена и оцена десет (10) доноси 36.1 до 40 поена.

## Жалбе.

Студент може уложити формалну жалбу на оцену добијену на испиту, ако има примедбе на процедуру током испита.

Студенти који су незадовољни оценом на завршном испиту, могу регуларно поништити испит и поново изаћи на исти у неком од наредних рокова.

## Контакт информације.

Наставник: проф. др Станка Јеросимић  
 Е-mail: [stanka@ffh.bg.ac.rs](mailto:stanka@ffh.bg.ac.rs)  
 Соба 3720

Асистент: др Милан Миловановић, доцент  
 Е-mail: [milanm@ffh.bg.ac.rs](mailto:milanm@ffh.bg.ac.rs)  
 Соба 3720

Асистент: др Бранислав Миловановић, асистент  
 Е-mail: [branislavm@ffh.bg.ac.rs](mailto:branislavm@ffh.bg.ac.rs)  
 Соба 3720

Табеларни приказ расподеле поена:

Обавеза:	Обавезан број поена	Укупан број поена
3 колоквијума	$5+5+5 = 15$	$15+15+15 = 45$
Онлине задаци	2	5
Рачунарске вежбе	3	$5+5 = 10$
<b>Укупно предиспитне об.</b>	<b>20</b>	<b>60</b>
Испит	21	40

## Додатне информације за студенте који поново уписују предмет.

Студенти који су већ успешно положили колоквијуме током школске 2023/24 године не морају полагати поново и признају им се поени (од 5 до 15 на сваком колоквијуму). Задаци и рачунарске вежбе се поново раде.

Студенти који су апсолвенти и имају потврду о запослењу могу контактирати предметног наставника о евентуалном признању колоквијума од ранијих школских година. Предати молбу путем мејла на [stanka@ffh.bg.ac.rs](mailto:stanka@ffh.bg.ac.rs).